Computersimulation der Dynamik von Schicht und Vorschicht bei der Plasmaimmersions-Ionenimplantation

Boris Briehl

Dissertation
D 386

Vom Fachbereich Physik der Universität Kaiserslautern
zur Erlangung des akademischen Grades
„Doktor der Naturwissenschaften“ genehmigte Dissertation

Betreuer: Prof. Dr. H. M. Urbassek
Zweitgutachter: Priv.-Doz. Dr.-Ing. H. Gnaser

Datum der wissenschaftlichen Aussprache: 03.05.2002

„Wir wissen einige genau erfaßbare Gesetze, einige Grundbeziehungen zwischen unbegreiflichen Erscheinungen, das ist alles, der gewaltige Rest bleibt Geheimnis, dem Verstande unzugänglich.“

Friedrich Dürrenmatt, *Die Physiker*

Abstract

The aim of this thesis was to investigate the processes which happen in a plasma during the treatment of a target using the so called Plasma Immersion Ion Implantation (PIII) technology. For this purpose a Particle-In-Cell/Monte Carlo (PIC/MC) computer simulation algorithm was used which allows to make self consistent simulations of plasmas. Since the focus of this thesis was on the sheath and presheath of plasmas, a new method was developed that allows the simulation of the target-near part of a plasma without taking into account the whole plasma bulk. This implicates an enormous reduction in computational time. In order to allow the simulation of both, static and dynamic sheaths, the choice of appropriate boundary conditions towards the plasma bulk was paid great attention. The quality of the method was demonstrated by a comparison to results from the simulation of a whole plasma including the plasma bulk. The first applications of the new method were investigations of planar static sheaths with the target at floating potential and at a negative high voltage. It was shown that Child's law, which is used frequently in plasma physics, fails in the description of the potential distribution in these sheaths. By modifying the initial values used for integrating Child's law an almost perfect agreement between the simulations and the modified Child's law was achievied in the proximity of the target, where the electron density is depressed. Based on the fact that close to a target, which is immersed into a plasma, a floating potential sheath exists in which the ions show a drift towards the target and in which a gradient in the plasma density exists, such a sheath configuration was used in this thesis for the first time in PIII simulations. By comparing the results from such a simulation to those from a simulation using a uniform plasma without ion drift it could be demonstrated that the temporal evolution of the ion current density to the target in PIII cannot be modelled appropriate by using uniform plasmas. The dynamical behaviour of the sheath and presheath during PIII was analyzed by simulating the movement of iso-velocity loci of the ion drift velocity. It was shown that the response of the presheath on switching the target potential to a negative high voltage is delayed until the information of the voltage change arrives with the ion acoustic velocity. Based on these observations a simple analytical model was developed that allows to describe the response of the presheath on sheath expansion. In a next step a hybrid PIC/MC algorithm was developed in this thesis which models the isothermal electrons as so-called Boltzmann electrons, with their local number density depending only on the local potential. The considerable increase in computational speed by this modification made it possible to simulate the behaviour of the plasma in PIII on repeated negative high voltage pulses with different pulse parameters by a multitude of simulations. Its was found that the plasma recovery between the pulses and the ion saturation current, which has been neglected in all previous computational investigations, are very significant for PIII.

The second part of this thesis deals with the sheath and presheath close to two-dimensional patterned targets. A two-dimensional version of the previously developed hybrid PIC/MC algorithm was applied, in which the choice of boundary conditions on the target surface was paid great attention. Using a target consisting of double ridges

with trenches in between, a two-dimensional simulation of a floating potential sheath was realized in this work for the first time. Inside of one of the trenches a violation of Bohm's criterion could be verified in which the drift velocity of the ions at the sheath edge exceeds the Bohm velocity considerably. As a reason for this a geometric spread of the ion trajectories inside of the trench and a thereby caused divergence of the ion current density could be identified. Furthermore a strong variation in the electric field in the vicinity of the target was observed, which has its reason in the divergence of the electric field close to the convexe corners and in its vanishing behaviour close to the concave corners. The focussing effects due to the field at the convexe corners and the geometric spread of the ion trajectories inside of the trench give reason to a strong inhomogenity of the ion current density on the target surface. In connection with this the impingement angles also show a strong inhomogenity there. While up to now all two-dimensional PIII simulations used uniform plasmas as initial condition, a more realistic floating potential sheath and presheath was used in this work for the first time in such simulations. As a consequence, strong deviations in the current density of implantated ions could be demonstrated between results from the latter simulation and results gained from a simulation using a uniform plasma, which has been made for reason of comparison. The simulated dose of implanted ions also showed strong variations on the target surface which is again a consequence of the focussing and defocussing effects of the electric field. The dynamics of sheath and presheath in this simulation was analyzed by simulating the movement of iso-velocity loci of the ion drift velocity. A delayed response of the presheath and a transition from a cylindrical formed ion matrix sheath around the ridges to a planar high voltage sheath was observed and has been modelled successfully by an analytical model. Using the extension of diverging or concentrating ion currents in the modified Child's law an unterstanding of the potential distribution of the stationary high voltage sheath was achieved. Finally the behaviour of a plasma in the vicinity of several different two-dimensional targets consisting of ridges with trenches in between were studied in the aspect of technological use in a plasma assisted deposition of thin films on top of patterned surfaces.

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1

Einleitung

Der Begriff *Plasma* hat seinen Ursprung in dem griechischen Wort $\pi\lambda\alpha\sigma\mu\alpha$ (sprich: plásma) und bedeutet „das Gebildete, Geformte" [Baer, 2000]. Als physikalischer Begriff wurde das Wort von L. Tonks und I. Langmuir eingeführt, um damit bei ihren Untersuchungen über Oszillationen in ionisierten Gasen den Teil einer Bogenentladung zu beschreiben, in dem die Ionen und Elektronen eine große, aber gleiche Teilchendichte besitzen [Tonks und Langmuir, 1929]. Heute versteht man unter einem Plasma im physikalischen Sinn ganz allgemein ein System, dessen Eigenschaften durch vorhandene freie Ladungsträger entscheidend mitbestimmt werden. Meistens wird damit allerdings ein ionisiertes Gas beschrieben, das aus neutralen Atomen oder Molekülen, Ionen und Elektronen zusammengesetzt ist. Da die Ionen und Elektronen durch Ionisation neutraler Atome und Moleküle entstehen, ist ein Plasma von außen betrachtet insgesamt neutral, weil die negative Ladung der vorhandenen Elektronen durch eine gleich große positive Ladung der einfach oder mehrfach ionisierten Atome und Moleküle ausgeglichen wird. Man spricht dabei von der Quasineutralität des Plasmas. Die Coulomb-Wechselwirkung zwischen den Ladungsträgern in einem Plasma sorgt aber auch dafür, daß sich die vorhandenen Ladungen an jedem Ort im Plasma annäherend kompensieren und damit das Plasma auch lokal quasineutral ist. Etwa 99% der Materie im Universum befindet sich in Form von Sternen und Materie im interstellaren Raum im Zustand eines Plasmas, der aufgrund seiner Eigenschaften auch als ein neuer Aggregatzustand aufgefaßt werden kann. Damit steht das Plasma als vierter Aggregatzustand neben den Zuständen der festen Körper, der Flüssigkeiten und der Gase. Dieses Bild von den verschiedenen Zuständen der Materie wurde bereits im antiken Griechenland entwickelt, wo das Feuer als das vierte Element neben den Elementen Wasser, Erde und Luft galt. Heute wissen wir, daß die Flammen in einem Feuer tatsächlich als Plasma zu betrachten sind.

Plasmen existieren in einer schier unerschöpflichen Fülle, von der Abbildung 1.1 einen Eindruck zu vermitteln versucht. Allgemein unterscheidet man heute zwischen Hochtemperaturplasmen und Niedertemperaturplasmen, die im Grad der Ionisation verschieden sind. Die Physik der Hochtemperaturplasmen, als deren typische Vertreter die Fusions-

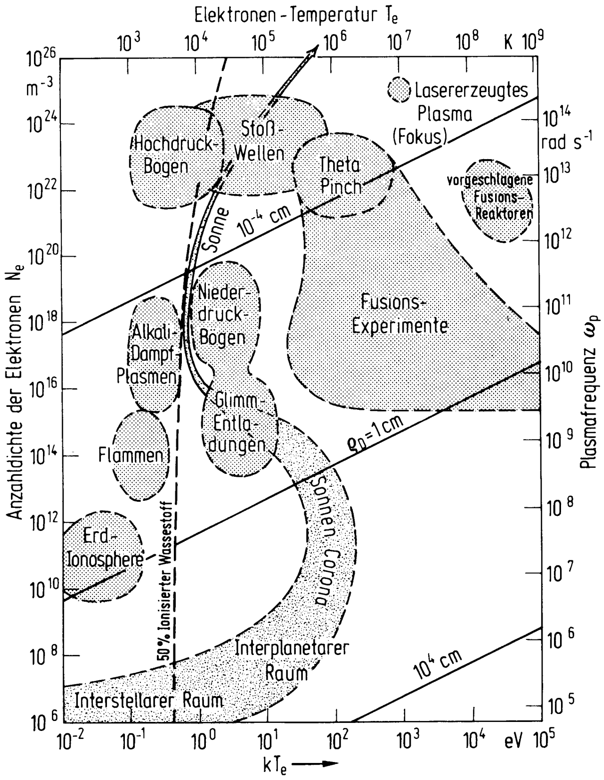

Abbildung 1.1: Darstellung und ungefähre Abgrenzung der Bereiche von Elektronentemperatur T_e und Anzahldichte der Elektronen N_e, in denen im Labor erzeugte Plasmen sowie atmosphärische und astrophysikalische Plasmen liegen. Daneben sind am rechten Rand die Elektronenplasmafrequenz ω_p sowie verschiedene Isolinien der Debye-Länge ρ_D, die die Rolle einer Abschirmlänge der Coulomb-Kräfte spielt, eingetragen. Das in der vorliegenden Arbeit simulierte Plasma liegt mit $N_\mathrm{e} \approx 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ und $kT_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ etwa im Bereich der Niederdruckbögen oder Glimmentladungen. Man beachte, daß im weiteren Verlauf dieser Arbeit für die genannten Größen, mit Ausnahme der Elektronentemperatur, andere Bezeichnungen verwendet werden. (Abbildung entnommen aus [Gobrecht, 1980], Abb. X,18)

plasmen gelten, erlebte seit Beginn des 20. Jahrhunderts eine schnelle Entwicklung sowohl in experimenteller wie auch in theoretischer Hinsicht. Dabei kam dieser Forschungsrichtung zugute, daß sie auf die weitentwickelten Methoden der Theorie der Gase zurückgreifen konnte, um die fast vollständig ionisierten Plasmen zu beschreiben. Die Entwicklung in der Niedertemperatur-Plasmaphysik schritt dagegen zunächst sehr langsam voran, weil der niedrige Grad der Ionisation und die damit in hohem Maße vorhandenen neutralen und angeregten Teilchen zu sehr viel komplexeren Phänomenen führten, als sie von den Hochtemperaturplasmen bekannt waren. Diese Phänomene und die Tatsache, daß Niedertemperaturplasmen ganz erheblich auch mit den Wände der Plasmakammer und sonstigen

Berandungen wechselwirken, machten die mathematische Beschreibung nicht gerade einfacher. Die Situation änderte sich jedoch in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts ganz erheblich durch den Einsatz verbesserter experimenteller Verfahren und nicht zuletzt auch durch die aufkommende Möglichkeit, Plasmen mittels Computer zu simulieren.

Heute spielen die Niedertemperaturplasmen eine weitaus größere Rolle als die Hochtemperaturplasmen, weil sie den breiten technologischen Einsatz erlauben und viele Technologien durch sie erst möglich werden. Aus diesem Grund beschreibt das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) die technologische Nutzung von Niedertemperaturplasmen, kurz Plasmatechnik genannt, mit folgenden Worten [2000]: „Aufgrund ihres breiten Anwendungspotenzials gehört die Plasmatechnik zu den Schlüsseltechnologien, mit denen in fast allen Bereichen nachhaltige Innovationslösungen geschaffen werden. [...] Der besondere Zukunftswert der Plasmatechnik und ihrer Anwendungen wird durch ihr hohes Potenzial für Innovationen, Wertschöpfung, Nachhaltigkeit und Wachstum, ihre technologische Breitenwirksamkeit und Umweltverträglichkeit bestimmt. Derzeit entwickelt sich die Plasmatechnik aufgrund erheblicher Fortschritte im wissenschaftlichen Verständnis von Plasmaprozessen zu einer Querschnittstechnologie, deren Zukunftspotenzial noch zu erschließen ist und deren Bedeutung ständig wächst.“ Als Beispiele der Plasmatechnik führt das BMBF auszugsweise die Erzeugung von Licht mittels Plasmastrahlern an, die im Jahr 2000 mit einer Zahl von weltweit etwa 3.25 Milliarden bereits achtzehnmal soviel Licht erzeugt haben wie die etwa 6 Milliarden Glühlampen, die gleichzeitig im Einsatz waren [Ecker, 2001]. Die größten und wichtigsten Anwendungsgebiete werden jedoch in der Herstellung neuer Materialien und der Strukturierung und Beschichtung von Oberflächen gesehen. Diese spielen beispielsweise bei der Härtung und Steigerung der Verschleißfestigkeit von Werkzeugen und Bohrern ein große Rolle. Aufgrund der bereits vorhandenen oder zu erwartenden wirtschaftlichen Bedeutung der Mikroelektronik und der Mikrosystemtechnik werden diese Bereiche mit zu den wichtigsten Anwendungsgebieten der Plasmatechnik zählen. Die Verfahren, die dabei zum Einsatz kommen, reichen von der Oberflächenreinigung und -aktivierung über das Plasmaätzen bis hin zur plasmaunterstützten Abscheidung dünner Schichten aus der Dampfphase heraus (PECVD), der Zerstäubung von Oberflächen mittels Plasmen und schließlich der Ionenimplantation in die Oberfläche von Substraten.

Bei der Ionenimplantation kamen bis vor kurzem ausschließlich Ionenstrahlen zur Anwendung. Dabei werden aus einem Plasma mittels eines Extraktionssystems, das beispielsweise aus einem dünnmaschigen Netz besteht, das gegenüber dem Plasma auf einem negativen Potential liegt, zunächst Ionen gewonnen, die anschließend mittels einer Ionenoptik zu einem dünnen Strahl gebündelt werden. Anschließend werden die Ionen in diesem Strahl auf Energien zwischen 1 und 100 keV gebracht und durch eine Ablenkeinheit, wie sie in ganz ähnlicher Form in Kathodenstrahlröhren zum Einsatz kommt, rasterartig über die Oberfläche des zu behandelnden Substrats oder Targets geführt. Sowohl der zeitliche Aufwand, der durch die langwierige Abrasterung der Targetoberfläche entsteht, als auch der apparative Aufwand können dabei beträchtlich sein. Um die Oberfläche eines dreidimensional geformten Targets von allen Seiten mit Ionen zu implantieren, muß das

Target auf einer beweglichen Halterung befestigt werden und anschließend durch Drehen und Neigen im Ionenstrahl bewegt werden. Um eine möglichst gleichmäßige Dosis der implantierten Ionen auf der gesamten Targetoberfläche zu erreichen, müssen diese Bewegungen sehr genau von einem Computer gesteuert werden. Gleichzeitig muß darauf geachtet werden, daß der Ionenstrahl möglichst senkrecht auf die Oberfläche trifft. Jeder schräge Einfall würde aufgrund der sofort zunehmenden Zerstäubung einen unerwünschten Abtrag der Targetoberfläche bedeuten. Diesem Problem wird zum Teil durch den Einsatz von Blenden begegnet, die den ohnehin schon dünnen Ionenstrahl noch weiter einschränken. Alle diese Nachteile haben letztlich dazu geführt, daß man sich auf die Suche nach neuen Technik für die Ionenimplantation begeben hat und mit der sogenannten Plasmaimmersions-Ionenimplantation eine neue, vielversprechende Technik entwickelt wurde.

Das Prinzip der Plasmaimmersions-Ionenimplantation (PIII) beruht darauf, das zu behandelnde Target direkt in ein Plasma zu tauchen und anschließend die Plasmaionen durch das Anlegen einer negativen Hochspannung an das Target direkt auf dieses zu beschleunigen [Lieberman und Lichtenberg, 1994a; Anders, 2000]. Mit dem Anlegen der Hochspannung reagieren zunächst die Plasmaelektronen auf der Zeitskala der inversen Elektronenplasmafrequenz, indem sie von dem Target zurückweichen. Da die Ionen aufgrund ihrer sehr viel größeren Masse erst auf der deutlichen längeren Zeitskala der inversen Ionenplasmafrequenz auf die Potentialveränderung des Targets reagieren, entsteht zunächst um das Target herum eine Schicht, die ausschließlich mit Ionen gefüllt ist. Unter dem Einfluß des elektrischen Feldes in dieser Schicht setzt eine Beschleunigung der Ionen auf das Target hin ein, wodurch der Implantationsstrom sehr schnell anwächst. Gleichzeitig dehnt sich die Schicht infolge der abnehmenden Raumladungsdichte immer mehr aus. Der Vorteil dieser Technik gegenüber der Ionenstrahl-Technik liegt darin, daß die Ionen jetzt von allen Seiten auf das Target stürzen und dadurch simultan in die gesamte Targetoberfläche implantiert werden. Dadurch können das Abrastern der Oberfläche und die komplexen Targetbewegungen vermieden werden. Gleichzeitig werden die Ionen in erster Näherung senkrecht auf die Oberfläche treffen und damit einerseits zu einer sehr homogenen Ionendosis als auch zu einer geringen Oberflächenzerstäubung beitragen. Diese Eigenschaften führen zu einem potentiell hohen Durchsatz der zu behandelnden Targets und versprechen einen breiten Einsatz in der industriellen Fertigung. Die negative Hochspannung wird bei der PIII in Form von Pulsen mit dazwischen liegenden Pausen angelegt. Diese Betriebsart hat mehrere Gründe: Zum einen kann durch das Anlegen von sehr kurzen Pulsen ein Funkendurchbruch auf der Targetoberfläche vermieden werden, durch den das Target beschädigt werden könnte. Außerdem ist es dadurch auch möglich, Targets aus isolierenden Materialien zu behandeln, weil die sich während eines Pulses auf der Targetoberfläche ansammelnde positive Ladung der Ionen in der darauffolgenden Pause durch einen Strom von Elektronen auf das Target neutralisiert werden kann. Zudem kann sich das Plasma durch ein Zusammenziehen der Schicht vor dem Target wieder regenerieren und dadurch gute Voraussetzungen für den nachfolgenden Hochspannungspuls schaffen. Schließlich ist es möglich, die sonst mit der Implantation hochenergetischer Ionen stets verbundene Zerstäubung der Targetoberfläche weitestgehend zu vermeiden. Dies geschieht dadurch, daß zwischen den Pulsen niederenergetische Plasmaionen mit Energien von einigen 10 eV auf die Targetoberfläche treffen und dort zum Wachstum einer dünnen Schicht, der sogenannten Opferschicht, führen können. Da die Zerstäubung an der Oberfläche stattfindet, führt der Beschuß des Targets mit hochenergetischen Plasmaionen in einem nachfolgenden Hochspannungspuls dazu, daß hauptsächlich die zuvor aufgewachsene Opferschicht wieder abgetragen wird, während das darunterliegende eigentliche Target erhalten bleibt. Diese Technik gehört zu dem Bereich der Plasmaimmersions-Ionenimplantation und Deposition (PIIID), die jedoch im folgenden einfach mit unter dem Begriff Plasmaimmersions-Ionenimplantation geführt werden soll. Aus all den genannten Gründen ist die PIII in den vergangenen Jahren immer mehr in den Blickpunkt der Forschung geraten und zum Gegenstand vieler Untersuchungen geworden.

In der Vergangenheit wurden zahlreiche analytische Untersuchungen der dynamischen Vorgänge durchgeführt, die sich bei der PIII an planaren [Lieberman, 1989; Riemann und Daube, 1999] sowie an sphärischen und zylindrischen Targets [Conrad, 1987; Scheuer *et al.*, 1990] abspielen. Dabei wurden die betrachteten Plasmen zunächst als stoßfrei angenommen und die Modelle anschließend in weiterführenden Arbeiten auch auf stoßbehaftete Plasmen ausgedehnt [Vahedi *et al.*, 1991]. Dadurch ist mittlerweile ein gewisses Verständnis der stattfindenden Prozesse entstanden. Gleichzeitig und im Vorfeld wurden eine Vielzahl von Computersimulationen der PIII an planaren Targets gemacht, mit denen diese Modelle bestätigt werden konnten [Vahedi *et al.*, 1991; Hahn und Lee, 1992; Emmert und Henry, 1992; Sheridan und Goeckner, 1995]. Auch die experimentelle Untersuchung der Vorgänge zeigte eine befriedigende Übereinstimmung zu den entwickelten Modellen [Cho *et al.*, 1988; Xia und Chan, 1993]. Durch die ständig wachsende Rechenleistung moderner Computer wurde es bald möglich, die PIII auch an zweidimensionalen Targets zu simulieren [Sheridan und Alport, 1994; Hong und Emmert, 1995]. Dadurch sollte unter anderem beantwortet werden, welchen Einfluß die im Zusammenhang mit Kanten und Ecken auftretenden elektrischen Felder auf die Dosisverteilung der Ionen auf der Targetoberflächen haben. Dieser Fragestellung wurde in jüngster Zeit auch in experimentellen Untersuchungen nachgegangen [Mändl *et al.*, 1997; Ensinger *et al.*, 1999].

Bei allen bisher entwickelten analytischen Modellen der PIII wird davon ausgegangen, daß das Plasma bis zur Oberfläche des Targets hin völlig homogen ist. In den bisher durchgeführten Computersimulationen geht man sogar noch einen Schritt weiter und nimmt an, daß die Ionen zudem auch keine Driftgeschwindigkeit besitzen und daher am Anfang völlig stationär sind. In der Realität bildet sich jedoch in der Umgebung des Targets eine Plasmarandschicht, bestehend aus Schicht und Vorschicht, aus, sobald dieses in das Plasma gebracht wird [Chapman, 1980; Lieberman und Lichtenberg, 1994a]. In der Schicht haben Ionen und Elektronen sehr unterschiedliche Teilchendichten und ihre Dichteverteilungen sowie die Potentialverteilung weisen deutliche Gradienten auf. Zwischen der Schicht und dem eigentlichen Plasmainneren existiert außerdem in stoßbehafteten Plasmen eine sogenannte Vorschicht, in der das Plasma quasineutral ist und trotzdem ein schwaches elektrisches Feld vorhanden ist. Durch dieses werden die Ionen auf die Bohmgeschwindigkeit beschleunigt, mit der sie an der Schichtkante in die Schicht eintreten [Riemann, 1991]. Das Verhalten der Vorschicht ist erst vor kurzem in den Blickpunkt experimenteller Untersuchungen gerückt [Brutscher *et al.*, 1996; Günzel und Brutscher, 1996] und modellhafte Vorstellungen liegen nur in sehr einfacher Form vor [Mändl, 1997].

In der vorliegenden Arbeit soll die Rolle der Plasmarandschicht für die PIII sowie das Verhalten der Vorschicht während der PIII mittels Computersimulationen untersucht werden. Dabei kommt ein Particle-In-Cell/Monte Carlo-Verfahren (PIC/MC) [Hockney und Eastwood, 1994; Birdsall, 1991; Birdsall und Langdon, 1995] zum Einsatz, das die selbstkonsistente Simulation von Plasmen erlaubt und das in Anhang A beschrieben wird. Die Arbeit ist in zwei Teile gegliedert. Der erste Teil beschäftigt sich mit der Simulation von statischen und dynamischen Plasmarandschichten in der Nähe von planaren Targets. Da der Schwerpunkt der Arbeit auf der Schicht und Vorschicht des Plasmas liegt, werden in Anhang B Randbedingungen entwickelt, die die Simulation von planaren Plasmarandschichten erlauben, ohne den Plasmabulk mit in die Berechnungen aufnehmen zu müssen. In Kapitel 2 wird die Güte des Verfahrens im Vergleich zu einer Simulation, die das gesamten Plasma berücksichtigt, unter Beweis gestellt. Gleichzeitig wird dort die erste Untersuchung einer Plasmarandschicht vor einer planaren Wand durchgeführt, bei der die Wand auf dem Floatingpotential des simulierten Argon-Plasmas liegt. In Kapitel 3 wird untersucht, inwieweit sich das Child-Langmuir-Gesetz, das in der Plasmaphysik häufige Anwendung findet, eignet, um die Potentialverteilung von simulierten planaren Plasmarandschichten zu beschreiben, wenn an der Wand das Floatingpotential oder eine negative Hochspannung anliegt. In Kapitel 4 werden erstmals Ergebnisse aus Computersimulationen zur PIII an einer Wand vorgestellt, bei der der Anfangszustand des Plasmas einer Floatingpotential-Randschicht entspricht und nicht, wie bisher üblich, einem homogenen driftfreien Plasma. Die Dynamik der dabei auftretende Schichtexpansion wird in Kapitel 5 beleuchtet. Gleichzeitig wird erstmal in Computersimulationen auch die Dynamik der Vorschicht eingehend untersucht, die in den anfangs homogenen driftfreien Plasmen anderer Simulation gar nicht beobachtet werden konnte. Es wird ein einfaches analytisches Modell vorgestellt, das die simulierte Vorschichtreaktion sehr gut wiedergeben kann. Im Anschluß daran werden in Kapitel 6 Ergebnisse aus einer ganzen Reihe von planaren PIII-Simulationen präsentiert, mit denen das Verhalten des Plasmas bei perdiodisch angelegten Hochspannungspulsen mit unterschiedlichen Pulsfrequenzen, Pulslängen und Pausen zwischen den Pulsen untersucht wird. Dabei kommt ein hybrides PIC/MC-Verfahren zur Anwendung, bei dem die lokale Dichte der Elektronen über einen Boltzmann-Ansatz nur noch vom lokalen elektrischen Potential abhängt. Dieses Verfahren, das einen deutlichen Geschwindigkeitszuwachs der Simulationen mit sich bringt, wird in Anhang C entwickelt und vorgestellt. Der zweite Teil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der Simulation von statischen und dynamischen Plasmarandschichten in der Nähe von zweidimensionalen Targets. Die untersuchten Targets bestehen aus einer periodischen Anordnung von Stegen mit dazwischen liegenden Gräben. In den Simulationen kommt eine zweidimensionale Version des entwickelten hybriden PIC/MC-Verfahrens zum Einsatz, das in Anhang D erläutert wird. Die benutzten Randbedingungen auf der Seite der zweidimensionalen Targets werden in Anhang E vorgestellt. Im Rahmen dieser Arbeit werden erstmals Computersimulationen einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht durchgeführt. Die Ergebnisse dieser Simulationen werden in Kapitel 7 vorgestellt. Darüber hinaus werden auch zum ersten Mal Simulationen der PIII an einem zweidimensionalen Target durchgeführt, bei denen als Anfangszustand eine stationäre Floatingpotential-Randschicht verwendet wird. Die Ergebnisse dieser Simulationen werden in Kapitel 8 diskutiert und den Ergebnissen aus einer ebenfalls gemachten Simulation, bei der das Plasma zu Beginn homogen und driftfrei ist, gegenübergestellt. Die sich am Ende der Schichtexpansion in der Simulation einstellende zweidimensionale stationäre Hochspannungsrandschicht wird in Kapitel 9 genau untersucht. Zum Abschluß der Untersuchungen der PIII an dem zweidimensionalen Target wird in Kapitel 10 noch auf die Dynamik der Schicht und Vorschicht eingegangen und die Simulationsergebnisse mit einem entwickelten analytischen Modell verglichen. Schließlich wird in Kapitel 11 anhand der Ergebnisse aus mehreren Simulationen der Floatingpotential-Randschicht in der Nähe von verschiedenen zweidimensionalen Targets diskutiert, inwieweit eine plasmagestützte Schichtabscheidung sinnvoll ist. Gleichzeitig wird versucht, Rückschlüsse auf die Eigenschaften der dabei aufwachsenden Schichten zu ziehen. Eine Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit wird im Anschluß daran in Kapitel 12 gegeben.

Teil I

Planare statische und dynamische Plasmarandschichten

Kapitel 2

Simulation von Schicht und Vorschicht vor einer planaren Wand

2.1 Einleitung

Bei der Plasmaimmersions-Ionenimplantation (PIII) wird ein zu bearbeitendes Werkstück oder Target direkt in ein Plasma eingetaucht. Bevor es jedoch zur Implantation von Ionen durch Anlegen einer – in Bezug auf das Plasma – negativen Hochspannung an das Target kommt, bildet sich eine Randschicht des Plasmas in der unmittelbaren Umgebung des Werkstücks aus [Chapman, 1980; Lieberman und Lichtenberg, 1994a]. Dabei baut sich zwischen dem Plasmainneren und dem Target ein Potentialunterschied auf, das Target befindet sich gegenüber dem Plasma auf Floatingpotential. Dieser Potentialunterschied sorgt dafür, daß sich die Verlustströme der Ionen und Elektronen aus dem Plasma auf das Target gerade kompensieren und das Plasma so in einem Gleichgewichtszustand bleibt. In diesem Kapitel werden nun die Eigenschaften einer solchen Gleichgewichtsrandschicht vor einer planaren Wand, die das Target darstellt, untersucht.

2.2 Simulation einer planaren Floatingpotential-Randschicht

Unter Verwendung eines eindimensionalen PIC/MC-Verfahrens, das in Anhang A näher beschrieben wird, wurde eine statische Plasmarandschicht der Dicke L in der Nähe einer unendlich ausgedehnten planaren Wand simuliert. Die Plasmarandschicht umfaßte dabei die eigentliche Schicht sowie einen Teil der Vorschicht. Als Trägergas des Plasmas wurde Argon mit einer Neutralgasdichte von $n_0 = 2.57 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$ und einer Temperatur von $T_0 = 300\,\mathrm{K}$, entsprechend einem Druck von $p_0 = 0.1\,\mathrm{Pa}$, verwendet. Die Temperatur der Ionen betrug $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$, die Elektronentemperatur war $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$. Die

Bohmgeschwindigkeit der Ionen lag damit bei $v_B = \sqrt{k_B T_e / m_i} = 4400\,\mathrm{m/s}$. Die Randbedingungen für die Wand auf der linken Seite (bei $x = 0$) und für die rechte Berandung des Simulationsgebietes bei $x = L$, die im Bereich der Vorschicht liegt, wurden nach der in Anhang B beschriebenen Vorgehensweise bestimmt. Entsprechend der Bedingung (B.8) wurde als Potentialunterschied zwischen dem rechten Rand ($\Phi = 0$) und der linken Wand der Wert $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ vorgegeben. Daraus erhält man für die mittlere Einströmgeschwindigkeit der Ar^+-Ionen in das Simulationsvolumen bei $x = L$ nach Gleichung (B.5) den Bruchteil $\alpha = 0.7$ der Bohmgeschwindigkeit v_B. Die Plasmadichte wurde dort zu $n_p = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ gewählt. Damit lassen sich für die Teilchenströme am rechten Rand die Stromdichten $j_i = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ für die Ionen und $j_e = 1516\,\mathrm{A/m^2}$ für die Elektronen berechnen. Für die Länge des Simulationsgebietes ergab sich mit den gewählten Parametern der Wert $L = 2.5\,\mathrm{cm}$. Die Zellenlänge betrug $\Delta x = 0.1\,\mathrm{mm}$, die Länge eines Zeitschritts $\Delta t = 2 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{s}$. Die gewählten Parameter sind typisch für ein Plasma, das unter anderem in der Oberflächenanalyse mittels Hochfrequenz-Sekundärteilchen-Massenspektrometrie (high-frequency secondary-neutral-mass spectrometry, HF-SNMS) eingesetzt wird [Oechsner, 1995; Krimke *et al.*, 1997].

Die Elektronen konnten elastische Stöße mit dem neutralen Ar-Hintergrundgas durchführen. Der Streuquerschnitt dafür beträgt bei der mittleren Elektronenenergie von $k_B T_e = 8\,\mathrm{eV}$ etwa $12\,\mathrm{\AA}^2$ [Dasgupta und Bhatia, 1985], entsprechende einer mittleren freien Weglänge von 32 cm. Für die Ausbildung einer Vorschicht in einem planaren Plasma ist es notwendig, daß die Ionen auf ihrem Weg zur Wand durch Stöße gebremst werden oder der Ionenstrom in Richtung der Wand durch Ionisationsprozesse zunimmt [Riemann, 1991]. Daher wurden für die Ar^+-Ionen elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße mit den neutralen Ar-Atomen zugelassen. Die Querschnitte für diese Prozesse betragen bei der Bohmgeschwindigkeit $v_B = 4400\,\mathrm{m/s}$ etwa $36\,\mathrm{\AA}^2$ bzw. $40\,\mathrm{\AA}^2$ [Cramer, 1959], die zugehörigen mittleren freien Weglängen liegen bei 11 cm bzw. 10 cm. Mit dem totalen Streu- und Reaktionsquerschnitt der Ionen von $76\,\mathrm{\AA}^2$ liegt die freie Weglänge λ_{tot} also im Bereich von 5 cm. Das bedeutet, daß der Bruchteil von $e^{-L/\lambda_{tot}} = 0.61$ der Ionen das Simulationsgebiet der Länge $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ stoßfrei durchlaufen konnte, während etwa 39% aller Ionen elastische oder Ladungsaustauschstöße auf ihrem Weg zur Wand machten.

2.2.1 Dichte- und Potentialverteilungen in der Plasmarandschicht

Abbildung 2.1 zeigt die Gleichgewichtsverteilungen der Teilchendichten und des elektrischen Potentials, wie sie sich aus der Simulation ergeben haben. Die Dichten der Ionen und Elektronen nehmen von rechts nach links monoton ab, stimmen aber bis zu einem Abstand von fast 3 mm von der Wand nahezu überein. Dieser Bereich, in dem das System quasineutral ist, kennzeichnet daher die Vorschicht des Plasmas. Trotz Quasineutralitat ist die Potentialkurve aber negativ gekrümmt und das Potential fällt von seinem vorge-

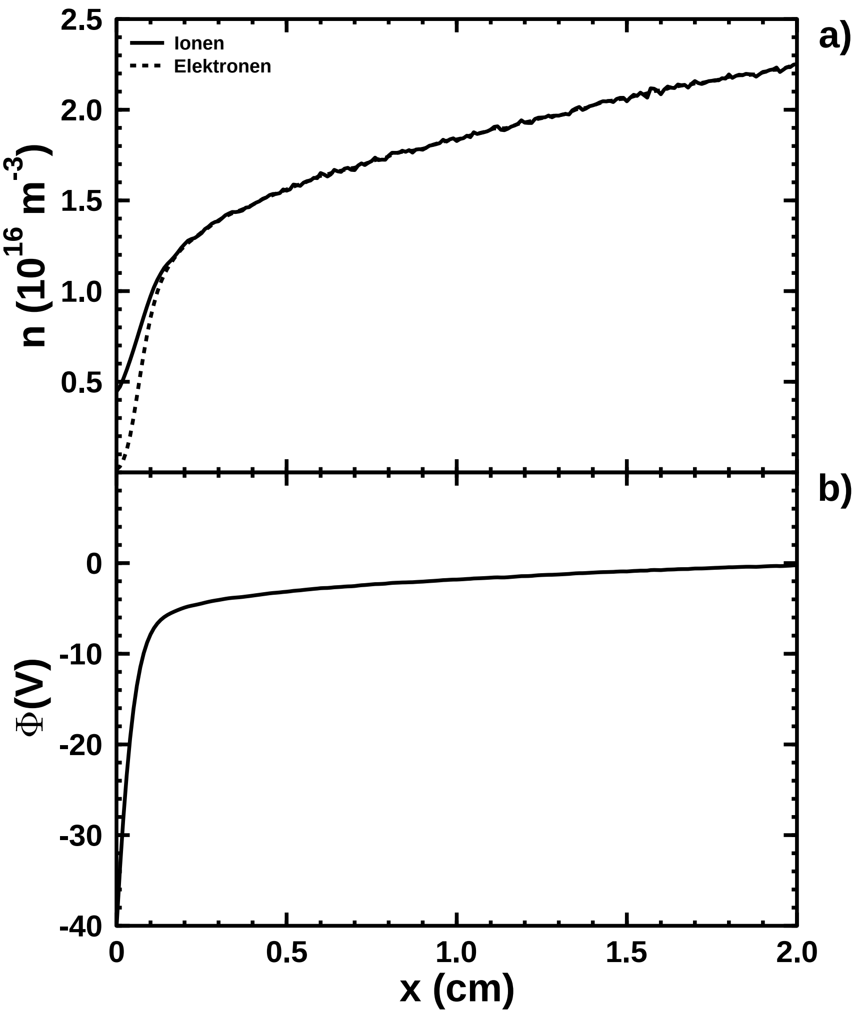

Abbildung 2.1: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen und b) Potentialverteilung in einer stationäre Plasmarandschicht bei Anliegen des Floatingpotentials an der Wand.

gebenen Wert $\Phi = 0$ auf der rechten Seite auf $-k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ bei $x = 2.7\,\mathrm{mm}$ ab. Der Grund dafür liegt darin, daß die Ionen auf ihrem Weg zur Wand mehr Stöße mit den neutralen Ar-Atomen durchführen und bei jedem elastischen Stoß mehr Energie verlieren als die Elektronen bzw. bei jedem Ladungsaustauschstoß ein thermisches Ion entsteht. Aufgrund der Stromerhaltung muß daher die Dichte der abgebremsten Ionen an jeder Stelle in der Vorschicht zunehmen. Sie erreicht schließlich sogar geringfügig höhere Werte als die Dichte der Elektronen, wodurch eine positive Raumladung entsteht. Daraus resultiert ein elektrisches Feld mit einem Betrag in der Größenordnung von $100\,\mathrm{V/m}$, in dem die Ionen wieder beschleunigt werden. In diesem Wechselspiel von Abbremsung und Beschleunigung überwiegt aber letztendlich die Beschleunigung, durch die die Ionen schließlich die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ bei $x = 2.7\,\mathrm{mm}$ erreichen (Abbildung 2.2). Diese

Stelle markiert daher den Ort der Schichtkante. Bei weiterer Annäherung an die Wand nimmt die Elektronendichte dann stärker als die Ionendichte ab und es entsteht eine starke positive Raumladungsschicht, in der das Potential sehr schnell auf $-40.285\,\mathrm{V}$ an der Wand abnimmt. Dieser Bereich stellt die eigentliche Plasmaschicht dar. Das elektrische Feld nimmt dort Beträge in der Größenordnung von $10^3\,\mathrm{V/m}$ bis einige $10^4\,\mathrm{V/m}$ an und beschleunigt die Ionen auf eine Maximalgeschwindigkeit von etwa $14000\,\mathrm{m/s}$ an der Wand. Aufgrund der Stromerhaltung nimmt die Ionenwandstromdichte den Wert der eingekoppelten Stromdichte von etwa $10\,\mathrm{A/m^2}$ an. Der Potentialabfall von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ zwischen Plasma und Wand stellt für die Elektronen dagegen eine Barriere dar, die bewirkt, daß nur $e^{-\Delta\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} = 6.5 \cdot 10^{-3}$ aller Elektronen die Wand auch wirklich erreichen.

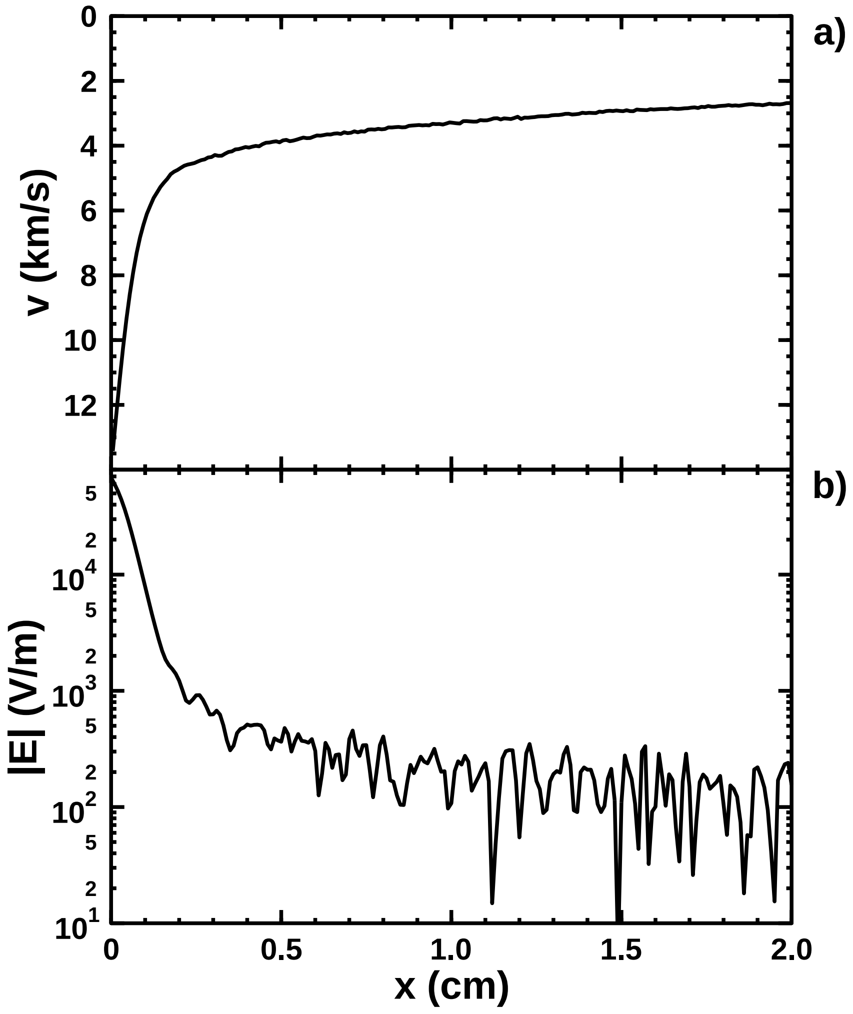

Abbildung 2.2: a) Geschwindigkeitsverteilung der Ionen und b) elektrische Feldverteilung in einer stationäre Plasmarandschicht bei Anliegen des Floatingpotentials an der Wand.

Die Wandstromdichte der Elektronen reduziert sich damit gegenüber der eingekoppelten Stromdichte von 1516 A/m^2 auch um diesen Faktor auf etwa 10 A/m^2, sodaß schließlich genauso viele Elektronen wie Ionen das Plasma pro Zeiteinheit verlassen. Die beobachteten Verteilungen zeigen gute qualitative Übereinstimmungen mit experimentell vermessenen Plasmarandschichten [Brutscher *et al.*, 1996].

In der Plasmaphysik wird üblicherweise das Child-Langmuir-Gesetz

$$j_\mathrm{i} = \frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_\mathrm{i}}\right)^{1/2} \frac{(\Delta\Phi)^{3/2}}{d^2} \tag{2.1}$$

verwendet, um die Ausdehnung d einer planaren Plasmaschicht zu berechnen [Lieberman und Lichtenberg, 1994a]. Die simulierte Schichtdicke ist jedoch mit 2.7 mm deutlich größer, als die mit dem Child-Langmuir-Gesetz (Gleichung (2.1)) berechnete Dicke von nur 0.44 mm. Dabei wurde für j_i die eingekoppelte Ionenstromdichte von 9.86 A/m^2 und für $\Delta\Phi$ der Potentialunterschied von rund 36 V zwischen linker Wand ($\Phi = -40.285$ V) und der Schichtkante ($\Phi = -4$ V) verwendet. Wie in Kapitel 3 gezeigt wird, eignet sich das Child-Langmuir-Gesetz nicht besonders gut zur Beschreibung der Potentialverteilung in einer Plasmarandschicht, bei der die Wand gegenüber dem Plasmainneren auf Floatingpotential liegt. Während das Child-Langmuir-Gesetz nämlich von der Annahme ausgeht, daß sich nur Ionen in der Schicht befinden, ist die Dichte der Elektronen im größten Teil der Schicht tatsächlich noch zu groß, um vernachlässigt werden zu können. So beträgt die Elektronendichte mit $n_\mathrm{e} = 3.0 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ an der Stelle $x = 0.5$ mm, wo das elektrische Potential Φ bereits auf $-2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e = -16$ V abgefallen ist, immer noch beinahe die Hälfte der Ionendichte dort. Außerdem können die Ionengeschwindigkeit v_B sowie das elektrische Feld an der Schichtkante gegenüber der Maximalgeschwindigkeit bzw. dem maximalen elektrischen Feld an der Wand nicht vernachlässigt werden, wie es das Child-Langmuir-Gesetz voraussetzt. Eine deutlich bessere Beschreibung, wenn auch nur für einen kleinen Teil der wandnahen Schicht, ist mit dem ebenfalls in Kapitel 3 hergeleiteten modifizierten Child-Langmuir-Gesetz möglich.

2.2.2 Energie- und Winkelverteilungen der Ionen und Elektronen beim Auftreffen auf die Wand

In diesem Abschnitt werden die Energie- und Winkelverteilungen vorgestellt, mit denen die Ionen und Elektronen auf die planare Wand auftreffen. Abbildung 2.3 zeigt die simulierten Energieverteilungen der Ionen und Elektronen zusammen mit einer berechneten Elektronenenergieverteilung. Die Verteilungen zeigen die relativen Häufigkeiten der Energien, mit denen Ionen und Elektronen im detektierten Energiebereich von 0 bis 50 eV auf die Wand aufgetroffen sind. Dabei ist zu beachten, daß die Verteilungen der Elektronen der besseren Sichtbarkeit wegen um den Faktor 8 vergrößert dargestellt sind. Die simulierte Energieverteilung für die Elektronen deckt sich gut mit der berechneten Verteilung und folgt damit einem Verlauf proportional zu $E \cdot e^{-E/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}$. Die Herleitung dieser Formel wird

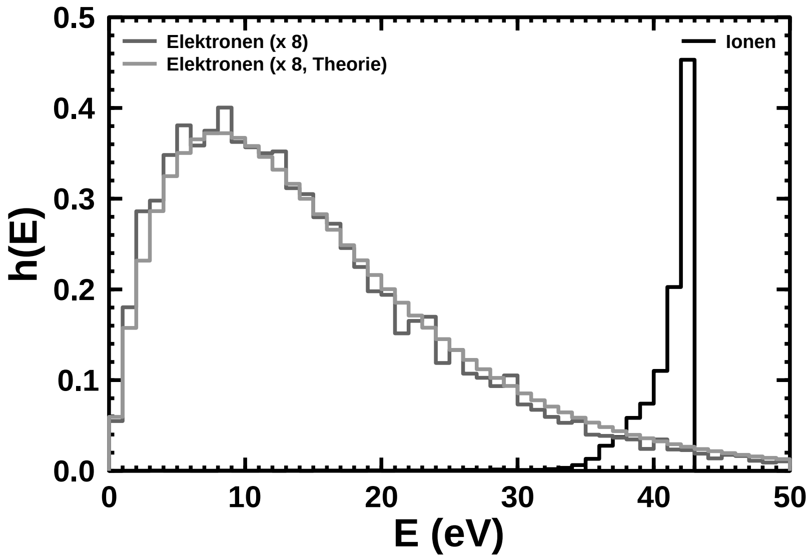

Abbildung 2.3: Relative Häufigkeiten der Energien, mit denen die Ionen und Elektronen auf die Wand auftreffen. Die Verteilungen der Elektronen sind der besseren Sichtbarkeit wegen um den Faktor 8 vergrößert dargestellt.

in Anhang F durchgeführt. Es ist bemerkenswert, daß diese Verteilung unabhängig ist vom Plasma-Wand-Potential und stets ein Maximum bei der Energie $E = k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}$ aufweist. Die Energieverteilung der Ionen zeigt ein Maximum im Intervall zwischen 42 und 43 eV. In diesem Energiebereich liegt die Summe aus der Schwerpunktsenergie $\frac{1}{2}m_{\mathrm{i}}(\alpha v_{\mathrm{B}})^2 = 1.96\,\mathrm{eV}$ (mit $\alpha = 0.7$) des eingekoppelten Ionenstrahls und der kinetischen Energie, die beim Durchfallen der Potentialdifferenz von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ gewonnen wird. Die thermische Energie der Ionen von $\frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{i}} = 39\,\mathrm{meV}$ relativ zur Schwerpunktsbewegung kann dabei vernachlässigt werden. In einem stoßfreien Plasma sollten alle Ionen mit einer Energie aus dem genannten Intervall auf die Wand auftreffen. Tatsächlich befinden sich jedoch nur noch knapp 46% aller Ionen in diesem Energieintervall. Etwa 54% der Ionen besitzen dagegen Energien kleiner als 42 eV, was auf Energieverluste durch Stöße mit den neutralen Ar-Atomen zurückzuführen ist.

Zum Abschluß der Untersuchung der Eigenschaften einer planaren Plasmarandschicht wurden noch die Winkelverteilungen der pro Zeiteinheit auf die Wand treffenden Teilchen aufgezeichnet. Abbildung 2.4 zeigt die simulierten Winkelverteilungen der Ionen und Elektronen zusammen mit einer berechneten Verteilung für die Elektronen. Die Verteilungen der Elektronen sind der besseren Sichtbarkeit wegen wieder vergrößert dargestellt. Wie zu erkennen ist, folgt die simulierte Verteilung der Elektronen der berechneten $\sin\vartheta\cos\vartheta$-Verteilung (Herleitung in Anhang F) sehr gut. Der Winkel ϑ wird dabei relativ zur Flächennormale gemessen. Auch diese Verteilung ist, ähnlich wie die Energieverteilung der Elektronen, unabhängig vom Plasma-Wand-Potential. Die Elektronen-Winkelverteilung hat ein Maximum bei 45° und ist Null für streifenden und für senkrechten Einfall. Die

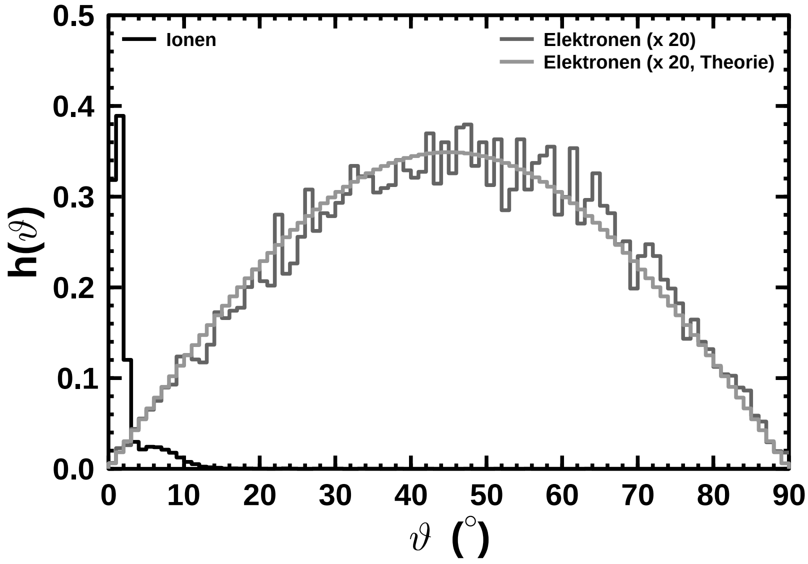

Abbildung 2.4: Relative Häufigkeiten der relativ zur Flächennormale gemessenen Winkel, unter denen die Ionen und Elektronen auf die Wand treffen. Die Verteilungen für die Elektronen sind der besseren Sichtbarkeit wegen um den Faktor 20 vergrößert dargestellt.

Winkelverteilung der Ionen zeigt ein deutliches Maximum im Intervall zwischen 1° und 2°, zu dem etwa 39% aller Ionen beitragen. Dieses Maximum stammt wiederum von den Ionen, die mit der Energie $E = \frac{1}{2}m_\mathrm{i}(\alpha v_\mathrm{B})^2 + e\Delta\Phi = 42.2\,\mathrm{eV}$ und daher mit der Geschwindigkeit $v_x = 14300\,\mathrm{m/s}$ in Richtung der Flächennormalen auf die Wand treffen. Mit der mittleren transversalen Ionen-Geschwindigkeit $\overline{v_\perp} = (\pi k_\mathrm{B} T_\mathrm{i}/2m_\mathrm{i})^{1/2} = 310\,\mathrm{m/s}$ ergibt sich für den Aufschlagwinkel $\vartheta \approx \tan\vartheta = \overline{v_\perp}/v_x = 2.2\cdot 10^{-2}$ bzw. $\vartheta \approx 1.3°$, was sich gut mit dem beobachteten Wert deckt. Insgesamt beträgt der Auftreffwinkel in 83% aller Fälle weniger als 3°. Die größeren Winkel, die bis $\vartheta \leq 14°$ noch im Bereich von einem Promille bis einigen Prozenten auftreten, stammen dagegen wieder von den durch Ladungsaustausch entstandenen thermischen Ionen bzw. den durch elastischen Stößen abgelenkten Ionen. Bei diesen Teilchen hat die transversale Bewegung noch einen größeren Anteil an der Gesamtbewegung.

2.3 Vergleichende Simulation eines gesamten Plasmas

In diesem Abschnitt soll nun untersucht werden, wie gut das Verfahren ist, mit dem die Plasmarandschicht aus dem vorigen Abschnitt simuliert wurde. Dazu wurde eine vergleichende Simulation durchgeführt, bei der nicht nur die Plasmaschicht sowie ein Ausschnitt aus der Vorschicht simuliert wurde, sondern das gesamte Plasmas betrachtet wurde.

2.3.1 Das simulierte Plasma

Um die Resultate der verschiedenen Simulationstechniken miteinander vergleichen zu können, sollte das simulierte gesamte Plasma möglichst die gleichen Eigenschaften haben wie im Fall der Randschichtsimulation. Es wurde daher versucht, ein Argon-Plasma mit einer Elektronentemperatur von etwa $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ zu erzeugen. Die Ionentemperatur sollte wie zuvor wieder bei $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$ liegen. Außerdem wurde wieder ein Ar-Hintergrundgas mit der Dichte $n_0 = 2.6 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$ und der Temperatur $T_0 = 300\,\mathrm{K}$ benutzt. Genau wie in der Randschichtsimulation wurden als mögliche Stöße wieder elastische Stöße zwischen den Elektronen und den neutralen Ar-Atomen sowie elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße zwischen den Ar-Ionen und den neutralen Ar-Atomen zugelassen.

Zur Simulation eines gesamten Plasmas wurde nun ein einfaches Verfahren gewählt, bei dem die Ionen und Elektronen im mittleren Drittel einer planaren Plasmakammer räumlich homogen mit einer festen Rate ζ erzeugt werden. Praktisch ist die Realisierung einer solchen Quelle so denkbar, daß in einer gasgefüllten Kammer Ionisationsprozesse durch energiereiche Elektronenstrahlen oder durch Photoionisation mittels Laser hervorgerufen werden [Dunn und Self, 1964; Procassini *et al.*, 1990]. Der Abstand zwischen den parallelen Kammerwänden betrug in der Simulation 6 cm. Die Erzeugungsrate ζ wurde so gewählt, daß die Wandstromdichte der Ionen und Elektronen im Gleichgewicht jeweils $j_\mathrm{W} = 9.86\,\mathrm{A/m}^2$ beträgt. Aus der Länge des Ionisationsgebietes $l_\mathrm{gen} = 2\,\mathrm{cm}$ zwischen $x_0 \stackrel{\mathrm{def}}{=} 2.0\,\mathrm{cm}$ und $x_1 \stackrel{\mathrm{def}}{=} 4.0\,\mathrm{cm}$ sowie der vorgegebenen Wandstromdichte läßt sich die Erzeugungsrate $\zeta = 2j_\mathrm{W}/el_\mathrm{gen} = 6.15 \cdot 10^{21}\,\mathrm{m}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$ berechnet. Die Wände wurden auf ein Potential von $-40.285\,\mathrm{V}$ gelegt. Sowohl die Ionen als auch die Elektronen wurden mit isotropen, thermischen Geschwindigkeitsverteilungen, deren Schwerpunktsgeschwindigkeit jeweils Null war, erzeugt. Die Ionen wurden mit der gewünschten Temperatur von $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$ eingekoppelt. Die Elektronen dagegen wurden mit der Temperatur von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e,gen} = 50\,\mathrm{eV}$ erzeugt. Es stellte sich dann eine annäherend isotrope Elektronentemperatur-Verteilung ein, bei der die Temperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ überall im Plasma zwischen 7.5 und 8.5 eV lag.

In Abbildung 2.5 sind nun die Teilchendichten sowie die Potentialverteilung dargestellt, wie sie sich aus der Simulation ergeben haben. Die Teilchendichten weisen Verteilungen auf, wie sie typisch sind für die beschriebene Art der Plasmaheizung [Dunn und Self, 1964; Procassini *et al.*, 1990]. Im Bereich des Ionisationsgebietes zwischen $x = x_0$ und $x = x_1$ zeigt sich ein parabelförmiges Dichteprofil, in dem die Dichten deutlich größer sind als im restlichen Plasma. Die Form der Verteilung laßt sich leicht verstehen, wenn man von der Kontinuitätgleichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \zeta \tag{2.2}$$

einer sich im Gleichgewicht befindlichen Plasmakomponente mit konstanter Erzeugungsrate ζ ausgeht und für den Teilchenstrom die Diffusionsbeziehung

$$\vec{j} = -D_\mathrm{a}\vec{\nabla} n \tag{2.3}$$

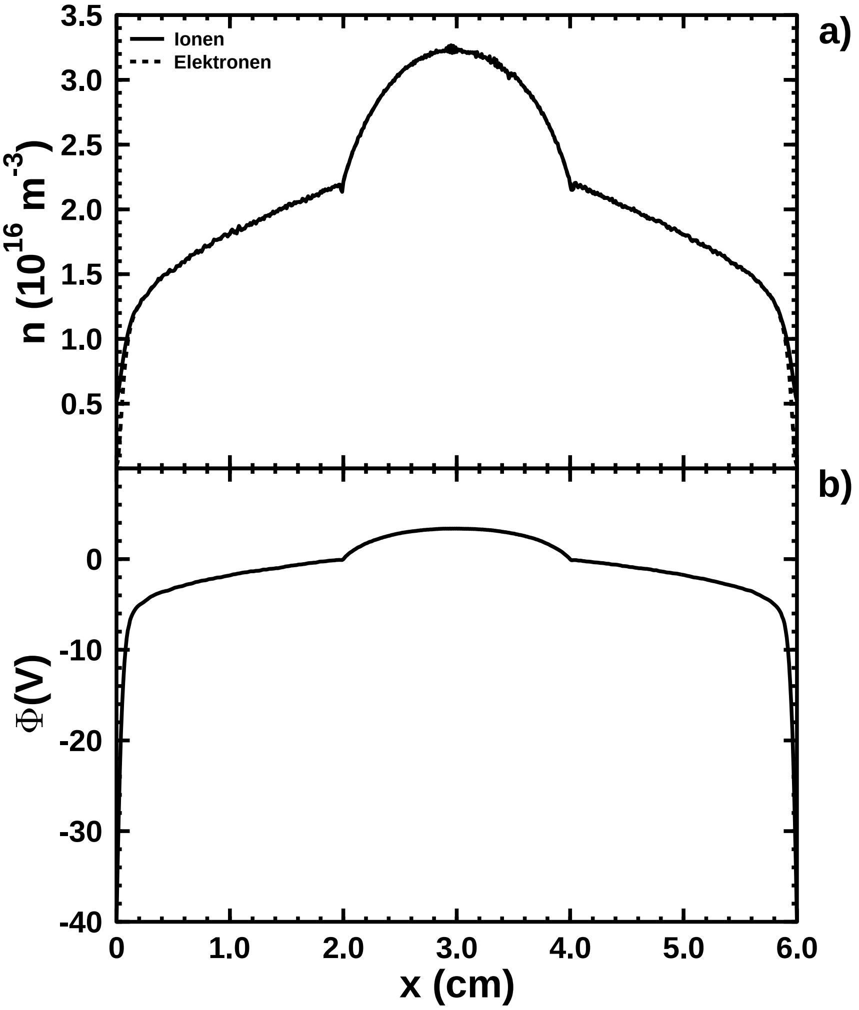

Abbildung 2.5: Stationäres Plasma zwischen zwei parallen Wänden, berechnet mit dem Verfahren der Gesamtplasmasimulation: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen, b) Potentialverteilung

benutzt, worin $D_\mathrm{a} > 0$ den ambipolaren Diffusionskoeffizienten darstellt. Einsetzen dieser Beziehung in Gleichung (2.2) und Integration längs x zwischen x_0 und x_1 liefert unter Ausnutzung der Symmetrie $n(x_0) = n(x_1)$ schließlich den Ausdruck

$$n(x) = n(x_0) + \frac{\zeta}{2D_\mathrm{a}} \cdot (x - x_0)(x_1 - x). \tag{2.4}$$

Das im Anschluß daran zu den Wänden hin abfallende Dichteprofil ist dagegen typisch für ein stoßbehaftetes Plasma. Würden sich die Ionen und Elektronen stoßfrei bewegen, wären die Teilchendichten außerhalb des Ionisationsgebietes bis zum Beginn der Randschicht nahe den Wänden überall konstant. Durch die stattfindenden Stöße kommt es jedoch zu dem abfallenden Dichteprofil. Das elektrische Potential nimmt, ausgehend von den

Wänden, innerhalb der Randschichten auf beiden Seiten stark zu, wächst dann weiterhin leicht an und nimmt anschließend im Ionisationsgebiet nochmals um etwa 3.4 V auf den Maximalwert 3.4 V zu. Der gesamte Potentialunterschied zwischen den Wänden und einer beliebigen Stelle im Ionisationsgebiet $x_0 \leq x \leq x_1$ liegt damit zwischen 40.3 V und 43.7 V.

Es stellt sich nun die Frage, warum es zu der starken Abnahme der Elektronentemperatur von anfänglich $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e,gen} = 50\,\mathrm{eV}$ auf den Wert $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} \approx 8\,\mathrm{eV}$ kommt. Dazu kann man sich überlegen, daß mit jedem Ion, das in dem Ionisationsgebiet erzeugt und – wegen der freien Weglänge von etwa 5 cm – nahezu stoßfrei im Potentialgefälle zu einer der beiden Wände beschleunigt wird, im Mittel eine Energie zwischen 40.3 eV und 43.7 eV abgeführt wird. Da die Ionen jedoch nur mit der vernachlässigbaren mittleren Energie von $\frac{3}{2}k_\mathrm{B}T_\mathrm{i} = 0.04\,\mathrm{eV}$ erzeugt werden, muß dieser Energiebetrag von den Elektronen stammen. Damit verleiben für die mittlere Elektronenenergie nur noch zwischen 6.3 und 9.7 eV, im Mittel also 8 eV. Ein großer Teil der Elektronenenergie wird also aufgrund der Tatsache, daß sich das Plasma in Kontakt mit einer Wand befindet, auf die Ionen übertragen, was zu einer starken Kühlung des Elektronengases führt [Stangeby, 1986].

2.3.2 Vergleich der Ergebnisse aus beiden Simulationen

In Abbildung 2.6 a) und 2.6 b) sind die zeitlich gemittelten Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen aus den beiden Simulationen in einem 2 cm umfassenden Bereich vor der linken Wand jeweils vergleichend dargestellt. Bis auf geringe Abweichungen zeigen die Kurven gute Übereinstimmungen. Beachtet man, daß die dargestellten Dichteprofile zeitlich gemittelte Kurven sind und daß die zugehörigen Standardabweichungen von den Mittelwerten in beiden Simulationen jeweils maximal 10% betragen, dann decken sich die Kurven sogar. Noch besser ist die Übereinstimmung in den gemittelten Potentialverteilungen, wie Abbildung 2.6 c) zeigt.

2.4 Zusammenfassung

Das Randschichtsimulationsverfahren ist in der Lage, die unmittelbare Umgebung eines Plasmas vor einer Wand zu simulieren, ohne den Plasmabulk berücksichtigen zu müssen. Im Vergleich zu einem Verfahren, mit dem das gesamte Plasma berechnet wird, liefert das Verfahren zur Simulation einer Plasmarandschicht die gleichen Ergebnisse bei einer deutlich kürzen Rechenzeit. Ein weiterer Vorteil des Randschichtsimulationsverfahren gegenüber dem Gesamtplasmaverfahren liegt in der einfacheren Möglichkeit, die Elektronentemperatur einstellen zu können. Im erstgenannten Verfahren werden die Elektronen mit einer vorgegeben Energieverteilung rechts in das Simulationsvolumen eingekoppelt. Durch Reflexion an der Potentialbarriere in der Plasmarandschicht laufen die meisten Elektronen von links wieder zurück und verlassen dann das Simulationsvolumen an der rechten Berandung mit der nahezu gleichen Energie, mit der sie eingekoppelt wurden. Dadurch ändert sich die Elektronentemperatur nicht. Im Gesamtplasmaverfahren nimmt dagegen die Temperatur der Elektronen ab, weil der größte Teil ihrer Energie als potentielle und kinetische Energie auf die Ionen übertragen wird.

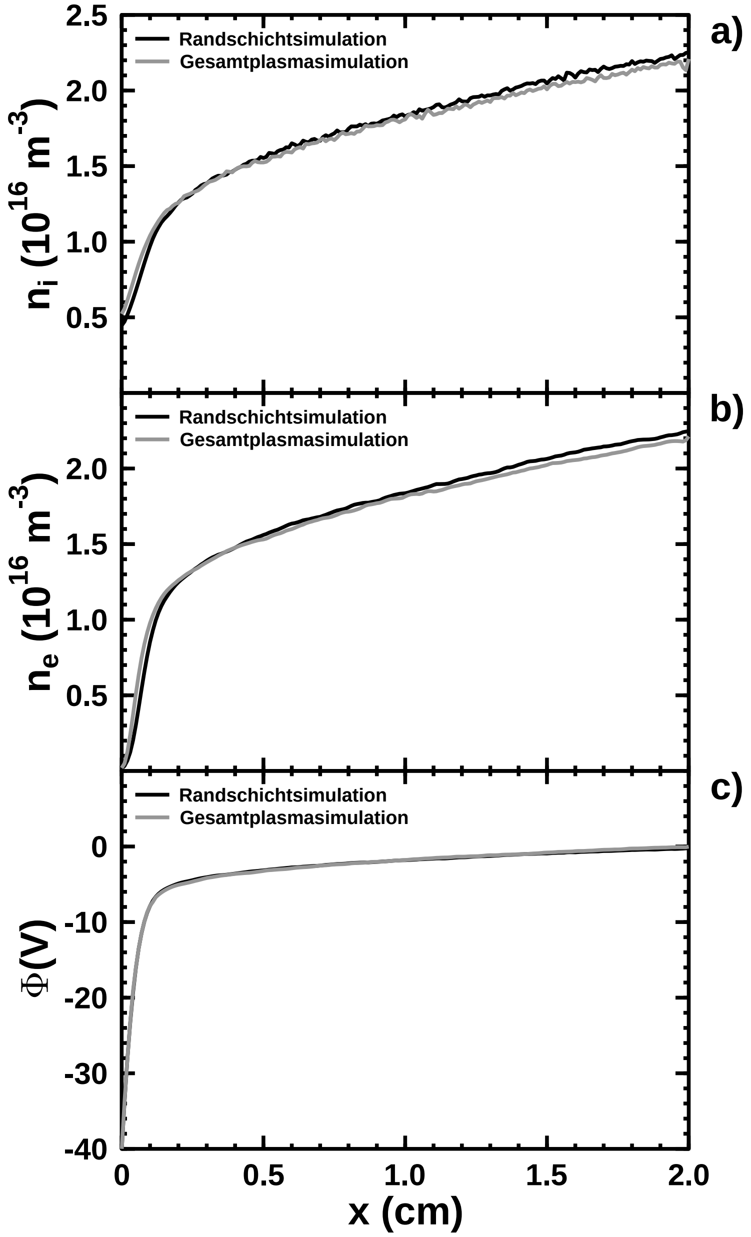

Abbildung 2.6: Vergleich der zeitlich gemittelten a) Ionendichte, b) Elektronendichte und c) des zeitlich gemittelten Potentials aus der Randschichtsimulation sowie aus der Gesamtplasmasimulation.

Kapitel 3

Potentialverteilungen in planaren statischen Plasmarandschichten

3.1 Einleitung

Die Potentialverteilungen in planaren statischen Plasmarandschichten stimmen in der Regel nur qualitativ mit den Vorhersagen des Child-Langmuir-Gesetzes [Child, 1911; Langmuir, 1913] überein, quantitativ dagegen zeigen sich oft beträchtlichen Abweichungen. Ein Grund dafür sind die in einem Plasma nicht erfüllten Randbedingungen, die zur Integration der Child-Langmuir-Gleichung benutzt werden: In einem Plasma werden die Ionen durch ein elektrisches Feld in der Vorschicht beschleunigt und erreichen beim Eintritt in die Plasmarandschicht an der Schichtkante nach dem Bohmkriterium mindestens die Geschwindigkeit $v_{\mathrm{B}} = \sqrt{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{i}}}$. Sowohl die Ionengeschwindigkeit v_0 an der Schichtkante als auch die elektrische Feldstärke E_0 an dieser Stelle sind daher in einem Plasma von Null verschieden, wohingegen bei der Ableitung des Child-Langmuir-Gesetzes davon ausgegangen wird, daß $v_0 = 0$ und $E_0 = 0$ gilt. Ein weiterer Grund für die Abweichungen liegt darin, daß bei der Child-Langmuir-Gleichung nur der Strom der Ionen durch die Randschicht betrachtet wird. In einer Plasmarandschicht dagegen existiert neben dem Ionenstrom noch der Elektronenanlaufstrom, der dafür sorgt, daß sich zusätzlich zu den Ionen auch noch Elektronen in der Randschicht befinden.

In diesem Kapitel wird nun ein Modell vorgestellt, das die einschränkenden Randbedingungen $v_0 = 0$ und $E_0 = 0$ aufhebt und daher eine Verallgemeinerung des Child-Langmuir-Gesetzes darstellt. Anschließend wird untersucht, ob und inwieweit dieses modifizierte Child-Langmuir-Gesetz die Potentialverteilung in Plasmarandschichten beschreiben kann. Dazu werden berechnete und simulierte Potentialverteilungen, die aus Computersimulationen an planaren Plasmarandschichten gewonnen wurden, miteinander verglichen.

3.2 Modellierung der Plasmarandschichten

Zur Untersuchung der Potentialverteilung in planaren statischen Plasmarandschichten wurden zwei PIC/MC-Simulationen nach der in Anhang B beschriebenen Methode durchgeführt. Das Trägergas war dabei stets Argon mit der Neutralgasdichte $n_0 = 2.57 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$ und der Temperatur $T_0 = 300\,\mathrm{K}$. Die Ar^+-Ionen hatten ebenfalls die Temperatur $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$. Als Elektronentemperatur wurde $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ gewählt, woraus sich eine Bohmgeschwindigkeit von $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ ergibt. Die Länge des Simulationsgebietes, das die Schicht sowie einen Teil der Vorschicht umfaßte, betrug $L = 2.5\,\mathrm{cm}$. Die Plasmadichte am rechten Rand dieses Gebietes (in der Vorschicht) wurde mit $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ vorgegeben. Die Ar^+-Ionen traten dort mit der Geschwindigkeit $0.7 \cdot v_\mathrm{B} = 3080\,\mathrm{m/s}$ ein, woraus sich eine Ionenstromdichte von $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m}^2$ ergab. Für die Elektronenstromdichte wurde der Wert $j_\mathrm{e} = 1516\,\mathrm{A/m}^2$ verwendet. Die Länge einer Ortsraumzelle betrug $\Delta x = 0.1\,\mathrm{mm}$, die Länge eines Zeitschritts $\Delta t = 2 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{s}$. Die Elektronen konnten elastische Stöße mit dem neutralen Ar-Hintergrundgas durchführen. Der Streuquerschnitt dafür beträgt bei der mittleren Elektronenenergie von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ etwa $12\,\mathrm{Å}^2$ [Dasgupta und Bhatia, 1985], entsprechende einer mittleren freien Weglänge von etwa 0.32 m. Für die Ar^+-Ionen wurden elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße mit den neutralen Ar-Atomen zugelassen. Die Querschnitte für diese Prozesse betragen bei der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ etwa $36\,\mathrm{Å}^2$ bzw. $40\,\mathrm{Å}^2$ [Cramer, 1959], die zugehörigen mittleren freien Weglängen entsprechend 0.11 m bzw. 0.10 m. Mit diesen Parametern wurden nun zwei Simulationen mit unterschiedlichen Potentialdifferenzen zwischen dem Bereich der Vorschicht rechts und der das Plasma berandenden Wand links durchgeführt.

3.3 Potentialverteilungen in den Randschichten

Die erste Simulation wurde für den Fall eines stationären Plasmas, das sich in Kontakt mit einer isolierten Wand befindet, gewählt. Die Potentialdifferenz entsprach dem Floating-Potential von 36 V zwischen der Schichtkante und der linken Wand plus dem Potentialabfall von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = 4\,\mathrm{V}$ in der Vorschicht. Somit betrug die gesamte Potentialdifferenz zwischen Plasmabulk und der linken Wand 40.285 V. Die Dichte- und Potentialverteilungen für diesen Fall sind in Abbildung 3.1 zu sehen. Abbildung 3.1 a) zeigt, daß die Teilchendichte vom Plasmabulk rechts zur Wand links monoton abfällt. Dieser Dichteverlauf stimmt qualitativ gut mit experimentell gemessenen Verläufen an isolierten Elektroden in Plasmen überein [Brutscher *et al.*, 1996]. Die Vorschicht, in der Elektronen und Ionen noch die gleiche Dichte haben, liegt rechts der Stelle $x \approx 0.3\,\mathrm{cm}$. In der Vorschicht werden die Ionen unter dem Einfluß eines elektrischen Feldes in der Größenordnung von einigen 100 V/m nach links beschleunigt und erreichen an der Schichtkante bei $x \approx 0.27\,\mathrm{cm}$ schließlich die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}}$. In der Schicht bei $x \leq 0.3\,\mathrm{cm}$ nimmt die Elektronendichte sehr schnell ab, wodurch das Potential infolge der positiven Raumladung der verbleibenden Ionen auf kurzer Distanz um 36 V auf $-40.285\,\mathrm{V}$

an den Wand links abfällt (Abbildung 3.1 b)). Bei der zweiten Simulation wurde die linke Wand auf ein Potential von $-1000\,\mathrm{V}$ bezogen auf den Plasmabulk gelegt. Die sich einstellenden Verteilung für Dichte und Potential sind in Abbildung 3.2 zu sehen. Die Lage der Schichtkante hat sich von $x \approx 0.27\,\mathrm{cm}$ bei der Simulation mit $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$ nach $x \approx 0.8\,\mathrm{cm}$ verschoben. Die Dichteverteilung zeigt eine gute Übereinstimmung mit experimentell gemessenen Verteilungen, wie sie sich bei Anlegen einer negativen Hochspannung an eine Elektrode im Plasma ergeben [Brutscher *et al.*, 1996]. Während die Elektronendichte aufgrund des sehr starken Gegenfeldes bereits bei $x = 0.5\,\mathrm{cm}$ auf Null abgesunken ist, ändert sich die Ionendichte im Bereich $0 \leq x \leq 0.5\,\mathrm{cm}$ nur sehr wenig und beträgt im Mittel etwa $2 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$. Nahezu der gesamte Potentialabfall von 1000 V zwischen Plasmabulk und der linken Wand erfolgt im Bereich $x \leq 0.6\,\mathrm{cm}$ (Abbildung 3.2 b)).

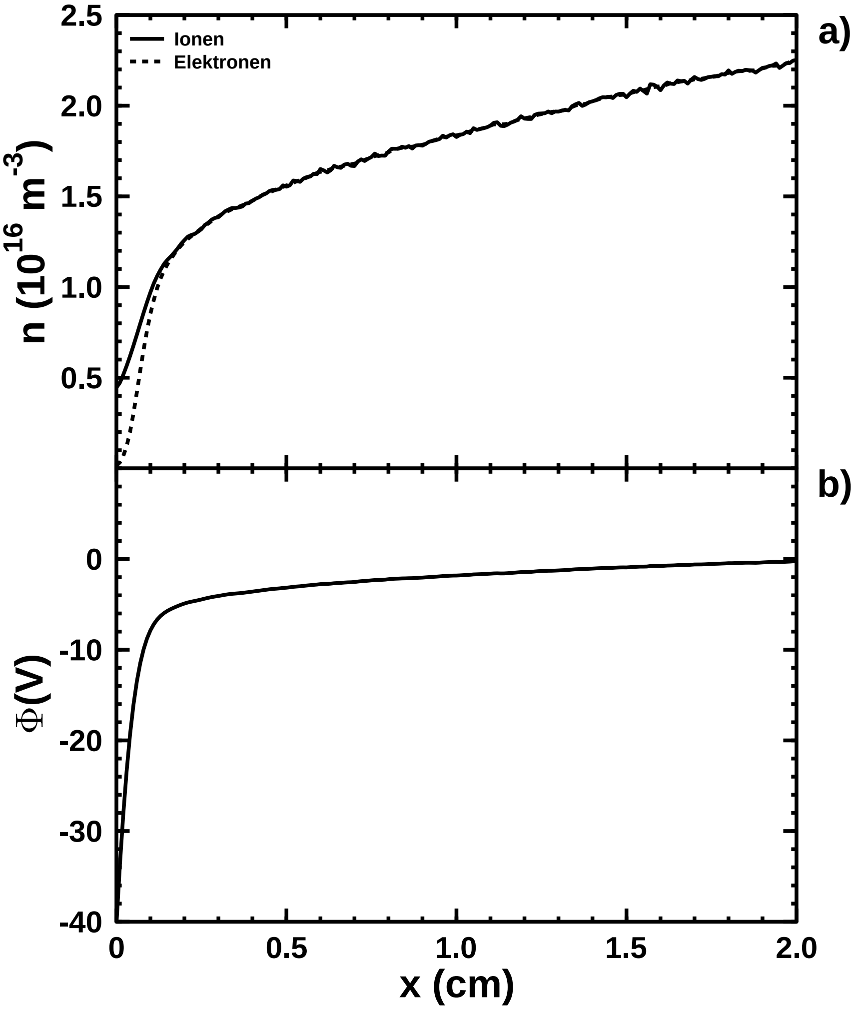

Abbildung 3.1: Stationäre Plasmarandschicht bei Anlegen des Floating-Potentials $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$ an die linke Wand: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen, b) Simulierte Potentialverteilung

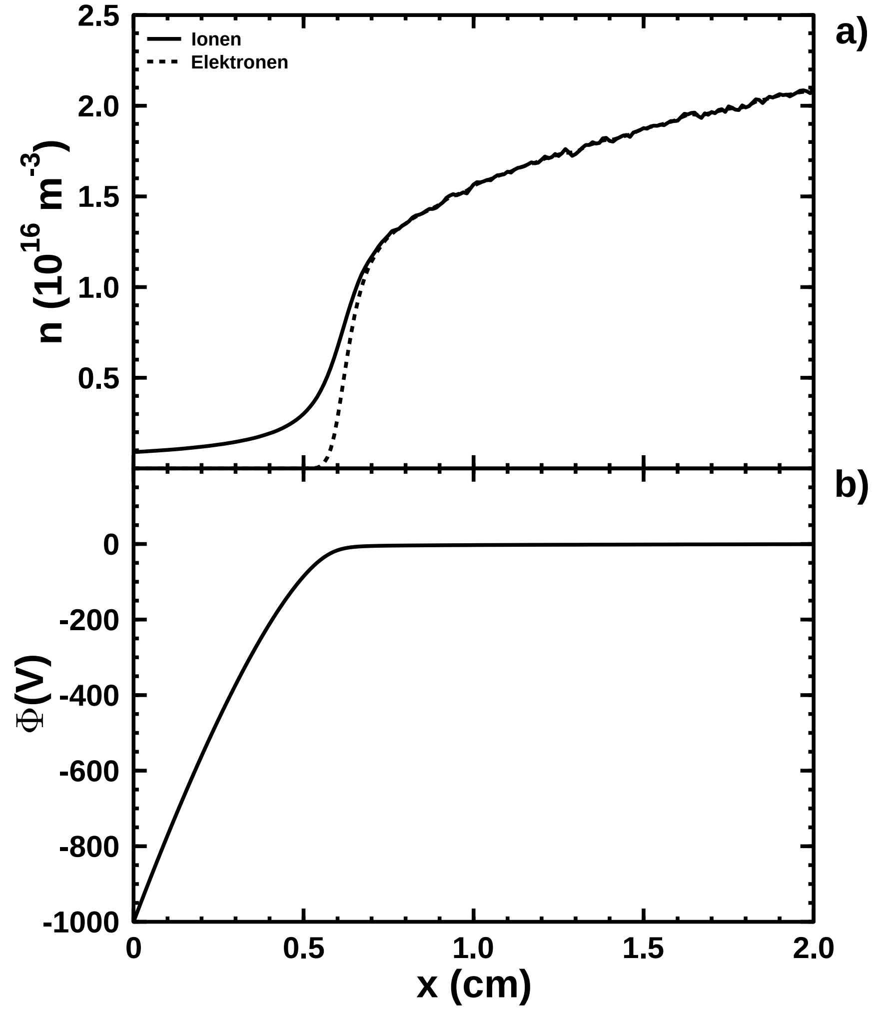

Abbildung 3.2: Stationäre Plasmarandschicht bei Anlegen der negativen Hochspannung $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -1000\,\mathrm{V}$ an die linke Wand: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen, b) Simulierte Potentialverteilung

3.4 Vergleich mit dem Child-Langmuir-Gesetz

In diesem Abschnitt wird nun untersucht, inwieweit die nach dem Child-Langmuir-Gesetz berechneten Potentialverteilungen mit den simulierten Verteilungen in der Plasmarandschicht übereinstimmen. Das Child-Langmuir-Gesetz [Child, 1911; Langmuir, 1913]

$$j_0 = \frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_{\mathrm{i}}}\right)^{1/2} \frac{[\Phi(d) - \Phi(x)]^{3/2}}{(d-x)^2} \tag{3.1}$$

beschreibt die Verteilung eines Potentials, das zu einem raumladungsbegrenzten Strom j_0 von Ionen der Masse m_{i} und der Ladung e gehört. Diese starten an der Stelle $x = d$, wo das elektrische Potential $\Phi(d)$ beträgt und das elektrisches Feld $E_0 = 0$ ist, mit der Geschwindigkeit $v_0 = 0$ und bewegen sich in einem monotonen Potentialgefälle in negative x-Richtung nach $x = 0$. Dort beträgt das elektrische Potential $\Phi(0) < \Phi(d)$. Aufgrund der Stromerhaltung, ändert sich das Potential gemäß $\Phi(d) - \Phi(x) \propto (d-x)^{4/3}$ (Gleichung (3.1)). Aus dem Potentialunterschied $\Delta\Phi = \Phi(d) - \Phi(0)$ läßt sich die Ausdehnung d des Bereiches, über den sich das Potentialgefälle erstreckt, berechnen:

$$d = \sqrt{\frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_\mathrm{i}}\right)^{1/2} \frac{(\Delta\Phi)^{3/2}}{j_0}}. \tag{3.2}$$

Das Child-Langmuir-Gesetz wird in der Plasmaphysik oft herangezogen, um die Ausdehnung der Plasmarandschicht zu berechnen und die Potentialverteilung in der Schicht zu beschreiben. Da die Elektronendichte in der Randschicht unter dem Einfluß des Plasma-Wand-Potentials sehr schnell abnimmt, wird immer davon ausgegangen, daß sich in der Randschicht fast ausschließlich Ionen befinden und damit das Child-Langmuir-Gesetz angewendet werden darf. Im folgenden werden nun für die beiden durchgeführten Simulationen die ermittelten Potentialverläufe in den Schichten mit den Berechnungen nach dem Child-Langmuir-Gesetz verglichen. Da die Ionen nach dem Bohmkriterium in der Vorschicht bereits ein beschleunigendes Potential von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = 4\,\mathrm{V}$ durchlaufen haben, beträgt das Potential an der Schichtkante $\Phi(d) = -4\,\mathrm{V}$, da das Potential im Inneren des Plasmas auf Null gesetzt wurde. Tabelle 3.1 zeigt nun zum Vergleich die aus den Simulationen gewonnenen Schichtdicken zusammen mit den nach der Child-Langmuir-Formel berechneten Dicken. Wie man der Tabelle entnehmen kann, zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen den berechneten Schichtdicken und den aus den Simulationen ermittelten Schichtausdehungen. Bei der Simulation mit dem Wandpotential $\Phi_\mathrm{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$ ist die berechnete Schichtdicke beinahe eine Größenordnung kleiner, bei der Simulation mit $\Phi_\mathrm{Wand} = -1000\,\mathrm{V}$ beträgt die berechnete Dicke nur 66% der beobachteten Schichtausdehnung. Einen Vergleich zwischen den simulierten und den berechneten Potentialverteilungen findet man in Abbildung 3.3. Dargestellt ist jeweils nahezu der gesamte Bereich der Schicht, wie sie sich aus den Simulationen ergibt. Es zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen den simulierten und den berechneten Potentialverteilungen, die im Fall der Floating-Potential-Simulation ($\Phi_\mathrm{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$) besonders stark ausgeprägt sind (Abbildung 3.3 a)). Das Child-Langmuir-Gesetz prognostiziert einen viel zu steilen Potentialabfall, der dafür sorgt, daß letztendlich auch die Schichtdicke viel zu klein ausfällt.

Tabelle 3.1: Vergleich zwischen berechneten (d_CL) und den aus den Simulationen ermittelten Schichtdicken (d_sim) für die beiden verschiedenen Wandpotentiale.

Φ_Wand	$\Delta\Phi$	d_CL	d_sim
$-40.285\,\mathrm{V}$	$36\,\mathrm{V}$	$0.44\,\mathrm{mm}$	$2.7\,\mathrm{mm}$
$-1000\,\mathrm{V}$	$996\,\mathrm{V}$	$5.28\,\mathrm{mm}$	$8.0\,\mathrm{mm}$

Im zweiten Fall (Abbildung 3.3 b)) beschreibt das Child-Langmuir-Gesetz den Potentialverlauf schon deutlich besser, das Potential fällt jedoch auch hier zu schnell ab, wodurch die Schichtdicke wieder zu klein wird. Der Grund dafür, daß das Child-Langmuir-Gesetz im Fall der großen Potentialdifferenz von 1000 V zwischen Plasmainneren und der Wand noch einigermaßen befriedigende Ergebnisse liefert, liegt darin, daß die anfänglichen Ungenauigkeiten in den Randbedingungen hier nicht so stark ins Gewicht fallen, wie im Fall

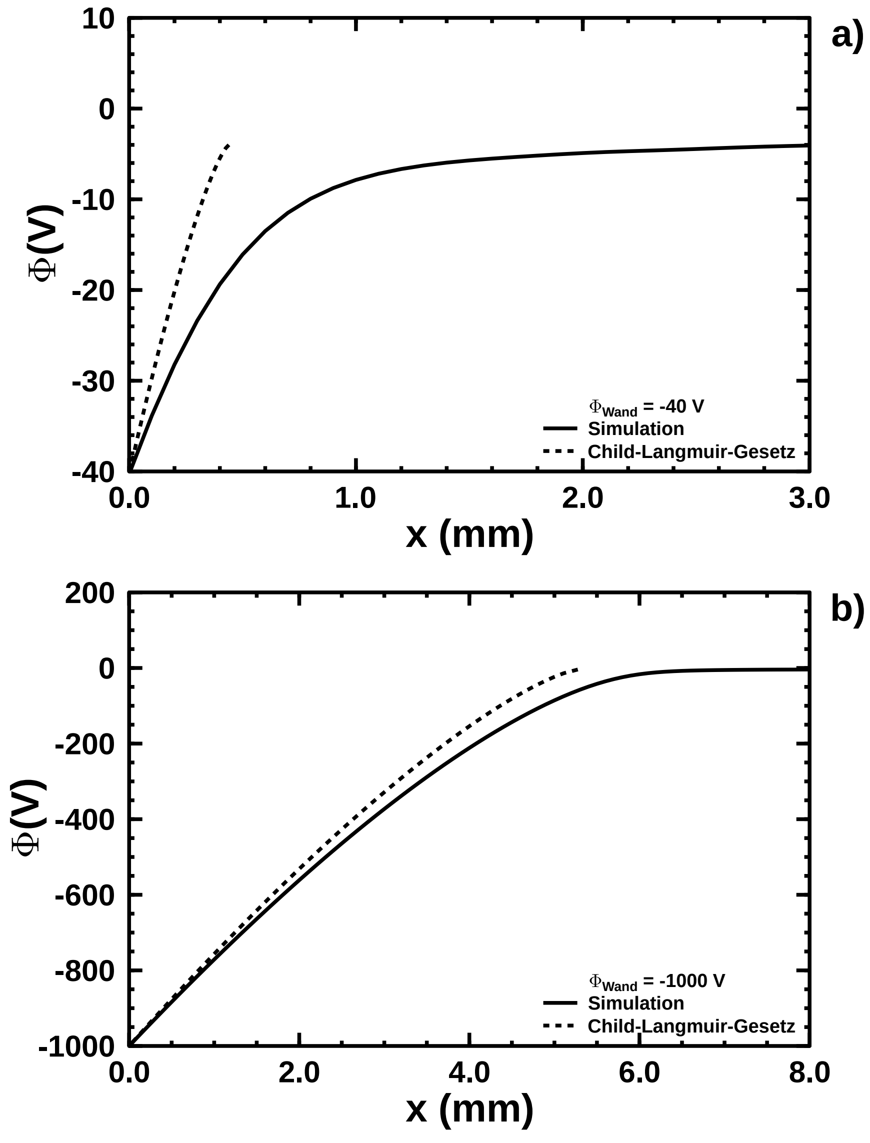

Abbildung 3.3: Vergleich zwischen simulierten und nach der Child-Langmuir-Formel berechneten Potentialverteilungen im Bereich der Plasmarandschicht für die beiden verschiedenen Simulationen: a) $\Phi_{\text{Wand}} = -40.285\,\text{V}$, b) $\Phi_{\text{Wand}} = -1000\,\text{V}$

der Simulation mit $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$. Die Ionen werden im elektrischen Feld der Randschicht so stark beschleunigt, daß die anfänglich bereits vorhandene Startgeschwindigkeit von $v_0 = v_{\mathrm{B}}$ oder das an der Schichtkante bereits herrschende elektrische Feld $E_0 \neq 0$ nur noch marginal von Bedeutung sind. Daher kann man erwarten, daß die Vorhersagen des Child-Langmuir-Gesetzes mit zunehmender Potentialdifferenz $\Delta\Phi$ immer besser werden.

3.5 Child-Langmuir-Gesetz mit modifizierten Randbedingungen

Das Child-Langmuir-Gesetz ist nicht in der Lage, den Potentialverlauf in der Randschicht eines Plasmas befriedigend zu beschreiben. Der Grund dafür liegt in den nicht zutreffenden Randbedingungen, die zur Integration der Child-Langmuir-Gleichung (3.1) benutzt werden. Im folgenden wird daher eine modifizierte Child-Langmuir-Formel für planare Schichten unter Verwendung modifizierter Randbedingungen hergeleitet [Farouki *et al.*, 1990].

Zwischen den Stellen $x = d > 0$ und $x = 0$ nehme das Potential streng monoton um $\Delta\Phi > 0$ von $\Phi(d)$ nach $\Phi(0) = \Phi(d) - \Delta\Phi$ ab. Wegen der Monotonie gilt für das elektrische Feld an der Stelle $x = d$: $E_0 = -\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_{x=d} < 0$. Bei $x = d$ treten nun einfach positiv geladene Ionen der Masse m_{i} mit der Geschwindigkeit $v_0 < 0$ in den Bereich des abfallenden Potentials ein. Die Dichte der Ionen am Eintrittsort sei n_0. Die Ionen durchlaufen das Potentialgefälle stoßfrei unter Zuwachs der kinetischen Energie

$$\frac{1}{2} m_{\mathrm{i}} {v_{\mathrm{i}}}^2(x) = \frac{1}{2} m_{\mathrm{i}} {v_0}^2 + e[\Phi(d) - \Phi(x)], \tag{3.3}$$

sodaß ihre Geschwindigkeit an der Stelle x

$$v_{\mathrm{i}}(x) = v_0 \cdot \left\{ 1 + \frac{2e}{m_{\mathrm{i}} {v_0}^2} [\Phi(d) - \Phi(x)] \right\}^{1/2} \tag{3.4}$$

beträgt. Da die Ionenstromdichte $j_0 = n_0 v_0$ aufgrund der planaren Geometrie innerhalb des gesamten Bereiches $0 \leq x \leq d$ konstant ist, folgt für die Ionendichte am Ort x:

$$\begin{aligned} n_{\mathrm{i}}(x) &= n_0 \cdot \frac{v_0}{v_{\mathrm{i}}(x)} && (3.5) \\ &= n_0 \cdot \left\{ 1 + \frac{2e}{m_{\mathrm{i}} {v_0}^2} [\Phi(d) - \Phi(x)] \right\}^{-1/2}. && (3.6) \end{aligned}$$

Damit kennt man an jeder Stelle x die Raumladungsdichte $e n_{\mathrm{i}}(x)$ und kann daher für die Poisson-Gleichung schreiben:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{dx^2} &= -\frac{e n_{\mathrm{i}}(x)}{\epsilon_0} && (3.7) \\ &= -\frac{e n_0}{\epsilon_0} \cdot \left\{ 1 + \frac{2e}{m_{\mathrm{i}} {v_0}^2} [\Phi(d) - \Phi(x)] \right\}^{-1/2}. && (3.8) \end{aligned}$$

Multipliziert man beide Seiten von Gleichung (3.8) mit $\frac{d\Phi}{dx}$ und benutzt die Beziehung $\frac{d\Phi}{dx}\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{1}{2}\frac{d}{dx}\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2$, so ergibt sich nach Integration über x in den Grenzen von x bis d:

$$\left.\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2\right|_d - \left.\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2\right|_x = -\frac{2en_0}{\epsilon_0}\cdot\int_x^d \left\{1+\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d)-\Phi(\tilde{x})]\right\}^{-1/2}\frac{d\Phi}{d\tilde{x}}\,d\tilde{x} \tag{3.9}$$

$$= -\frac{2en_0}{\epsilon_0}\cdot\int_{\Phi(x)}^{\Phi(d)} \left\{1+\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d)-\tilde{\Phi}]\right\}^{-1/2} d\tilde{\Phi}. \tag{3.10}$$

Nach Ausführung der Integration erhält man unter Berücksichtigung von $\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_d = -E_0$ die Gleichung

$$\left.\left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2\right|_x = \alpha\cdot\left(\left\{1+\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d)-\Phi(x)]\right\}^{1/2} - 1 + \frac{{E_0}^2}{\alpha}\right), \tag{3.11}$$

$$\text{mit}\ \ \alpha \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2n_0 m_\mathrm{i}{v_0}^2}{\epsilon_0} > 0. \tag{3.12}$$

Da für das Potential $\frac{d\Phi}{dx} > 0$ gelten soll, betrachtet man nur die positive Wurzel aus Gleichung (3.11):

$$\frac{d\Phi}{dx} = \alpha^{1/2}\cdot\left(\left\{1+\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d)-\Phi(x)]\right\}^{1/2} - 1 + \frac{{E_0}^2}{\alpha}\right)^{1/2} \tag{3.13}$$

Diese Differentialgleichung läßt sich durch Trennung der Variablen und mit der Substitution

$$\eta(\Phi) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{1+\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d)-\Phi(x)]\right\}^{1/2} \tag{3.14}$$

in die Form

$$-\frac{m_\mathrm{i}{v_0}^2}{e\alpha^{1/2}}\cdot\frac{\eta\,d\eta}{(\eta+\beta)^{1/2}} = dx \tag{3.15}$$

bringen, worin β wie folgt definiert ist:

$$\beta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{{E_0}^2}{\alpha} - 1 > -1. \tag{3.16}$$

Durch Integration von Gleichung (3.15) längs x in den Grenzen von x bis d bzw. über η in den dazugehörigen Grenzen von $\eta(\Phi)|_{\Phi(x)}$ bis $\eta(\Phi)|_{\Phi(d)} = 1$ findet man schließlich die Beziehung

$$\frac{2}{3}\frac{m_\mathrm{i}{v_0}^2}{e\alpha^{1/2}}\cdot\left[(\eta(\Phi)-2\beta)\,(\eta(\Phi)+\beta)^{1/2} - (1-2\beta)\,(1+\beta)^{1/2}\right] = d - x \tag{3.17}$$

oder nach einiger Umformung und Rücksubstitution von α nach Definition (3.12)

$$j_0 = \frac{4}{9}\epsilon_0 \frac{m_\mathrm{i}}{2e} \frac{{v_0}^3}{(d-x)^2} \cdot \left[(\eta(\Phi) - 2\beta)\,(\eta(\Phi) + \beta)^{1/2} - (1-2\beta)\,(1+\beta)^{1/2}\right]^2 . \tag{3.18}$$

Gleichung (3.17) stellt implizit die Abhängigkeit des Potentials $\Phi(x)$ vom Ort x dar und wurde bereits in ähnlicher Form in der Literatur angegeben [FAROUKI *et al.*, 1990]. Die Bedingungen für eine explizite Lösung dieser Gleichung nach $\Phi(x)$ wurden durch Farouki *et al.* ausführlich diskutiert. Dabei hat sich gezeigt, daß für $v_0 < 0$ und $E_0 < 0$ stets eine physikalisch sinnvolle Lösung $\Phi(x)$ existiert, die die angegebenen Randbedingungen erfüllt und über den gesamten Bereich $0 \leq x \leq d$ monoton wachsend ist. Für die folgenden Betrachtungen genügt jedoch auch die implizite Darstellung nach Gleichung (3.17). Da mit zunehmendem $\Phi(d) - \Phi(x) > 0$ nach Definition (3.14) $\eta(\Phi)$ monoton wächst, nimmt nach Gleichung (3.17) der Wert der Different $d-x$, bei dem die Potentialdifferenz den Wert $\Phi(d) - \Phi(x) > 0$ erreicht, zu. Daher beschreibt diese Beziehung immer die physikalisch sinnvolle Lösung des monotonen Potentialgefälles zwischen $x = d$ und $x = 0$ in einer Schicht. Sie kann damit dazu verwendet werden, bei vorgegebenen Randwerten v_0 und E_0 sowie gegebenem Potentialunterschied $\Delta\Phi = \Phi(d) - \Phi(0) > 0$ sowohl die Schichtdicke d als auch den Potentialverlauf in der Form $x(\Phi)$ zu berechnen.

Es soll noch gezeigt werden, daß Gleichung (3.18) unter den Voraussetzungen $v_0 \longrightarrow 0$, $E_0 \longrightarrow 0$ und $E_0/v_0 \longrightarrow 0$ tatsächlich in die Child-Langmuir-Formel (3.1) übergeht. Unter diesen Voraussetzungen folgt zunächst nach Definition (3.12) $\alpha \longrightarrow 0$, nach (3.16) $\beta \longrightarrow -1$ und daher nach Gleichung (3.18) die Beziehung

$$j_0 = \frac{4}{9}\epsilon_0 \frac{m_\mathrm{i}}{2e} \frac{{v_0}^3}{(d-x)^2} \cdot (\eta(\Phi) + 2)^2\,(\eta(\Phi) - 1)\,. \tag{3.19}$$

Außerdem gilt $\eta(\Phi) \approx \left\{\frac{2e}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}[\Phi(d) - \Phi(x)]\right\}^{1/2} \gg 1$ solange $\Phi(d) - \Phi(x) > 0$ ist und damit $(\eta(\Phi) + 2)^2\,(\eta(\Phi) - 1) \approx \eta^3(\Phi)$. Einsetzen in Gleichung (3.19) liefert dann schließlich die bereits aus Gleichung (3.1) bekannte Child-Langmuir-Formel:

$$j_0 = \frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_\mathrm{i}}\right)^{1/2} \frac{[\Phi(d) - \Phi(x)]^{3/2}}{(d-x)^2} \tag{3.20}$$

Wegen dieser Eigenschaft werden die Gleichungen (3.17) und (3.18) im folgenden als modifizierte Child-Langmuir-Gleichungen bezeichnet.

3.6 Potentialverlauf nach der modifizierten Child-Langmuir-Gleichung

In diesem Abschnitt wird gezeigt, wie der Potentialverlauf, der durch die modifizierte Child-Langmuir-Gleichung beschrieben wird, von den Randbedingungen v_0 und E_0

abhängt. In Abbildung 3.4 sind Potentialverläufe mit einem Potentialunterschied von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ für einen Strom aus Argon-Ionen der Dichte $j_0 = 10\,\mathrm{A/m^2}$ und verschiedene Randwerte dargestellt. Das Potential am Startpunkt $x = d$ wurde dabei auf $\Phi(d) = 0$ gesetzt, entsprechend betrug $\Phi(0) = -\Delta\Phi$. Abbildung 3.4 a) zeigt den Verlauf für den Fall eines elektrischen Feldes $E_0 = 0$ und verschiedene Startgeschwindigkeiten v_0 der Ionen an der Stelle $x = d$. Mit zunehmendem Betrag der Geschwindigkeit v_0 verschiebt sich die Stelle d, an der das Potential den Wert $\Phi(d) = 0$ annimmt, immer weiter nach rechts. Dabei beträgt die Zunahme der Schichtdicke für den Fall $v_0 = -5000\,\mathrm{m/s}$ gegenüber dem Fall der klassischen Randbedingung $v_0 = 0\,\mathrm{m/s}$ bereits 0.23 mm oder et-

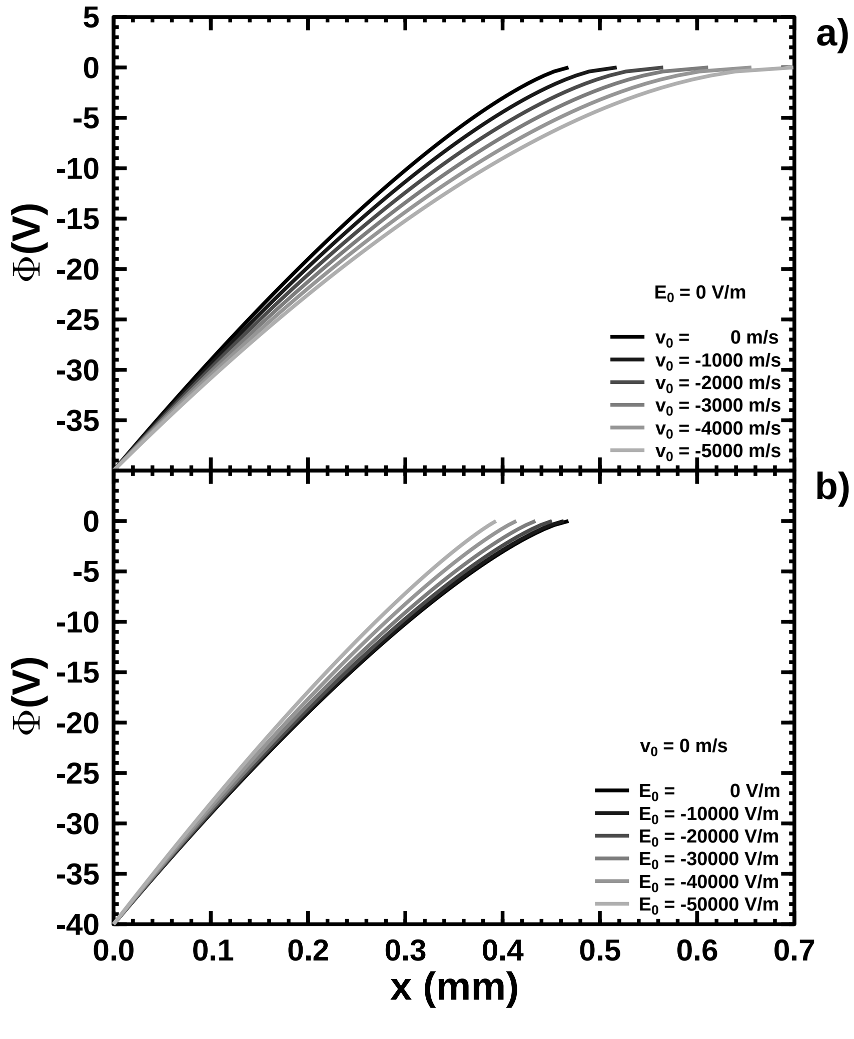

Abbildung 3.4: Abhängigkeit des durch die modifizierte Child-Langmuir-Formel beschriebenen Potentialverlaufs von den Randbedingungen v_0 und E_0: a) Abhängigkeit von der Geschwindigkeit v_0 bei $E_0 = 0\,\mathrm{V/m}$, b) Abhängigkeit vom elektrischen Feld E_0 bei $v_0 = 0\,\mathrm{m/s}$.

wa 50%. Wird dagegen bei konstanter Geschwindigkeit $v_0 = 0$ das elektrische Feld E_0 ausgehend von 0 V/m bis −50000 V/m betragsmäßig erhöht, so zeigt sich eine Abnahme der Dicke der Schicht, innerhalb der das Potential den vorgegebenen Wert von 40.285 V überbrückt (Abbildung 3.4 b)). Die Abnahme der Schichtdicke beträgt dabei jedoch für das Feld $E_0 = -50000\,\mathrm{V/m}$, bei dem es sich um ein typisches Feld in der simulierten Randschicht zu $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$ handelt, maximal 0.07 mm oder etwa 16%.

Der Grund dafür, daß die Dicke der Schicht mit zunehmendem Betrag der Startgeschwindigkeit v_0 wächst, liegt darin, daß die Ionendichte mit zunehmender Geschwindigkeit innerhalb der Schicht immer kleiner wird, da die Stromdichte konstant bleibt. Eine geringere Ionen- oder Raumladungsdichte bedeutet jedoch nach dem Poisson-Gesetz eine geringere Krümmung des Potentials und damit eine größere Ausdehnung der Schicht, in der das Potential um den gegebenen Wert von 40.285 V abfällt. Auf der anderen Seite muß mit zunehmendem Betrag des elektrischen Feldes E_0 die Schichtdicke abnehmen, da das elektrische Feld E_0 wegen des Zusammenhangs $E_0 = -\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_d$ ja nichts anderes bedeutet, als das anfängliche Gefälle der Potentialkurve. Nimmt das Gefälle zu, so verläuft die Potentialkurve schon von Anfang an viel steiler und erreicht daher schneller ihren Minimalwert. Dem elektrischen Feld E_0 kommt daher auch die Bedeutung einer Anschlußbedingung zu, die den Potentialverlauf in der Schicht stetig und glatt an den Potentialverlauf in der Vorschicht anschließt, wohingegen die Geschwindigkeit v_0 eher bestimmend ist für die Ausdehnung der Schicht.

3.7 Vergleich der simulierten Randschichten mit dem modifizierten Child-Langmuir-Gesetz

Es wird nun untersucht, inwieweit das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz nach Gleichung (3.17) die aus den Simulationen ermittelten Potentialverteilungen, wie sie in Abschnitt 3.3 vorgestellt wurden, beschreiben kann. Diese Untersuchung stellt eine Erweiterung der Studien von Farouki *et al.* [Farouki *et al.*, 1990] auf Randschichten dar, in denen neben Ionen auch noch Elektronen vorhanden sind. Bei der Herleitung der modifizierten Child-Langmuir-Gleichung wurde davon ausgegangen, daß sich innerhalb der Schicht nur Ionen befinden. Tatsächlich sind an einem Ort, an dem das Potential den Wert Φ annimmt, jedoch auch Elektronen mit der Dichte $n_{\mathrm{e}}(\Phi) = {n_{\mathrm{e}}}^0 \cdot \exp(e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}})$ vorhanden. Dabei bedeutet ${n_{\mathrm{e}}}^0$ die Dichte an einem Ort innerhalb der Vorschicht, an dem das Potential $\Phi = 0$ ist. Die Voraussetzung, daß in der Schicht keine Elektronen vorhanden sind, ist nach dieser Beziehung nirgends erfüllt. Je tiefer man nun aber in die eigentliche Schicht hineingeht, umso stärker negativ wird das beobachtete Potential Φ sein, und die Elektronendichte wird abhängig vom Verhältnis $e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}$ exponentiell immer mehr abnehmen. Dadurch wird die Annahme der Existenz einer einzigen Sorte Ladungsträger immer besser angenähert und die modifizierte Child-Langmuir-Formel sollte schließlich die beobachteten Potentialverteilungen reproduzieren können.

Aus diesem Grund wurde für verschiedene Werte von $e\Phi/k_B T_e$ in den simulierten Randschichten jeweils die zugehörige Stelle x^* gesucht, an der dieses Potentialverhältnis erreicht wird und dann an dieser Stelle jeweils die mittlere Ionengeschwindigkeit $v(x^*)$ sowie das elektrische Feld $E(x^*)$ gemessen. Diese Werte wurden dann als Randwerte zur Berechnung der Potentialverläufe mittels der modifizierte Child-Langmuir-Formel verwendet und mit den simulierten Kurven verglichen. Dabei wurde insbesondere untersucht, ab welchem Wert von $e\Phi/k_B T_e$ die berechnete Position x_{CL}, an der das Potential den vorgegebenen Wert $e\Phi/k_B T_e$ annimmt, mit der Position des Meßortes x^* übereinstimmt. Tabelle 3.2 zeigt die Ergebnisse dieser Untersuchungen für den Fall der Simulation mit dem Wand-Potential $\Phi_{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$. Angegeben sind zu verschiedenen Werten $e\Phi/k_B T_e$ jeweils der Ort x^* und die an diesem ermittelten Randwerte $E(x^*) = E_0$ und $v(x^*) = v_0$. Weiterhin ist die berechnete Position x_{CL} angegeben, an der das Potential nach der modifizierten Child-Langmuir-Gleichung den vorgegebenen Wert $e\Phi/k_B T_e$ annehmen sollte. Schließlich ist noch der maximale relative Fehler aufgeführt, der bei der jeweils berechneten Potentialverteilung gegenüber dem simulierten Potentialverlauf beobachtet wurde. Die berechneten Potentialkurven sind in Abbildung 3.5 zusammen mit der simulierten Potentialverteilung zu sehen. Wie man der Tabelle entnimmt, stimmt die berechnete Position x_{CL} mit der Stelle x^* erst bei $e\Phi/k_B T_e = -2.0$ überein. Für $e\Phi/k_B T_e > -2.0$ zeigen sich dagegen deutliche Abweichungen. Dementsprechend ist auch der maximale relative Fehler zwischen berechneter und simulierter Potentialverteilung in diesen Fällen sehr hoch. Für $e\Phi/k_B T_e = -2.0$ dagegen stimmt die berechnete Verteilung mit der simulierten bis auf eine relative Abweichung von $2.0 \cdot 10^{-4}$ überein. Abbildung 3.5 zeigt, wie sich mit abnehmendem Verhältnis $e\Phi/k_B T_e$ die berechnete Potentialkurve an die gemessene Kurve immer besser anschmiegt und schließlich bei $e\Phi/k_B T_e = -2.0$ keine Abweichungen mehr zu sehen sind.

Tabelle 3.2: Verschiedene Werte $e\Phi/k_B T_e$ und die zugehörigen Stellen x^* für die Simulation mit $\Phi_{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$. Die bei x^* jeweils beobachtete mittlere Ionengeschwindigkeit $v(x^*)$ und das elektrische Feld $E(x^*)$ wurden als Randwerte für die Berechnung des Potentialverlaufes mittels der modifizierten Child-Langmuir-Formel verwendet. Angegeben sind weiterhin die berechnete Position x_{CL}, wo das Potential den vorgegebenen Randwert annimmt sowie der maximale relative Fehler zwischen berechneter und simulierter Potentialverteilung $\max(\Delta\Phi/\Phi_{sim})$.

$e\Phi/k_B T_e$	x^*	$v(x^*)$	$E(x^*)$	x_{CL}	$\max(\Delta\Phi/\Phi_{sim})$
-0.5	3.08 mm	-4295 m/s	-727 V/m	0.63 mm	0.60
-1.0	0.98 mm	-6342 m/s	-8175 V/m	0.63 mm	0.35
-1.5	0.67 mm	-7781 m/s	-19154 V/m	0.55 mm	0.19
-2.0	0.50 mm	-8935 m/s	-29145 V/m	0.50 mm	$2.0 \cdot 10^{-4}$

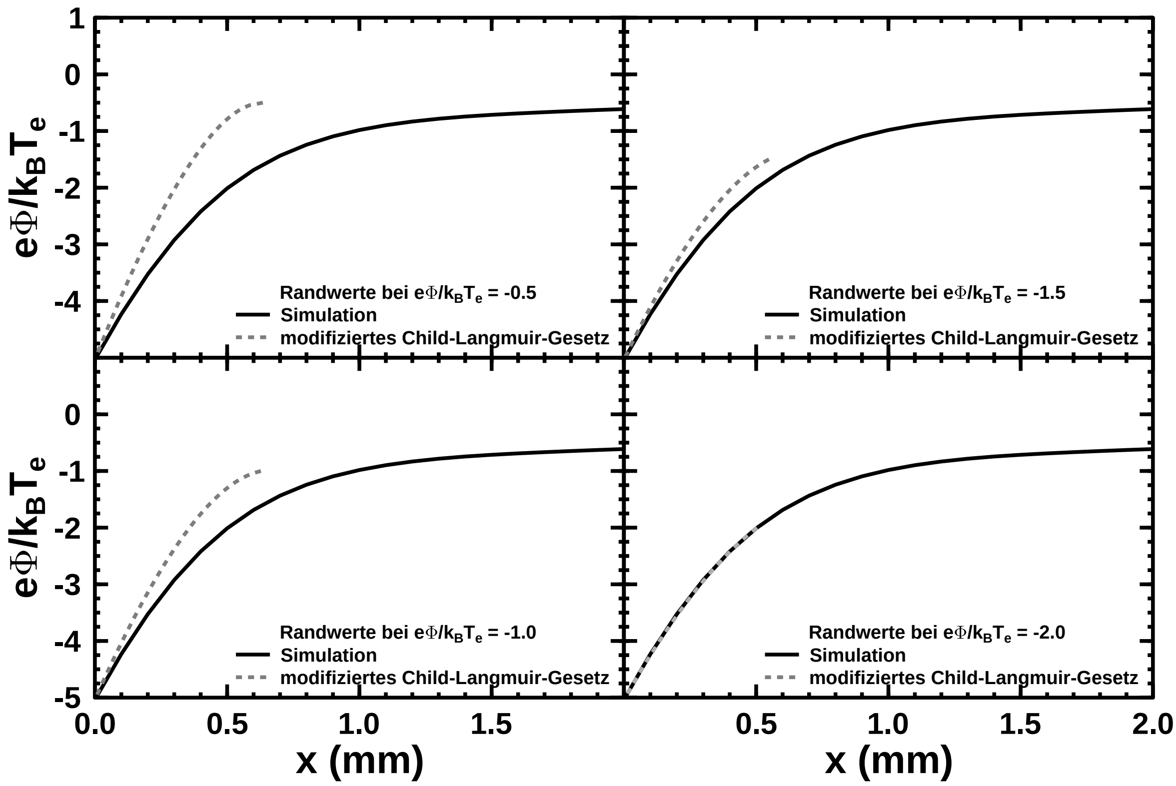

Abbildung 3.5: Vergleich zwischen simulierter Potentialverteilung und mittels der modifizierten Child-Langmuir-Formel berechneten Potentialkurven im Fall der Simulation mit $\Phi_{\rm Wand} = -40.285\,$V für verschiedene Werte $e\Phi/k_{\rm B}T_{\rm e}$ an dem Ort, an dem die Randwerte bestimmt wurden.

Es sei noch hervorgehoben, daß die mittlere Driftgeschwindigkeit der Ionen an der Stelle, wo das Potential $e\Phi$ den Wert $-2k_{\rm B}T_{\rm e}$ (bezogen auf das Potential im Plasmainneren) besitzt, den Betrag der doppelten Bohmgeschwindigkeit $2v_{\rm B}$ annimmt. Das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz stimmt unter Verwendung der Randwerte $e\Phi = -2k_{\rm B}T_{\rm e}$, $v_0 = -2v_{\rm B}$ sowie $E_0 = 0$ mit dem exponentiell-genauen Modell (exponential-accuracy model) von Benilov überein, das den ionendominierten Bereich der Schicht beschreibt, in dem die Elektronendichte exponentiell bereits stark abgeklungen ist [Benilov, 2000]. Die Möglichkeit, das elektrische Feld E_0 mittels simulierten Werten ebenfalls vorgeben zu können, stellt jedoch gegenüber dem Modell von Benilov ein weitere Verbesserung dar.

Im Fall der Simulation mit dem Wandpotential $\Phi_{\rm Wand} = -1000\,$V wurden analoge Untersuchungen und Berechnungen durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 3.3 und Abbildung 3.6 zu sehen. Für $e\Phi/k_{\rm B}T_{\rm e} > -2.0$ zeigen sich wieder deutliche Unterschiede zwischen der Stelle x^*, an der in der Simulation der jeweilige Wert $e\Phi/k_{\rm B}T_{\rm e}$ gemessen wurde und der berechneten Position $x_{\rm CL}$. Aus diesem Grund weichen die berechneten Potentialkurven für diese Fälle noch deutlich von der simulierten Kurve ab (Abbildung

Tabelle 3.3: Verschiedene Werte $e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ und die zugehörigen Stellen x^* für die Simulation mit $\Phi_\mathrm{Wand} = -1000\,\mathrm{V}$. Die bei x^* jeweils beobachtete mittlere Ionengeschwindigkeit $v(x^*)$ und das elektrische Feld $E(x^*)$ wurden als Randwerte für die Berechnung des Potentialverlaufes mittels der modifizierten Child-Langmuir-Formel verwendet. Angegeben sind weiterhin die berechnete Position x_CL, wo das Potential den vorgegebenen Randwert annimmt sowie der maximale relative Fehler zwischen berechneter und simulierter Potentialverteilung $\max(\Delta\Phi/\Phi_\mathrm{sim})$.

$e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$	x^*	$v(x^*)$	$E(x^*)$	x_CL	$\max(\Delta\Phi/\Phi_\mathrm{sim})$
-0.5	7.98 mm	-4519 m/s	-786 V/m	5.78 mm	0.37
-1.0	6.46 mm	-6416 m/s	-9558 V/m	5.91 mm	0.21
-1.5	6.18 mm	-7783 m/s	-20433 V/m	5.92 mm	0.12
-2.0	6.02 mm	-8947 m/s	-30169 V/m	5.98 mm	$9.0 \cdot 10^{-3}$

3.6) und die relativen Fehler liegen im Bereich einiger 10% (Tabelle 3.3). Ähnlich wie zuvor bei $\Phi_\mathrm{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$ zeigt sich erst ab $e\Phi = -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$, wo die Ionen die doppelte Bohmgeschwindigkeit $2v_\mathrm{B}$ erreichen, eine befriedigend Übereinstimmung zwischen den simulierten und berechneten Daten. Der maximale relative Fehler zwischen den Potentialkurven beläuft sich auf nur noch etwa 1% und die Potentialkurven stimmen sehr gut überein.

3.8 Zusammenfassung

Der Vergleich zwischen Potentialverteilungen in planaren Plasmarandschichten, die mittels PIC/MC-Simulationen gewonnen wurden und berechneten Verteilungen nach Child-Langmuir zeigt deutliche Unterschiede. Diese rühren daher, daß bei der Ableitung des Child-Langmuir-Gesetzes Randwerte verwendet werden, die nicht auf eine Plasmarandschicht zutreffen. Dazu zählen die anfängliche Ionengeschwindigkeit $v_0 = 0$ und ein verschwindendes elektrisches Feld $E_0 = 0$, aber auch die Tatsache, daß die Elektronen vernachlässigt werden. Unter Verwendung verallgemeinerter Randwerte $v_0 < 0$ und $E_0 < 0$ wurde ein modifiziertes Child-Langmuir-Gesetz hergeleitet, das in der Lage ist, die Potentialverteilungen in planaren Plasmarandschichten zu beschreiben, sobald der Anteil der Elektronen in den Schichten vernachlässigbar gegenüber den Ionen wird. Es hat sich herausgestellt, daß dies hinreichend gut für Potentiale $e\Phi \leq -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ erfüllt ist, für die der Betrag der Ionengeschwindigkeiten mindestens $2v_\mathrm{B}$ beträgt. Die Dichte der Elektronen ist dann auf unter $\exp(-2.0) \approx 0.14$ der Dichte im Plasmainneren abgesunken und spielt keine wesentliche Rolle mehr.

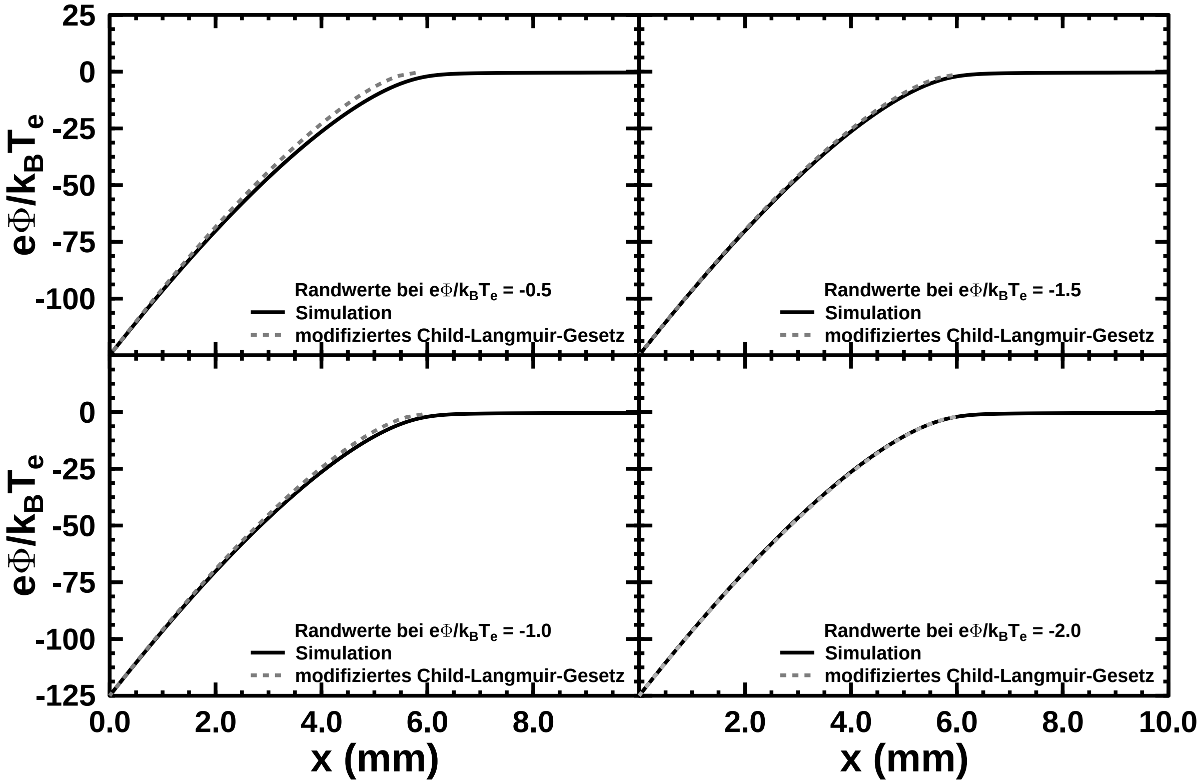

Abbildung 3.6: Vergleich zwischen simulierter Potentialverteilung und mittels der modifizierten Child-Langmuir-Formel berechneten Potentialkurven im Fall der Simulation mit $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -1000\,\mathrm{V}$ für verschiedene Werte $e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}$ an dem Ort, an dem die Randwerte bestimmt wurden.

Kapitel 4

PIII an einem planaren Target unter Verwendung eines Randschichtplasmas

4.1 Einleitung

Beinahe alle analytischen Untersuchungen [Andrews und Varey, 1971; Lieberman, 1989; Riemann und Daube, 1999] und Computersimulationen [Widner *et al.*, 1970; Vahedi *et al.*, 1991; Emmert und Henry, 1992; Hahn und Lee, 1992; Sheridan und Goeckner, 1995], die bisher zum Thema PIII an planaren Targets durchgeführt wurden, gehen von der Annahme aus, daß das Plasma, in das das Target eingetaucht wird, bis zur Targetoberfläche völlig homogen ist. Auf dieser Annahme beruhen auch alle Computersimulationen zur PIII, die bisher an zweidimensionalen Targets gemacht wurden [Sheridan und Alport, 1994; Sheridan, 1995; Sheridan, 1996; Hong und Emmert, 1994; Hong und Emmert, 1995]. In der Realität bildet sich jedoch in der unmittelbaren Umgebung des Targets eine Plasmarandschicht mit deutlichen Gradienten in den Dichte- und Potentialverteilungen aus, die bisher in dieser Form nicht berücksichtigt wurden. Nur die Simulation mehrerer aufeinanderfolgender Hochspannungspulse, wieder ausgehend von einem homogenen Plasma, deutete bereits darauf hin, daß die nach dem ersten Puls inhomogene Ionendichte einen deutlichen Einfluß auf die Ereignisse bei der PIII hat [Wood, 1993].

In diesem Kapitel wird nun gezeigt, wie sich die Existenz der Plasmarandschicht auf die Vorgänge bei der PIII auswirkt. Dazu wurden vergleichende PIC/MC-Computersimulationen an planaren Targets durchgeführt, die sich nur in den Anfangsbedingungen unterschieden haben. Zum einen wurden Rechnungen ausgehend von einem homogenen Plasma gemacht, auf der anderen Seite wurde aber auch eine Simulation durchgeführt, bei der eine voll ausgebildetet Plasmarandschicht die Startkonfiguration darstellte.

4.2 Parameter des verwendeten Plasmas und der Simulation

Bevor in den folgenden Abschnitten auf die eigentlichen Ergebnisse aus den Simulationen eingegangen wird, werden hier noch kurz die Parameter des simulierten Plasmas vorgestellt. In allen Rechnungen wurde ein Argon-Plasma mit einer Neutralgasdichte von $n_0 = 2.57 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$ und einer Temperatur von $T_0 = 300\,\mathrm{K}$, entsprechend einem Druck von $p_0 = 0.1\,\mathrm{Pa}$, verwendet. Die Plasmadichte lag in der Größenordnung von $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$. Die Temperatur der Ionen betrug $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$, die Elektronentemperatur war $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$, woraus sich eine Bohmgeschwindigkeit von $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ ergibt. Es wurde ein Ausschnitt des Plasmas der Länge $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ simuliert, der auf der linken Seite von dem planaren Target begrenzt war. Die rechte Seite des Simulationsgebietes lag dagegen im Inneren des Plasmas. Die Elektronen konnten elastische Stöße mit dem neutralen Ar-Hintergrundgas durchführen. Der Streuquerschnitt dafür beträgt bei der mittleren Elektronenenergie von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ etwa $12\,\mathrm{Å}^2$ [Dasgupta und Bhatia, 1985], entsprechend einer mittleren freien Weglänge von 0.32 m. Für die Ar^+-Ionen wurden elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße mit den neutralen Ar-Atomen zugelassen. Die Querschnitte für diese Prozesse betragen bei der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ etwa $36\,\mathrm{Å}^2$ bzw. $40\,\mathrm{Å}^2$ [Cramer, 1959], die zugehörigen mittleren freien Weglängen entsprechend 0.11 m bzw. 0.10 m. Die Zellenlänge betrug in allen Simulation $\Delta x = 0.1\,\mathrm{mm}$, die Länge eines Zeitschritts war stets $\Delta t = 2 \cdot 10^{-11}\,\mathrm{s}$. Ausgehend von der jeweils gewählten Startkonfiguration wurde zum Zeitpunkt $t = 0$ das Potential an der linken Wand schlagartig auf $-1000\,\mathrm{V}$ abgesenkt, während auf der rechten Seite (im Plasmainneren) das Potential immer auf 0 V fixiert war.

4.3 PIII in einem homogenen Plasma

Die Vorgänge bei der PIII in einem homogenen Plasma sind mittlerweile gut verstanden, da zu diesem System viele analytische Untersuchungen als auch Computersimulationen durchgeführt wurden. Daher sollen in diesem Abschnitt die wesentlichen Eigenschaften nur noch einmal kurz aufgezeigt werden. Dazu wurde eine PIC/MC-Computersimulation mit den in Abschnitt 4.2 vorgestellten Parametern durchgeführt, bei der das Plasma anfänglich überall die Dichte $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ hatte. Die Ionen und Elektronen waren im Mittel stationär und führten lediglich thermische Bewegungen um ihren Schwerpunkt, entsprechend ihrer Temperatur von $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$ bzw. $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$, aus. Das Wandpotential links wurde nun mit Beginn der Simulation zum Zeitpunkt $t = 0$ von 0 V auf $-1000\,\mathrm{V}$ gelegt und die zeitliche Entwicklung verschiedener physikalischer Größen wie Teilchendichten, Implantationsstrom, Energie- und Winkelverteilungen aufgezeichnet.

Abbildung 4.1 zeigt zunächst die Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen in Abständen von anfangs 0.05 μs und später 0.2 μs für die Dauer von insgesamt 1 μs. Die Beobachtungen decken sich dabei mit den gängigen Vorstellungen [LIEBERMAN, 1989; LIEBERMAN und LICHTENBERG, 1994B]: Durch das Anlegen der negativen Hochspannung an die linke Wand reagieren zunächst die Elektronen auf der Zeitskala der inversen Elektronenplasmafrequenz von ${\omega_{\mathrm{p,e}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{e}/n_\mathrm{p}e^2)^{1/2} = 0.13\,\mathrm{ns}$ mit einem plötzlichen Zurückweichen von der Wand. Dabei bleibt unmittelbar an der Wand ein Bereich zurück, der ausschließlich von Ionen mit deren Anfangsdichte von $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ bevölkert ist. Diesen Bereich bezeichnet man auch als Matrixschicht.

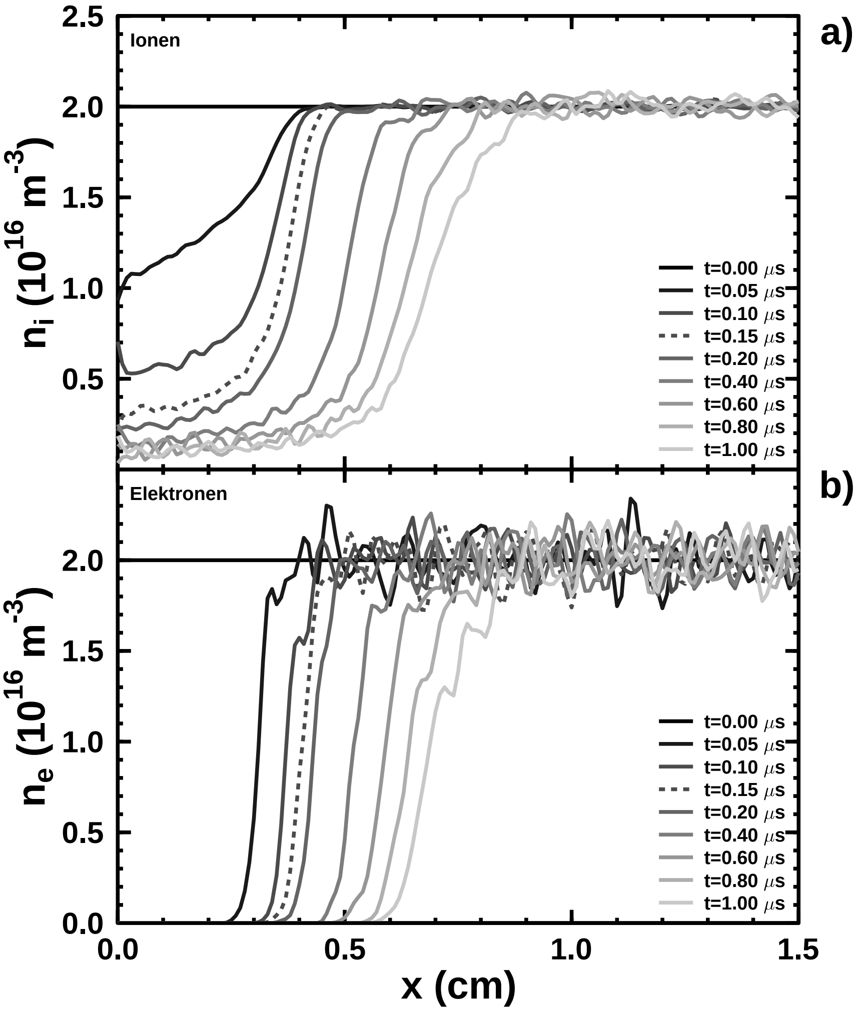

Abbildung 4.1: Zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung der a) Ionen und b) Elektronen für die Dauer von 1 μs nach Einschalten der negativen Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Die gestrichelten Kurven zum Zeitpunkt $t = 0.15\,\mu$s stellen die Verteilungen am Ende der Matrixschicht-Implantationsphase dar.

Die Dicke der Matrixschicht beträgt dabei $s_0 = (2\epsilon_0 \Delta\Phi / e n_\mathrm{p})^{1/2} = 2.35\,\mathrm{mm}$, wobei $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$ den Potentialunterschied zwischen Plasmainnerem und der Wand darstellt. Die berechnete Ausdehnung der Matrixschicht läßt sich anhand der simulierten Elektronendichteverteilung zum Zeitpunkt $t = 0.05\,\mu\mathrm{s}$ bestätigen, die zeigt, daß die Elektronendichte zwischen der Wand und der Stelle $x \approx 2.3\,\mathrm{mm}$ tatsächlich verschwindet. Erst auf der sehr viel größeren Zeitskala der inversen Ionenplasmafrequenz ${\omega_\mathrm{p,i}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{i} / n_\mathrm{p} e^2)^{1/2} = 34\,\mathrm{ns}$ beginnen dann die Ionen die Matrixschicht zu entleeren, indem sie mit einem stark zunehmenden Strom auf die Wand reagieren. Dadurch nimmt die Raumladungsdichte nahe der Wand ab und die Schichtkante, ab der die Ionen- und Elektronendichte wieder gleich sind, bewegt sich immer tiefer in das Plasma hinein. Die Ionendichteverteilung gewinnt dabei immer mehr die Form einer Verteilung, wie sie sich aus dem Child-Langmuir-Gesetz ergibt [Child, 1911; Langmuir, 1913].

Die zeitliche Entwicklung des Ionenwandstroms sowie der mittleren Implantationsenergie der Ionen zeigt Abbildung 4.2. Nach dem Einschalten der Wandspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ nimmt der Ionenstrom aufgrund der einsetzenden Entleerung der Matrixschicht stark zu und erreicht nach etwa $36\,\mathrm{ns} = 1.06 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ sein Maximum von $105\,\mathrm{A/m^2}$. Der beobachtete Zeitpunkt stimmt gut mit dem Modell von Lieberman [Lieberman, 1989] überein, wonach der Strompeak bei etwa $0.95 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1} = 32\,\mathrm{ns}$ auftreten sollte. Das einfache analytische Modell von Lieberman sagt für die Höhe des Strompeaks einen Wert von $0.55 \cdot n_\mathrm{p} e v_0 = 122\,\mathrm{A/m^2}$ voraus, der gegenüber dem simulierten Maximalwert um etwa 16% zu groß ist. Dabei stellt $v_0 = (2e\Delta\Phi/m_\mathrm{i})^{1/2} = 69.5\,\mathrm{km/s}$ die Maximalgeschwindigkeit der Ionen nach Durchfallen der vollen Potentialdifferenz von 1000 V dar. Ein anderer analytischer Ansatz von Riemann und Daube sagt für die Höhe des Maximums den Wert $0.4868 \cdot n_\mathrm{p} e v_0 = 108\,\mathrm{A/m^2}$ voraus, was sich mit dem simulierten Wert bis auf eine Abweichung von 3% deckt [Riemann und Daube, 1999]. Der vorhergesagte Zeitpunkt des Strommaximums liegt mit $t = 0.883 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1} = 30\,\mathrm{ns}$ ebenfalls in der Größenordnung der Simulation. Mit zunehmender Entleerung der Matrixschicht nimmt der Ionenstrom auf die Wand exponentiell mit einer Abklingzeit von $\tau = 88\,\mathrm{ns} = 2.6 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ ab. Bis zum Zeitpunkt $t = 0.15\,\mu\mathrm{s} = 4.4 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ folgt der Stromverlauf diesem Exponentialverhalten, danach setzt ein deutlich langsameres Abklingen des Wandstroms ein. Der Übergang zwischen den beiden Verhaltensweisen markiert das Ende der Matrixschicht-Implantationsphase und den Beginn der Child-Langmuir-Schicht-Implantation. Den gängigen Modellen zufolge sollte dieser Übergang bei $t \approx 3 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1} = 0.1\,\mu\mathrm{s}$ liegen, was mit der Beobachtung aus der Simulation annäherend übereinstimmt. Die genannte Dauer der Matrixschicht-Implantationsphase läßt sich auch am zeitlichen Verlauf der Ionendichteprofile nachvollziehen. Wie Abbildung 4.1 a) zeigt, ändern sich die Dichteprofile der Ionen für $0 \leq t \leq 0.15\,\mu\mathrm{s}$ ausschließlich im Bereich $0 \leq x \leq 4.5\,\mathrm{mm}$. Erst für spätere Zeiten setzt eine deutlich sichtbare Bewegung der Stelle ein, ab der die Ionen noch die anfängliche Dichte von $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$ besitzen. Die Dosis der auf die Wand treffenden Ionen beträgt am Ende der Matrixschicht-Implantationsphase etwa $5.7 \cdot 10^{13}\,\mathrm{m^{-2}}$.

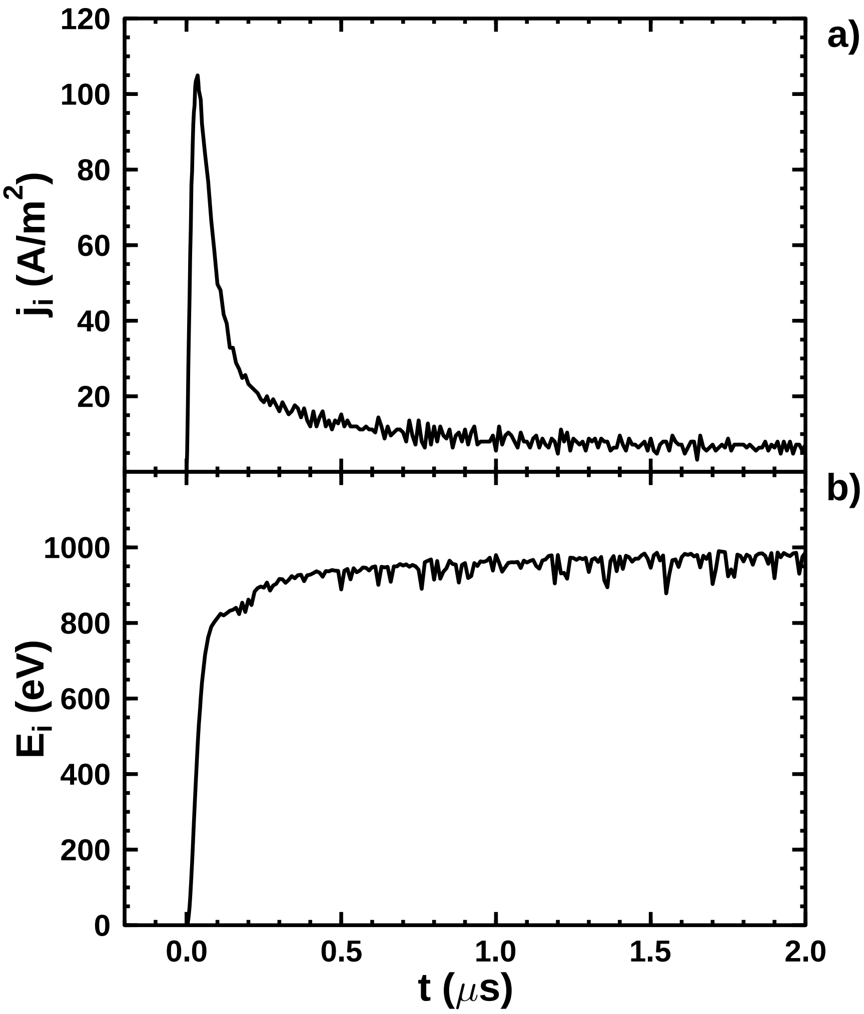

Abbildung 4.2: Zeitliche Entwicklung des a) Ionenwandstroms sowie der b) mittleren Implantationsenergie der Ionen nach Einschalten der negativen Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$.

Bis zum Einsetzen der Child-Langmuir-Schicht-Implantation bei $t = 0.15\,\mu\mathrm{s}$ wächst die mittlere Implantationsenergie der Ionen auf etwa 850 eV, um dann langsam gegen den Maximalwert von 1000 eV zu konvergieren (Abbildung 4.2 b)). Abschließend sei noch erwähnt, daß mit Ausnahme der ersten $0.1\,\mu\mathrm{s}$ nach Einschalten der negativen Hochspannung zu allen Zeiten mindestens 95% der Ionen die Wand unter einem Winkel von höchstens 1° (bezogen auf die Flächennormale) treffen. Mit der maximalen Ionen-Geschwindigkeit in x-Richtung von $v_0 = (2e\Delta\Phi/m_\mathrm{i})^{1/2} = 69.5\,\mathrm{km/s}$ und der mittleren transversalen Geschwindigkeit $\overline{v_\perp} = (\pi k_\mathrm{B} T_\mathrm{i}/2m_\mathrm{i})^{1/2} = 310\,\mathrm{m/s}$ erwartet man einen Aufschlagwinkel von $\vartheta \approx \tan\vartheta = \overline{v_\perp}/v_0 = 4.5 \cdot 10^{-3}$ entsprechend 0.26°, was mit dieser Aussage übereinstimmt. Während der ersten $0.1\,\mu\mathrm{s}$ gibt es noch einen Anteil von etwa 4% der Ionen, die unter einem Winkel zwischen 2° und 3° in die Wand eindringen.

4.4 PIII in einem Plasma mit ausgebildeter Randschicht

In diesem Abschnitt wird nun gezeigt, wie sich die Verhältnisse bei der PIII ändern, wenn man nicht mehr von einem homogenen Plasma ausgeht, sondern berücksichtigt, daß sich in einem Plasma nahe der Wand eine Plasmarandschicht ausbildet. Dazu wurde als Startkonfiguration das in Kapitel 2 beschriebene Plasma gewählt, bei dem sich die Verlustströme der Ionen und Elektronen auf die Wand gerade kompensieren. In diesem System befand sich das Plasmainnere nach wie vor auf Null-Potential, während die Wand jetzt auf Floatingpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ lag (Abbildung 2.1). Zur Simulation der Verlustströme wurden die Ionen auf der rechten Seite des Simulationsgebiets mit einer Schwerpunktsgeschwindigkeit von $3080\,\mathrm{m/s}$, entsprechend dem 0.7-fachen der Bohmgeschwindigkeit v_B, eingekoppelt. Das bedeutet, daß die rechte Berandung irgendwo in der Plasmavorschicht lag, in der die aus dem Plasmainneren kommenden thermischen Ionen auf die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ an der Schichtkante beschleunigt werden. Die Temperatur der Ionen relativ zur Schwerpunktsbewegung betrug dabei wieder $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$. Die Elektronen wurden als ruhendes thermisches Gas der Temperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ rechts eingekoppelt. Mit den Stromdichten $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ und $j_\mathrm{e} = 1516\,\mathrm{A/m^2}$ wurde dadurch ein Plasma der gewünschten Dichte simuliert, das vor der Wand eine Plasmarandschicht ausgebildet hat. In der Plasmavorschicht, die von der rechten Seite bis zur Stelle $x = 2.7\,\mathrm{mm}$ reichte, nahm das Potential monoton auf $-k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ an der Schichtkante ab. Die Plasmadichte fiel aufgrund der Beschleunigung der Ionen und des elektrischen Gegenfeldes für die Elektronen ebenfalls monoton ab und erreichte an der Schichtkante nur noch den Wert $1.35 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$. In der eigentlichen Randschicht nahm die Ionendichte schließlich auf unter $4.5 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m^{-3}}$ ab, während die Elektronendichte dort sogar nur noch $1.6 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m^{-3}}$ betrug. Diese Werte machen deutlich, daß ein Plasma in der Nähe einer Wand keineswegs als homogen anzusehen ist.

Die Simulation wurde nun zum Zeitpunkt $t = -0.2\,\mu\mathrm{s}$ gestartet und wieder bei $t = 0$ das Wandpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ auf $-1000\,\mathrm{V}$ umgeschaltet. Die anschließende zeitliche Änderung der Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen ist in Abbildung 4.3 für die Dauer von $1\,\mu\mathrm{s}$ dargestellt, wobei der zeitliche Abstand zwischen den Kurven zu Beginn $0.05\,\mu\mathrm{s}$ und später nur noch $0.2\,\mu\mathrm{s}$ beträgt. Die Elektronen reagieren wieder auf der Zeitskala der inversen Elektronenplasmafrequenz ${\omega_\mathrm{p,e}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{e}/n_\mathrm{p}e^2)^{1/2} = 0.13\,\mathrm{ns}$ auf die geänderten Potentialverhältnisse an der Wand, indem sie schlagartig von der Wand zurückweichen. Dadurch bleibt zunächst nahe der Wand wieder eine Ionenmatrixschicht zurück. Weil die Ionendichte in der Rand- und damit in der Matrixschicht aber deutlich geringer ist als im Fall des homogenen Plasmas, muß die Matrixschicht dicker werden, damit sich das Potential in ihr um den vollen Betrag von $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$ ändern kann. Die Elektronendichte erreicht jetzt an der Stelle $x \approx 3\,\mathrm{mm}$ den Wert Null. Die Matrixschichtdicke hat damit gegenüber der Ausdehnung im Fall des homogenen Plasmas um $0.7\,\mathrm{mm}$ zugenommen. Der Wert $s_0 = 3\,\mathrm{mm}$ entspricht der Matrixschichtdicke eines homogenen Plasmas der Dichte $n_\mathrm{p} = 2\epsilon_0\Delta\Phi/e{s_0}^2 = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$. Das ist auch etwa die anfängliche mittlere Ionendichte im Bereich $0 \leq x \leq 3\,\mathrm{mm}$, wie Abbildung 4.3 a) zeigt.

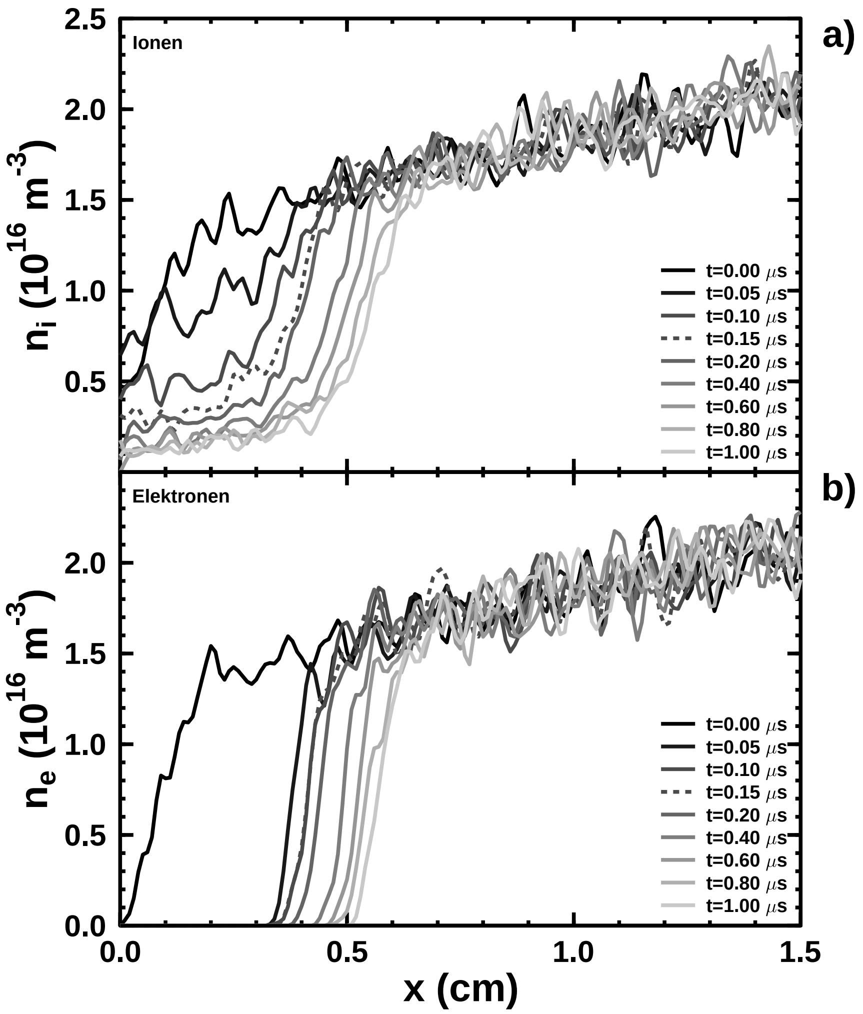

Abbildung 4.3: Zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung der a) Ionen und b) Elektronen für die Dauer von $1\,\mu$s nach Einschalten der negativen Hochspannung von -1000 V zum Zeitpunkt $t = 0$. Die gestrichelten Kurven zum Zeitpunkt $t = 0.15\,\mu$s stellen annäherend die Verteilungen am Ende der Matrixschicht-Implantationsphase dar.

Die Ionen reagieren wieder erst auf der Zeitskala der inversen Ionenplasmafrequenz ${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_{\mathrm{i}}/n_{\mathrm{p}} e^2)^{1/2} = 44\,\mathrm{ns}$ auf den Potentialsprung an der Wand, indem sie versuchen, den Ionenüberschuß in der Matrixschicht durch einen stark zunehmenden Wandstrom zu reduzieren. Bei der Berechnung der Ionenplasmafrequenz wurde dabei jetzt die oben angegebene mittlere Ionendichte von $n_{\mathrm{p}} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ im Bereich der Randschicht verwendet. Der Grund dafür liegt darin, daß Ionenplasmaschwingungen, die durch das Umschalten der Wandspannung angeregt werden, ja in diesem wandnahen Bereich ihren Ursprung haben. Abbildung 4.4 zeigt die zeitliche Entwicklung des Ionenwandstroms sowie der mittleren Implantationsenergie der Ionen im Vergleich zu den Kurven aus der Simulation des homogenen Plasmas (Abbildung 4.2). Das Maximum des Ionenstroms tritt gegenüber der früheren Simulation leicht verzögert zum Zeitpunkt $t = 60\,\mathrm{ns} = 1.4 \cdot {\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1}$ auf und erreicht mit $63\,\mathrm{A/m^2}$ auch nur noch 60% der vorherigen Höhe. Auch in Einheiten der inversen Ionenplasmafrequenz ausgedrückt, die sich ja etwas vergrößert hat, tritt das Maximum zu einem geringfügig späteren Zeitpunkt auf. Die Verkleinerung des Maximalwertes läßt sich durch die geringere Ionendichte in der Matrixschicht verstehen, die eine Folge der Plasmarandschicht ist und im Mittel bei $n_{\mathrm{i}} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$ liegt. Legt man diesen

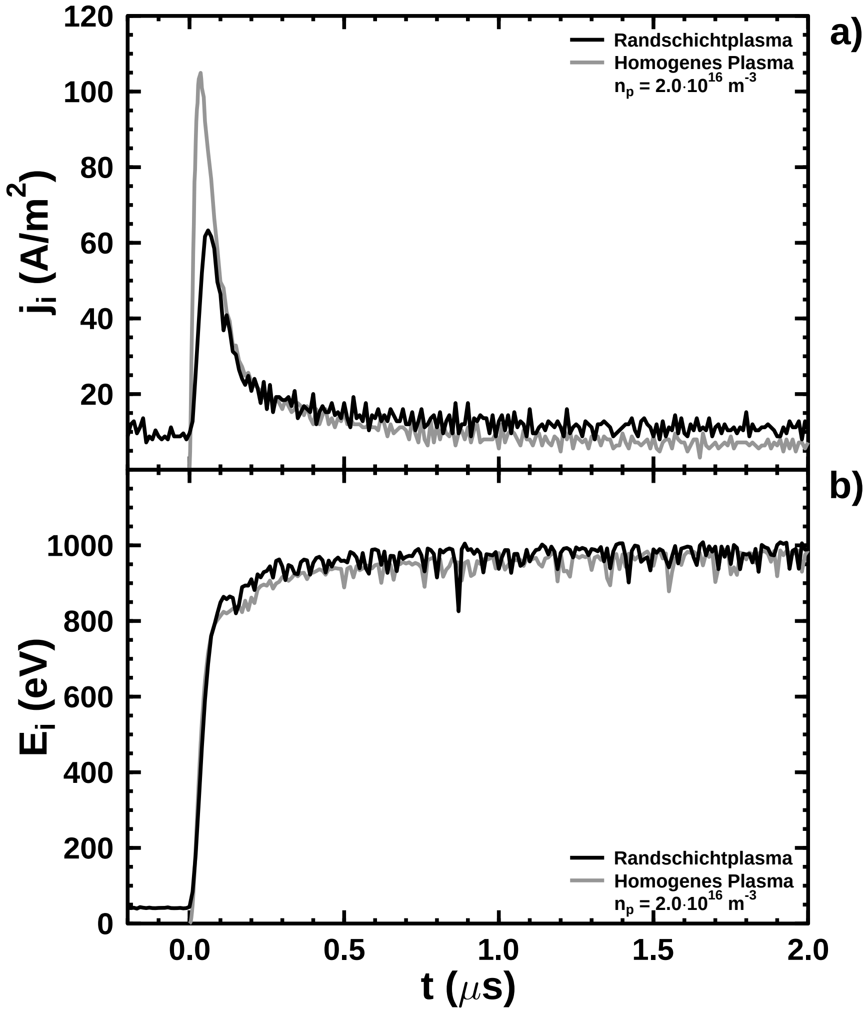

Abbildung 4.4: Vergleich der zeitlichen Entwicklung des a) Ionenwandstroms sowie der b) mittleren Implantationsenergie der Ionen zwischen dem Fall des Randschichtplasmas und des homogenen Plasmas der Dichte $n_{\mathrm{p}} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$. Die negative Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ wurde zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltet.

Wert zugrunde, dann sollte nach Lieberman das Maximum den Wert $0.55 \cdot n_\mathrm{i} e v_0 = 73\,\mathrm{A/m^2}$ annehmen, nach Riemann und Daube dagegen nur $0.4868 \cdot n_\mathrm{i} e v_0 = 65\,\mathrm{A/m^2}$. Darin bedeutet v_0 wieder die maximale Ionengeschwindigkeit von 69.5 km/s an der Wand. Beide Vorhersagen stimmen mit der Simulation größenordnungsmäßig überein, wobei der Fehler bei Riemann und Daube am geringsten ist und wieder wie zuvor 3% beträgt. Bei der anschließenden Abnahme der Wandstromdichte aufgrund der fortschreitenden Entleerung der Matrixschicht zeigt sich wieder ein exponentielles Abklingverhalten, bei dem die Abklingzeit bei $\tau = 116\,\mathrm{ns} = 2.7 \cdot \omega_{\mathrm{p,i}}{}^{-1}$ liegt und damit in Einheiten der inversen Ionenplasmafrequenz ausgedrückt so groß ist wie zuvor. Das Exponentialverhalten hält bis $t = 0.18\,\mu\mathrm{s} = 4.1 \cdot \omega_{\mathrm{p,i}}{}^{-1}$ an, anschließend nimmt der Ionenwandstrom deutlich langsamer ab. Dieser Zeitpunkt wird daher wieder als Übergang von der Matrixschicht-Implantationsphase zur Child-Langmuir-Schicht-Implantation gedeutet. Die Dosis der während der Matrixschicht-Implantationsphase auf die Wand treffenden Ionen beträgt dabei etwa $4.6 \cdot 10^{13}\,\mathrm{m^{-2}}$ und liegt damit gut 20% unter dem Wert von $5.7 \cdot 10^{13}\,\mathrm{m^{-2}}$, der sich aus der Simulation des homogenen Plasmas ergeben hat. Die aufgrund der geringeren Ionendichte länger andauerende Matrixschicht-Implantationsphase kann offensichtlich den Unterschied in den Peakhöhen von beinahe 40% etwas kompensieren. Der Vergleich zwischen den beiden Kurven in Abbildung 4.4 a) zeigt aber, daß in der Simulation mit dem homogenen Plasma der Ionenwandstrom in der Phase der Child-Langmuir-Schicht-Implantation unter den Strom aus der Randschichtsimulation abfällt. Bei $t = 2\,\mu\mathrm{s}$ beträgt der Unterschied beinahe einen Faktor 2. Der Grund dafür liegt darin, daß in der Randschichtsimulation ständig ein Ionenstrom der Stärke $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ vom Plasmabulk kommend in die Vorschicht eingekoppelt wird, wohingegen in der homogenen Plasmasimulation dieser Strom fehlt. Dieser Unterschied wird in der Sättigungsstromdichte sichtbar.

Die mittlere Implantationsenergie der Ionen wächst mit Einschalten der Hochspannung von 40 eV bis auf 890 eV am Ende der Matrixschicht-Implantationsphase bei $t = 0.18\,\mu\mathrm{s}$ an und liegt dabei durchweg um etwa 40 eV höher als im Fall der homogenen Plasmasimulation (Abbildung 4.4 b)). Das hat seinen Grund in der bereits vor dem Einschalten des Wandpotentials von $-1000\,\mathrm{V}$ vorhandenen kinetischen Energie der Ionen, die in der Vorschicht und der eigentlichen Randschicht schon ein Potentialgefälle von 40.285 V durchlaufen können. Mit zunehmender Zeit verschwindet dieser Unterschied jedoch immer mehr. Dieses Verhalten zeigt auch ein Vergleich der Ionen-Energieverteilungen aus beiden Simulationen zu verschiedenen Zeiten, die in Abbildung 4.5 zu sehen sind. In beiden Fällen verschiebt sich der Schwerpunkt der Verteilung mit zunehmender Zeit zu höheren Energien hin, wobei die Breite der Verteilung stetig abnimmt. Offenbar eilt dabei die Energieverteilung des Randschichtplasmas der Verteilung für das ursprünglich homogene Plasma immer etwas voraus, der Unterschied verschwindet jedoch mit zunehmender Zeit immer mehr.

Eine Untersuchung der Winkelverteilung der auf die Wand treffenden Ionen zeigt, daß der Anteil der Ionen, die unter einem Winkel von maximal 1° (bezogen auf die Flächennormale) implantiert werden, während allen Implantationsphasen zwischen 84% und 89% liegt. Unter einem Winkel zwischen 1° und 2° werden dagegen etwa 8% bis 13% implantiert. In sehr geringem Maße kommen auch höhere Winkel bis maximal 4° vor. Ein

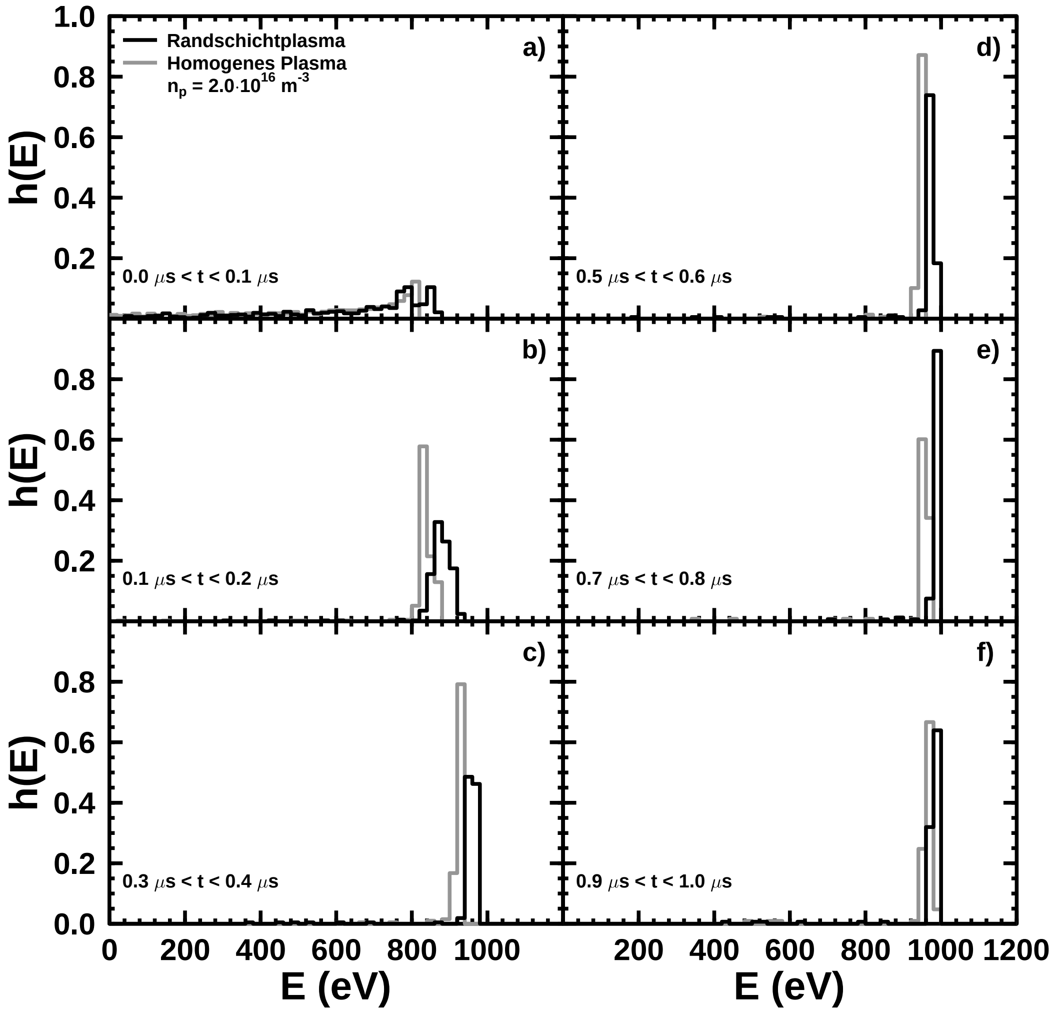

Abbildung 4.5: Vergleich der zeitlichen Entwicklung der Ionen-Energieverteilungen zwischen der Simulation ausgehend vom homogenen Plasma der Dichte $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ und der Simulation des Randschichtplasmas. Die dargestellten Verteilungen stellen zeitliche Mittel während der angegebenen Zeitintervalle dar.

Vergleich mit den Implantationswinkel, die in der Simulation ausgehend vom homogenen Plasma beobachtet wurden, zeigt, daß die Ionen jetzt geringfügig schiefer auf die Wand auftreffen. Das hat seinen Grund darin, daß alle Ionen auf der rechten Seite in das Simulationsgebiet eingekoppelt werden und daher dessen volle Länge von $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ durchlaufen müssen, bevor sie die Wand erreichen. Auf ihrem Weg können die Ionen dabei mehr Stöße mit den neutralen Atomen machen als im Fall der homogenen Simulation, wo die Teilchen praktisch aus der Ruhe heraus auf die Wand zu beschleunigt werden. Als Folge der zunehmenden Zahl von Stößen wächst schließlich die transversale Geschwindigkeitskomponente und damit der mittlere Implantationswinkel an.

4.5 Vergleich zur PIII in einem homogenen Plasma mit reduzierter Dichte

Im Zusammenhang mit der Matrixschichtdicke sowie dem maximalen Implantationsstrom wurde bereits mehrfach darauf hingewiesen, daß sich das Randschichtplasma aufgrund der zur Wand hin abnehmenden Teilchendichten bei der PIII so verhält, als hätte es statt der Bulkplasmadichte von $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ nur die Dichte von $1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$. Aus diesem Grund liegt es nahe, die oben diskutierten Ergebnisse noch einmal mit den Resultaten zu vergleichen, die eine Simulation ausgehend von einem homogenen Plasma einer reduzierten Dichte liefert. Dazu wurde eine ähnliche PIC/MC-Simulation wie die in Abschnitt 4.3 beschriebene durchgeführt, bei der die Dichte aber nur $n_\mathrm{p} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ betrug.

Die zeitliche Entwicklung der Dichteverteilungen nach Einschalten der Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ an der linken Wand zeigt Abbildung 4.6. Die Matrixschicht sollte der reduzierten Dichte wegen die Ausdehnung $s_0 = (2\epsilon_0 \Delta\Phi / e n_\mathrm{p})^{1/2} = 3.03\,\mathrm{mm}$ besitzen, was durch das Verschwinden der Elektronendichte zum Zeitpunkt $t = 0.05\,\mu\mathrm{s}$ nahe der Stelle $x = 3\,\mathrm{mm}$ bestätigt wird. Im Verlauf der Matrixschicht-Implantationsphase steigt der Ionenstrom auf die Wand zunächst wieder steil an und erreicht bei etwa $50\,\mathrm{ns} = 1.1 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ sein Maximum von $62\,\mathrm{A/m}^2$. Anschließend fällt der Strom wieder bis $t = 0.18\,\mu\mathrm{s} = 4.1 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ mit einer Abklingzeit von $\tau = 119\,\mathrm{ns} = 2.7 \cdot {\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ exponentiall ab. Die gesamte bis zu diesem Zeitpunkt implantierte Ionendosis beträgt dabei $4.5 \cdot 10^{13}\,\mathrm{m}^{-2}$ und stimmt also mit der entsprechenden Dosis aus der Randschichtsimulation bis auf etwa 2% überein. Ein Vergleich zwischen dem zeitlichen Verlauf des Implantationsstroms in dieser Simulation und dem Verlauf in der Simulation des Randschichtplasmas zeigt Abbildung 4.7. Mit Ausnahme des geringen zeitlichen Versatzes des Maximums zeigen beide Kurven während der Matrixschicht-Implantationsphase bis etwa $0.2\,\mu\mathrm{s}$ eine sehr gute Übereinstimmung und unterstreichen damit die Eigenschaft des Randschichtplasmas, sich bei der PIII zunächst wie ein homogenes Plasma zu verhalten, dessen Dichte der mittleren Ionendichte in der Randschicht entspricht. Mit Einsetzen der Child-Langmuir-Schicht-Implantation, bei der sich die Schichtkante immer mehr ins Plasmainnere zurückzieht, um dabei Ionen freizusetzen, die den Wandstrom weiterhin aufrechterhalten können, entwickelt sich das homogene Plasma mit der reduzierten Dichte anders als das eigentliche Randschichtplasma aus Abschnitt 4.4. Das hat seine Ursache darin, daß dabei die Ionendichte an der Schichtkante einer große Rolle spielt. Während im vorliegenden homogenen Plasma die Dichte an der Schichtkante stets $1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ beträgt, wächst sie im Randschichtplasma immer mehr an, weil sich die Schichtkante immer tiefer ins Plasmainnere bewegt, wo die Plasmadichte schließlich auf $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ zunimmt. In diesem Fall verhält sich das Randschichtplasma dann wieder wie das ursprünglich homogene Plasma der Dichte $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$. Um diesen Sachverhalt zu verdeutlichen, wurde in allen drei Simulationen die Verschiebung der Schichtkante gemessen. Als Position s der Schichtkante wurde dabei die Stelle definiert, an der die Ionen die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e} / m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ erreichen. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen sind in Abbildung 4.8 vergleichsweise gegenüber-

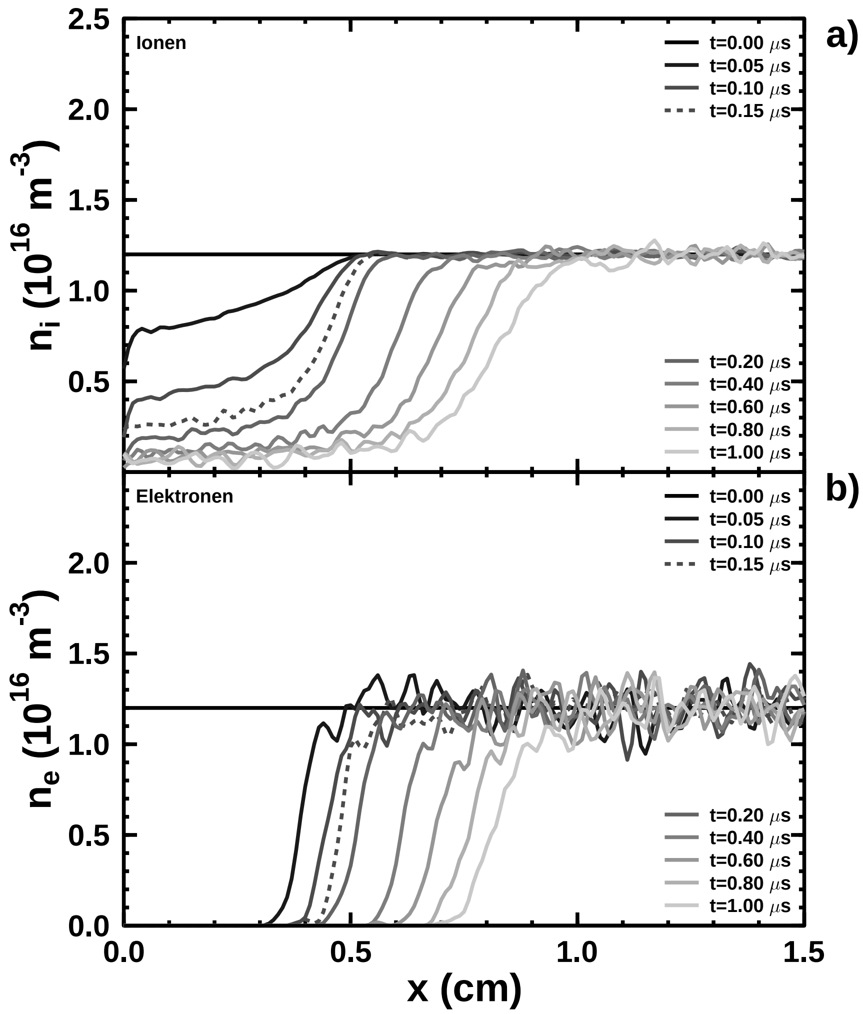

Abbildung 4.6: Zeitliche Entwicklung der Dichteverteilung der a) Ionen und b) Elektronen für die Dauer von 1 μs nach Einschalten der negativen Hochspannung von -1000 V zum Zeitpunkt $t = 0$. Die gestrichelten Kurven zum Zeitpunkt $t = 0.15\,\mu$s stellen annäherend die Verteilungen am Ende der Matrixschicht-Implantationsphase dar.

gestellt. Darin ist sehr gut zu erkennen, daß die Kurven für das Randschichtplasma und für das homogenen Plasma der Dichte $1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ bei etwa $s = 3$ mm beginnen, was der anfänglichen Matrixschichtdicke in beiden Fällen entspricht, und während der ersten $0.2\,\mu$s nahezu übereinstimmen. Im weiteren Verlauf bleibt jedoch die Schichtkante in der Randschichtsimulation immer mehr zurück und nähert sich schließlich der Schichtkantenposition des homogenen Plasmas der Dichte $2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ an, dessen Kurve bei etwa $s = 2.3$ mm beginnt.

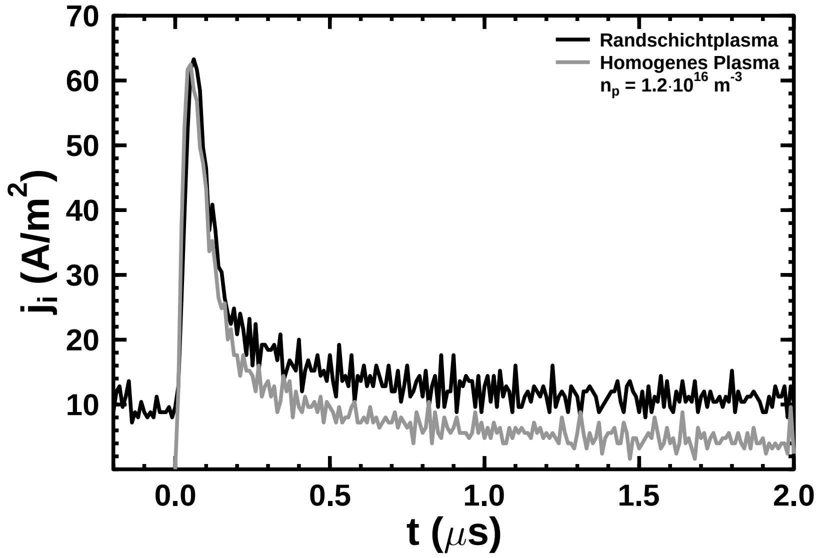

Abbildung 4.7: Vergleich der zeitlichen Entwicklung des Ionenwandstroms zwischen dem Fall des Randschichtplasmas und des homogenen Plasmas der Dichte $n_{\mathrm{p}} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$. Die negative Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ wurde zum Zeitpunkt $t = 0$ eingeschaltet.

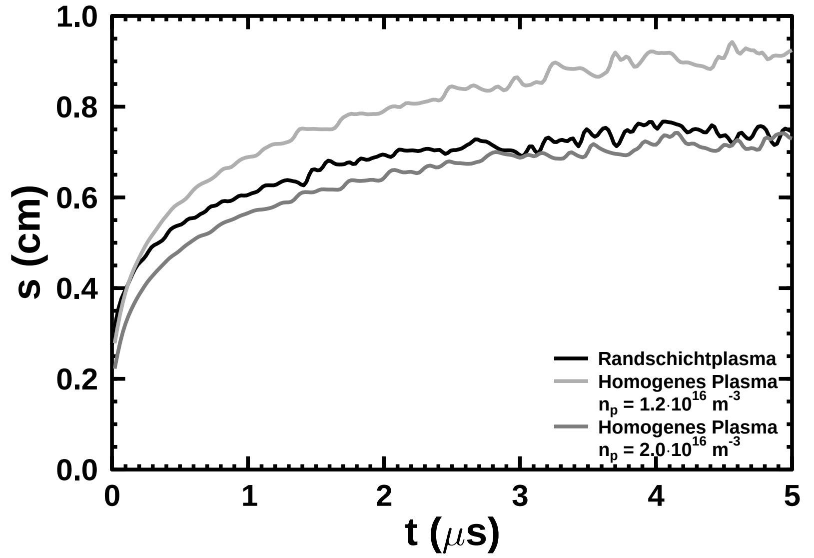

Abbildung 4.8: Gegenüberstellung der Verschiebung der Position der Schichtkante s nach Einschalten der Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$ für die Fälle des Randschichtplasmas und der homogenen Plasmen mit den Dichten $n_{\mathrm{p}} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ und $n_{\mathrm{p}} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$.

4.6 Zusammenfassung

Die vorliegenden Untersuchungen haben gezeigt, daß die Randschicht eines Plasmas, bestehend aus Schicht und Vorschicht, einen deutlichen Einfluß auf alle bei der PIII wichtigen Größen wie Implantationsstrom, Winkelverteilung und Energieverteilung der implantierten Ionen hat. Das vorhandene Dichtegefälle in der Plasmarandschicht sowie die beim Durchlaufen der Schicht und Vorschicht ablaufenden physikalischen Prozesse machen es unmöglich, alle Vorgänge bei der PIII allein mit den Eigenschaften eines homogenen Plasmas erklären zu können. Aus diesem Grund muß für eine vollständige Charakterisierung der Vorgänge bei der PIII die Plasmarandschicht stets berücksichitgt werden.

Kapitel 5

Dynamik von Schicht und Vorschicht bei der planaren PIII

5.1 Einleitung

Die Expansion der Schicht als Folge einer plötzlich an eine Elektrode angelegten negativen Hochspannung spielt eine zentrale Rolle bei der PIII. Aus diesem Grund wurde dieses Phänomen bereits eingehend in zahlreichen Experimenten untersucht [Cho *et al.*, 1988; Scheuer *et al.*, 1990; Shamim *et al.*, 1991; Xia und Chan, 1993; Günzel und Brutscher, 1996; Mändl, 1997] als auch durch analytische Modelle beschrieben [Andrews und Varey, 1971; Lieberman, 1989; Stewart und Lieberman, 1991]. Das Verhalten der Vorschicht auf die expandierende Schicht ist dagegen noch weitgehend unbekannt und wurde erst in jüngster Zeit untersucht [Brutscher *et al.*, 1996; Günzel und Brutscher, 1996; Mändl, 1997]. In diesem Kapitel werden Ergebnisse vorgestellt, die durch Simulation eindimensionaler, planarer Plasmarandschichten gewonnen wurden und die die Dynamik der Vorschicht bei der Schichtausbreitung beleuchten.

5.2 Simulation der Plasmarandschicht

Zunächst wurde mit Hilfe des PIC/MC-Computersimulationsverfahrens eine stationäre Plasmarandschicht in der Nähe einer Wand simuliert, die auf dem Floatingpotential $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$ liegt. Die Dichte- und Potentialverteilungen in dieser Randschicht, deren Eigenschaften in Abschnitt 2.2 eingehend beschrieben wurden, sind zusammen mit dem Betrag der Ionendriftgeschwindigkeit in Abbildung 5.1 dargestellt. Wie Abbildung 5.1 a) zu entnehmen ist, nimmt die Teilchendichte vom Plasmabulk, der sich rechts außerhalb der Darstellung befindet, zur Wand auf der linken Seite hin monoton ab. Der Dichteverlauf stimmt qualitativ gut mit experimentell gemessenen Verläufen [Brutscher *et al.*, 1996] überein. Im Bereich $x \geq 0.3\,\mathrm{cm}$ haben die Ar^{+}-Ionen und die Elektronen die

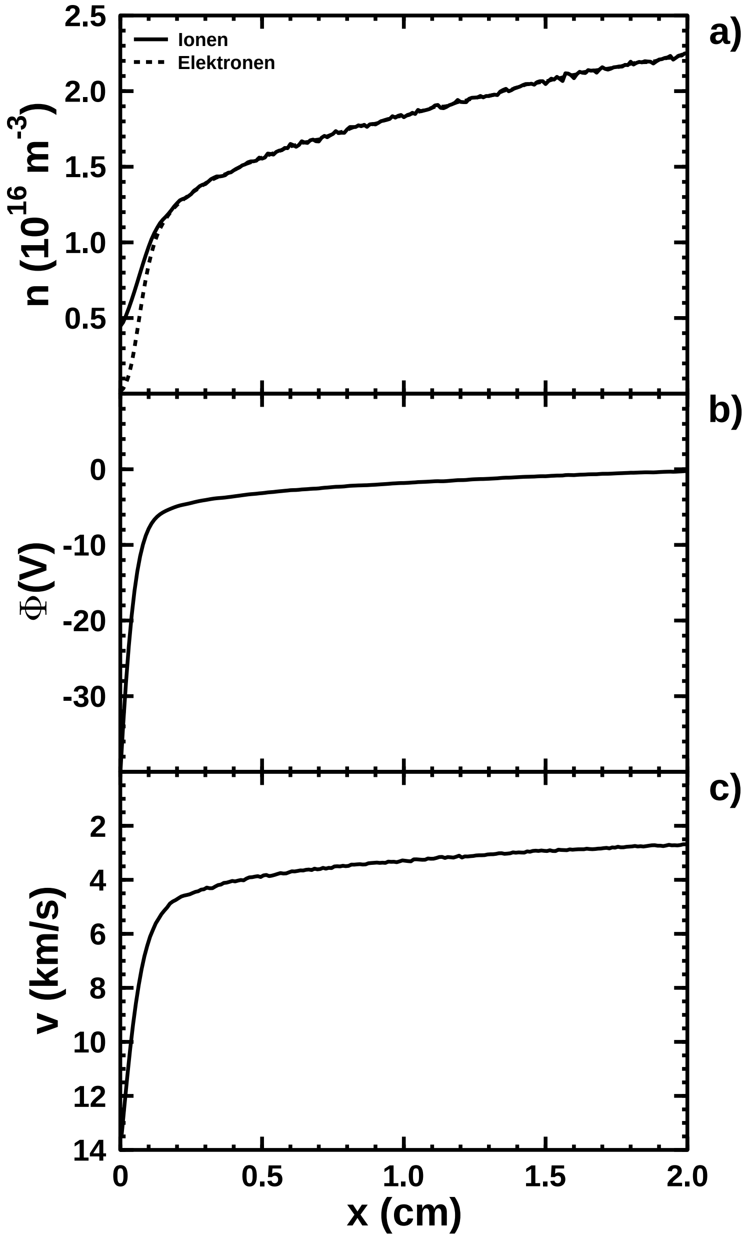

Abbildung 5.1: Stationäre Floatingpotential-Randschicht: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen, b) Potentialverteilung, c) Betrag der Ionendriftgeschwindigkeit.

gleiche Dichte und das Plasma ist dort quasineutral. Dieser Bereich, in dem das Potential von 0 V auf der rechten Seite auf $-k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/2e = -4\,\mathrm{V}$ bei $x \approx 0.3\,\mathrm{cm}$ abfällt, gehört zur Vorschicht. In ihr werden die Ionen auf die Bohmgeschwindigkeit $v_{\mathrm{B}} = \sqrt{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{i}}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ beschleunigt, die sie an der Schichtkante bei $x \approx 0.27\,\mathrm{cm}$ erreichen (Abbildung 5.1 c)). Da der Ionenstrom aufgrund der Stromerhaltung in der planaren Vorschicht an jeder Stelle gleich groß ist, muß die Teilchendichte mit zunehmender Geschwindigkeit abnehmen, wie in Abbildung 5.1 a) zu sehen ist. Die Elektronen besitzen im Bereich der Vorschicht die gleiche Dichte wie die Ionen. Erst an der Schichtkante nahe $x = 0.3\,\mathrm{cm}$ sinkt die Elektronendichte unter die Ionendichte und verschwindet fast vollständig an der linken Wand. Der Bereich $0 \leq x \leq 0.27\,\mathrm{cm}$ stellt daher die eigentliche Plasmaschicht dar. Das Potential sinkt in der Schicht wegen des Vorhandenseins der positiven Raumladung sehr schnell um 36 V auf $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$ an der Wand links ab (vgl. Abbildung 5.1 b)).

Durch die Realisierung der Randbedingungen mit dem in Anhang B beschriebenen Verfahren treten in den Simulationen keine Effekte auf, die im Zusammenhang mit anderen Berandungen des Plasmas stehen könnten. Experimentell läßt sich das durch eine sehr kleine Dimensionierung des Targets im Vergleich zu den Wandflächen der Plasmakammer realisieren.

5.3 Dynamik der Schichtexpansion

Wird an die linke Wand nun plötzlich eine negative Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -1000\,\mathrm{V}$ angelegt, so kommt es zur Schichtexpansion. Die Schicht dehnt sich dabei um etwas mehr als 0.5 cm aus und erreicht schließlich eine Dicke von 0.8 cm. Am Ende dieser Expansion stellt sich wieder ein stationärer Zustand ein. Die Dichte- und Potentialverteilungen sowie die Verteilung des Betrags der Ionendriftgeschwindigkeit in dieser Hochspannungsrandschicht sind in Abbildung 5.2 dargestellt sind. Auch hier zeigt sich eine gute qualitative Übereinstimmung mit experimentell gemessenen Dichteverteilungen [Brutscher *et al.*, 1996]. Während die Elektronendichte aufgrund des sehr starken Gegenfeldes bereits bei $x \approx 0.55\,\mathrm{cm}$ auf Null absinkt, ändert sich die Ionendichte im Bereich $0 \leq x \leq 0.5\,\mathrm{cm}$ nur sehr wenig und beträgt im Mittel etwa $2 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$. In dieser Region erfolgt wegen der dort ausschließlich positiven Raumladung nahezu der gesamte Potentialabfall um 1000 V zwischen Plasmabulk und linker Wand.

Die aus dem Plasmabulk kommenden Ionen werden sowohl in der stationären Floatingpotential-Randschicht als auch in der stationären Hochspannungsrandschicht in dem jeweils vorhandenen Potentialgefälle zwischen Plasma und Wand beschleunigt. Dabei erreicht ihre Driftgeschwindigkeit v nach dem Bohmkriterium in der Vorschicht nur Beträge kleiner als die Bohmgeschwindigkeit, $v < v_{\mathrm{B}}$, während in der Schicht nur Geschwindigkeitsbeträge größer als die Bohmgeschwindigkeit, $v > v_{\mathrm{B}}$, angenommen werden. An der Schichtkante selbst gilt dagegen stets $v = v_{\mathrm{B}}$. Um nun die Dynamik der Schicht- und Vorschichtreaktion auf die angelegte Hochspannung zu untersuchen, genügt es, die zeitliche Bewegung der Orte zu messen, an denen die Ionendriftgeschwindigkeit bestimmte Beträge erreicht. Um das zu verdeutlichen, sind in Abbildung 5.3 die Beträge der Ionendriftgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort x für die beiden stationären Plasmarandschichten bei Anliegen des Wandpotentials $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -40.285\,\mathrm{V}$

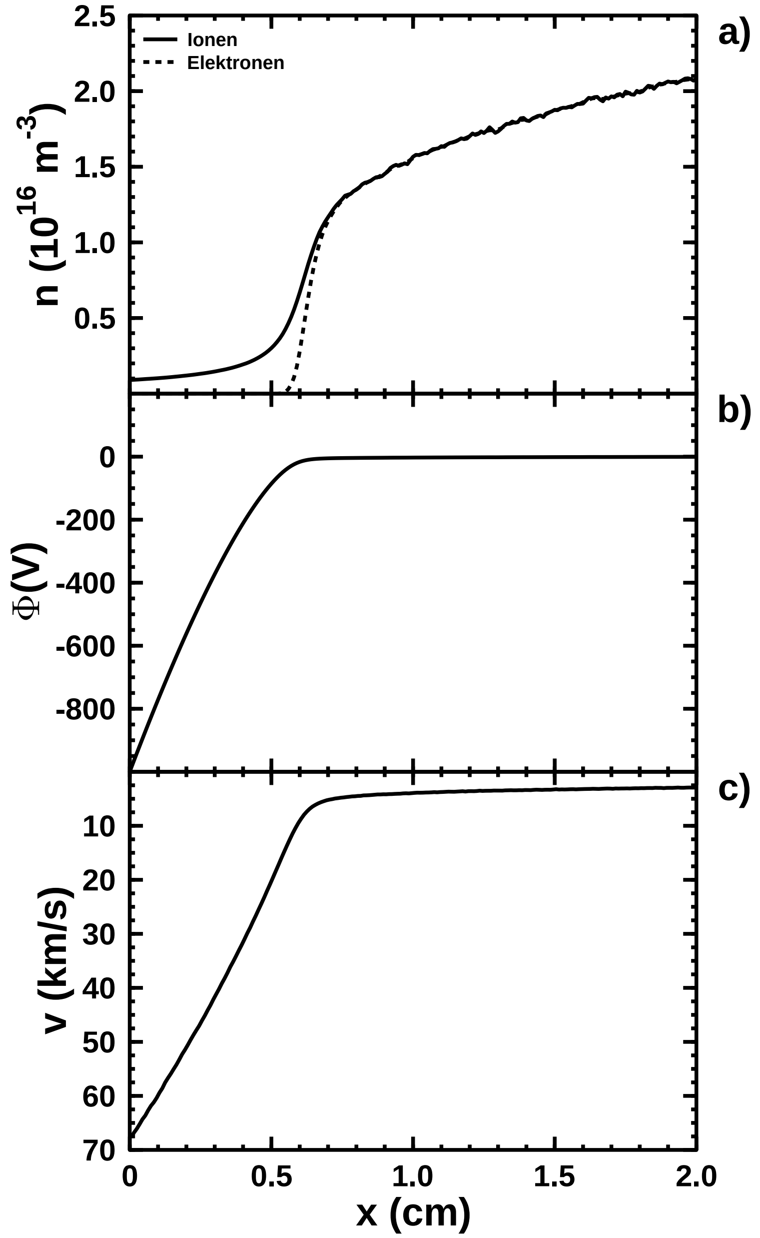

Abbildung 5.2: Stationäre Plasmarandschicht nach Anlegen der negativen Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -1000\,\mathrm{V}$ an die Wand: a) Dichteverteilung der Ionen und Elektronen, b) Potentialverteilung, c) Betrag der Ionendriftgeschwindigkeit.

bzw. $\Phi_{\mathrm{Wand}} = -1000\,\mathrm{V}$ dargestellt. An den markierten Positionen erreichen die Ionen Driftgeschwindigkeiten mit den Beträgen $v = 0.61\,v_{\mathrm{B}}$, $0.68\,v_{\mathrm{B}}$, $0.80\,v_{\mathrm{B}}$ und v_{B}. Während der Expansion der Randschicht kommt es nun zu einer Bewegung dieser Markierungen, was durch die eingezeichneten Pfeile verdeutlicht werden soll. Durch

Messung dieser Bewegungen erhält man sogenannten Isotachen (Orte konstanter Geschwindigkeit), mit denen die Dynamik der Schicht- und Vorschichtreaktion charakterisiert werden kann. Je kleiner dabei die Ionendriftgeschwindigkeit ist, die zu einer Isotache gehört, umso weiter befindet sich diese Isotache von der linken Wand entfernt. Das Ergebnis der Messungen der Isotachen ist in Abbildung 5.4 zu sehen. Vor Anlegen der Hochspannung erreichen die Ionen eine Maximalgeschwindigkeit von $v_0 = \sqrt{2e\Delta\Phi/m_\mathrm{i} + (\alpha v_\mathrm{B})^2} \approx 14000\,\mathrm{m/s}$, nachdem sie in der Schicht- und Vorschicht die Potentialdifferenz von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ durchfallen haben. Sie erreichen diese Geschwindigkeit direkt an der linken Wand. Nach Anlegen der Hochspannung weicht dieser Teil der Schicht, der ursprünglich direkt an der Wand lag, mit Überschallgeschwindigkeit von der Wand zurück und dringt dabei tief in die daherhinterliegenden Schichtbereiche ein (vgl. Trajektorien der Isotachen zu $v = v_0$ und $v = v_\mathrm{B}$ in Abbildung 5.4). Nach etwa $0.25\,\mu$s geht die Überschallexpansion des ursprünglich wandnahen Schichtteils in eine Unterschallexpansion über, und erreicht nach $5\,\mu$s bereits die endgültige Lage bei $x \approx 0.53\,\mathrm{cm}$. Die Schichtkante, die anfänglich bei $x \approx 0.27\,\mathrm{cm}$ lag (vgl. Isotache mit $v = v_\mathrm{B}$), wird durch die Überschallexpansion der wandnahen Schichtbereiche ebenfalls zu einem Zurückweichen mit Überschallgeschwindigkeit getrieben. Auch hier endet die Überschallexpansion nach $0.25\,\mu$s, die Schichtkante entfernt sich jedoch noch weiter von der Wand und nimmt erst

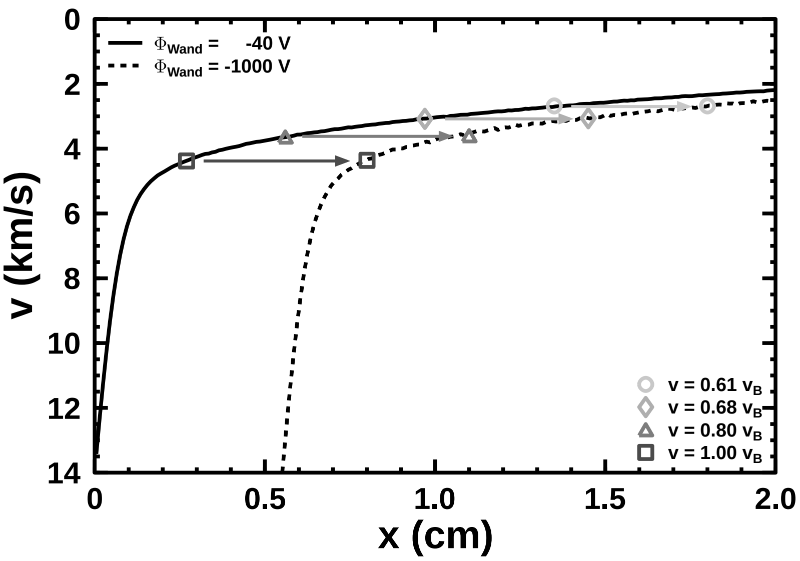

Abbildung 5.3: Darstellung der Beträge der Ionendriftgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort x für die beiden stationären Plasmarandschichten bei Anliegen des Wandpotentials $\Phi_\mathrm{Wand} = -40.285\,\mathrm{V}$ bzw. $\Phi_\mathrm{Wand} = -1000\,\mathrm{V}$. An den markierten Positionen erreicht die Ionendriftgeschwindigkeit die Beträge $v = 0.61\,v_\mathrm{B}$, $0.68\,v_\mathrm{B}$, $0.80\,v_\mathrm{B}$ und v_B. Die eingezeichneten Pfeile sollen die Bewegungen dieser Markierungen während der Expansion der Randschicht symbolisieren.

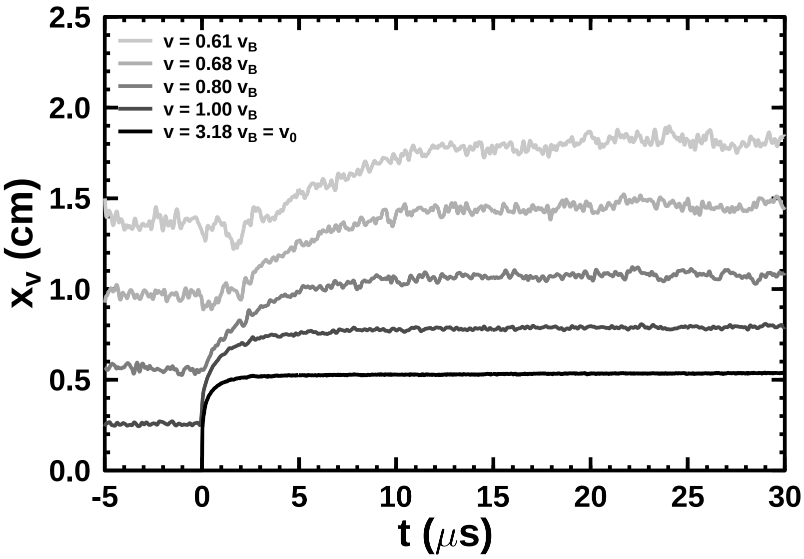

Abbildung 5.4: Bewegung der Isotachen (Orte konstanter Ionengeschwindigkeit) als Folge des Anlegens einer negative Hochspannung zum Zeitpunkt $t = 0$ an die linke Wand. $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ stellt die Bohmgeschwindigkeit dar, $v_0 = 14000\,\mathrm{m/s}$ ist die Maximalgeschwindigkeit der Ionen vor Anlegen der Hochspannung.

nach etwa $10\,\mu$s ihre neue Gleichgewichtsposition bei $x \approx 0.8\,\mathrm{cm}$ ein. Die Zeitspanne von $0.25\,\mu$s, während der die Überschallexpansion der Schicht stattfindet, entspricht etwa der Dauer der Matrixschicht-Implantation, wie sich in Abschnitt 4.4 gezeigt hat. Nachdem alle Ionen aus der anfänglichen Matrixschicht verschwunden sind, geht der Ionenstrom in einen raumladungsbegrenzten Strom über und die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schichtkante sinkt auf Schall- bzw. Unterschallgeschwindigkeit [Widner *et al.*, 1970]. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Vorschicht (Isotachen mit $v < v_\mathrm{B}$) bleibt sogar zu allen Zeiten im Unterschallbereich. Je weiter sich der gerade betrachtete Teil der Vorschicht ursprünglich von der Schichtkante entfernt befindet, desto schwächer ist die Reaktion auf die angelegte Hochspannung und desto später erreicht dieser Vorschichtbereich seine endgültige Gleichgewichtsposition. Dieses Verhalten deckt sich mit experimentellen Meßergebnissen, wonach die Vorschicht sich noch in Expansion befindet, wenn die Schicht selbst bereits wieder zur Ruhe gekommen ist [Brutscher *et al.*, 1996; Günzel und Brutscher, 1996]. Abbildung 5.5 zeigt den zeitlichen Verlauf des Abstandes der verschiedenen Bereiche der Vorschicht (Isotachen mit $v < v_\mathrm{B}$) zur Schichtkante ($v = v_\mathrm{B}$). Es ist deutlich zu erkennen, wie durch die anfängliche Überschallexpansion der Schicht die dahinterliegende Vorschicht zunächst stark komprimiert wird, bevor diese ihrerseits von der Wand zurückweichen. Am Ende der Expansion erreicht die Vorschicht schließlich wieder beinahe ihre anfängliche Ausdehnung. Trotz der zeitweilig starken Kompression läßt sich die Vorschicht jedoch zu allen Zeiten genau eingrenzen.

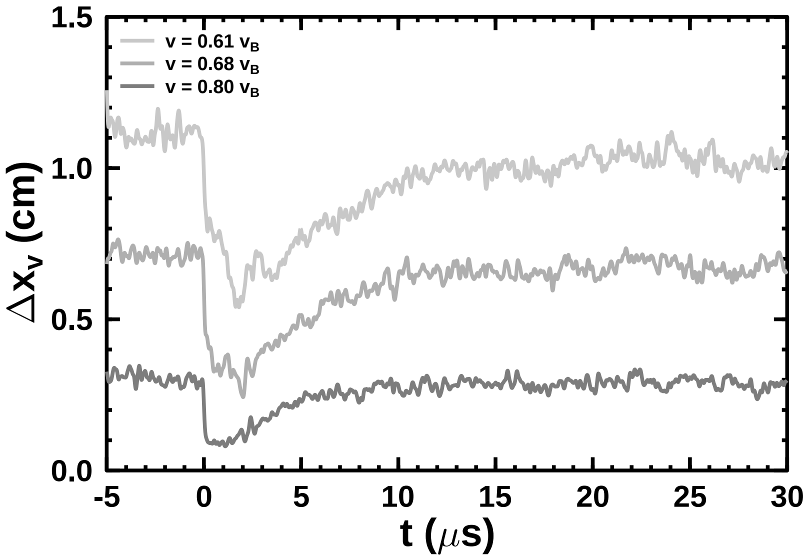

Abbildung 5.5: Zeitlicher Verlauf des Abstandes der verschiedenen Bereiche der Vorschicht (Isotachen mit $v < v_{\mathrm{B}}$) zur Schichtkante ($v = v_{\mathrm{B}}$).

Daneben beobachtet man ein zeitlich verzögertes Einsetzen der Vorschichtexpansion, je weiter man sich in der Vorschicht von der Schichtkante entfernt. Man kann zwar eine Zunahme des Rauschens in den weiter entfernten Isotachen ($v = 0.61\,v_{\mathrm{B}}$ und $0.68\,v_{\mathrm{B}}$) beobachten, das sofort mit Anlegen der Hochspannung ansteigt, die eigentliche Bewegung setzt jedoch deutlich später ein. Das verstärkte Rauschen hat seine Ursache in den Oszillationen der schlagartig von der Wand abgestossenen Elektronen. Wie man Abbildung 5.4 entnehmen kann, setzt die Bewegung der Isotache mit $v = 0.80\,v_{\mathrm{B}} = 3500\,\mathrm{m/s}$ nahezu ohne Verzögerung ein, während die Isotache mit $v = 0.68\,v_{\mathrm{B}} = 3000\,\mathrm{m/s}$ erst $2\,\mu$s nach Anlegen der Hochspannung durch Zurückweichen reagiert, die Isotache mit $v = 0.61\,v_{\mathrm{B}} = 2700\,\mathrm{m/s}$ sogar erst nach $3\,\mu$s. Dieses Verhalten zeigt sich auch in Abbildung 5.5 darin, daß es zunächst bei $t = 0$ zu einer starken Kompression der durch diese Isotachen beschriebenen Vorschichtbereiche kommt, die dann für die Dauer von etwa $2\,\mu$s bzw. $3\,\mu$s anhält, bevor eine Entspannung einsetzt.

Der Grund für die verzögerte Reaktion der Vorschicht und die Zunahme der Verzögerung mit wachsender Entfernung von der Wand liegt darin, daß sich die durch Einschalten der Hochspannung eingekoppelte Störung im Plasma in Form einer Schallwelle mit endlicher Geschwindigkeit, der Ionenschallgeschwindigkeit, ausbreitet [Allen und Andrews, 1970; Goldstone und Rutherford, 1995]. Der unmittelbar hinter der Schichtkante liegende Vorschichtbereich wird noch durch die sich anfangs mit Überschallgeschwindigkeit bewegende Schichtkante eingeholt. Dadurch setzt sich dieser Teil der Vorschicht nahezu verzögerungsfrei in Bewegung. Die weiter entfernt liegenden Regionen der Vorschicht werden dagegen nicht mehr direkt von der Schichtkante eingeholt, da deren Bewegung vorher in eine Unterschallbewegung übergeht und schließlich stoppt. Diese Regionen werden vielmehr von der sich ausbreitenden Ionenschallwelle über die geänderten Spannungsverhältnisse an der Wand informiert. Die Ionenschallgeschwindigkeit, die gleich der Bohmgeschwindigkeit ist, beträgt im vorliegenden Plasma $v_{\mathrm{Schall}} = v_{\mathrm{B}} = \sqrt{k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{i}}} = 4400\,\mathrm{m/s}$. Die betrachteten Vorschichtregionen befanden sich anfänglich 0.72 cm bzw. 1.10 cm von der Position der Schichtkante entfernt. Daher sollte die Welle erst nach $0.72\,\mathrm{cm}/4400\,\mathrm{m/s} \approx 1.6\,\mu\mathrm{s}$ bzw. $1.10\,\mathrm{cm}/4400\,\mathrm{m/s} \approx 2.5\,\mu\mathrm{s}$ dort eintreffen und Reaktionen verursachen. Diese Vorhersagen stimmen gut mit den beobachteten Verzögerungen überein.

5.4 Modell der retardierten Vorschichtreaktion

Um das Verhalten der Vorschichtreaktion auf die Schichtexpansion besser verstehen zu können, wurde ein Modell entwickelt, daß es erlaubt, aus der Reaktion der Schichtkante auf eine angelegte Hochspannung die Reaktion der dahinterliegenden Vorschicht beschreiben zu können. Diesem Modell liegt ein Ansatz von Mändl [Mändl, 1997] zugrunde, der jedoch in wesentlichen Teilen modifiziert wurde.

Zur Erläuterung des Modells ist in Abbildung 5.6 eine typische Dichteverteilung in einer Plasmarandschicht dargestellt. Die Position der Schichtkante zum Zeitpunkt t sei $x_{\mathrm{s}}(t)$, die Position eines beliebigen Teils der Vorschicht zum selben Zeitpunkt $x_{\mathrm{v}}(t)$. Dem

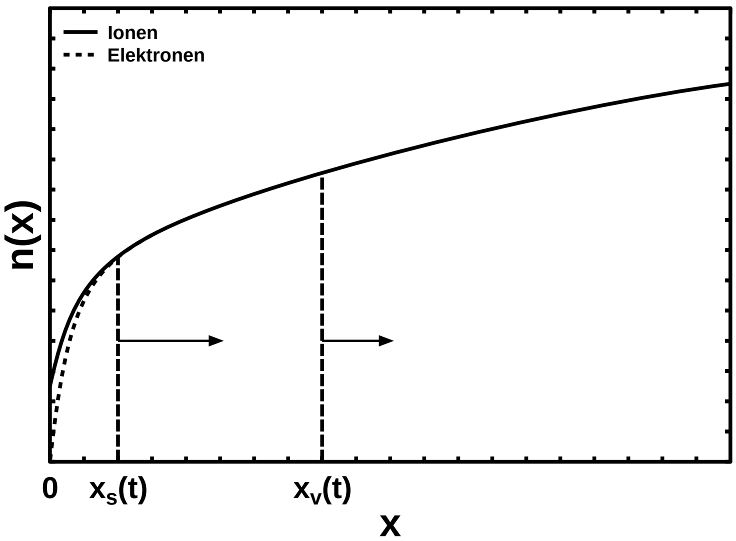

Abbildung 5.6: Dichteverteilungen in einer typischen Plasmarandschicht. $x_{\mathrm{s}}(t)$ stellt die Position der Schichtkante, $x_{\mathrm{v}}(t)$ eine Position innerhalb der Vorschicht zum Zeitpunkt t dar. Die Pfeile symbolisieren die augenblicklichen Geschwindigkeiten von Schicht und Vorschicht beim Zurückweichen von der linken Wand.

Modell liegt nun die Vorstellung zugrunde, daß im stationären Fall, also sowohl vor als auch lange nach Anlegen der Hochspannung bei $t = 0$, der Abstand $\Delta x_\mathrm{v}(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} x_\mathrm{v}(t) - x_\mathrm{s}(t)$ zwischen Vorschicht und Schichtkante gleich groß ist:

$$\Delta x_0 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Delta x_\mathrm{v}(0) = \lim_{t\to\infty} \Delta x_\mathrm{v}(t) \tag{5.1}$$

Weicht nun, infolge einer Expansion der Schicht, der Abstand $\Delta x_\mathrm{v}(t)$ vom Gleichgewichtsabstand Δx_0 ab, so reagiert die Vorschicht derart, daß sie diesen Gleichgewichtsabstand wieder herzustellen versucht, wobei die Stärke dieser Reaktion linear von der Abweichung $\Delta x_\mathrm{v}(t) - \Delta x_0$ abhängen soll. Bezeichnet man die Zeitskala, auf der diese Reaktion abläuft, mit τ, so läßt sich folgende Differentialgleichung aufstellen:

$$\frac{dx_\mathrm{v}(t)}{dt} = -\frac{\Delta x_\mathrm{v}(t) - \Delta x_0}{\tau} \tag{5.2}$$

Es wird angenommen, daß die Zeitkonstante τ dabei einen Wert in der Größenordnung $\Delta x_0 / v_\mathrm{B}$ hat. Nach etwas Umformung erhält man daraus die übliche Form einer inhomogenen linearen Differentialgleichung erster Ordnung:

$$\frac{dx_\mathrm{v}(t)}{dt} + \frac{x_\mathrm{v}(t)}{\tau} = \frac{x_\mathrm{s}(t) + \Delta x_0}{\tau} \tag{5.3}$$

Die eindeutige Lösung dieser Gleichung mit der Anfangsbedingung $x_\mathrm{v}(0) \stackrel{!}{=} x_\mathrm{s}(0) + \Delta x_0$ lautet [Walcher, 1990]

$$x_\mathrm{v}(t) = \Delta x_0 + x_\mathrm{s}(0) \cdot e^{-t/\tau} + \frac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot \int_0^t e^{\tilde{t}/\tau} x_\mathrm{s}(\tilde{t})\, d\tilde{t}. \tag{5.4}$$

Diese Lösung hat die Eigenschaft, daß die Vorschicht instantan auf die Bewegung der Schicht reagiert. Wie oben bereits beschrieben wurde, vergeht jedoch tatsächlich eine Zeitspanne von $T \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Delta x_0 / v_\mathrm{B}$, bevor die Ionenschallwelle die Vorschicht erreicht und dort eine Reaktion hervorruft. Für die Zeit vor dem Eintreffen der Welle am Ort $x = x_\mathrm{v}(0)$ zum Zeitpunkt $t = T$ soll die retardiert reagierende Vorschicht also in Ruhe verharren

$$x_\mathrm{v}^\mathrm{ret}(t)\Big|_{t \le T} \stackrel{\mathrm{def}}{=} x_\mathrm{v}(0). \tag{5.5}$$

Ab dem Zeitpunkt $t = T$ soll sie dagegen analog zur Lösung (5.4) reagieren, jedoch um die Zeitspanne T verschoben:

$$\begin{aligned} x_\mathrm{v}^\mathrm{ret}(t)\Big|_{t > T} &\stackrel{\mathrm{def}}{=} x_\mathrm{v}(t - T) \\ &= \Delta x_0 + x_\mathrm{s}(0) \cdot e^{-(t-T)/\tau} + \frac{1}{\tau} e^{-(t-T)/\tau} \cdot \int_0^{t-T} e^{\tilde{t}/\tau} x_\mathrm{s}(\tilde{t})\, d\tilde{t}. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Verbindet man die beiden Lösungen (5.5) und (5.6) mit Hilfe der Heaviside'schen Sprungfunktion

$$\Theta(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \begin{cases} 0\,, & t \le 0 \\ 1\,, & t > 0 \end{cases} \tag{5.7}$$

zu einer für alle Zeiten gültigen Lösung, so erhält man

$$x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)\Big|_{t\leq T} \cdot \Theta(T-t) + x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)\Big|_{t>T} \cdot \Theta(t-T). \tag{5.8}$$

Die Differentialgleichung, die durch Gleichung (5.8) gelöst wird, erhält man nach einer Ableitung von $x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)$ nach der Zeit t unter Berücksichtigung der Eigenschaften von $\Theta(t)$ sowie deren Ableitung, der Dirac'schen Deltafunktion $\delta(t)$ [Messiah, 1991]. Sie lautet:

$$\frac{d}{dt} x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t) = \frac{\Delta x_0 - [x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t) - x_{\mathrm{s}}(t-T)]}{\tau} \cdot \Theta(t-T) \tag{5.9}$$

Wie man sehr schön anhand dieser Gleichung erkennen kann, bleibt die Position der retardiert reagierenden Vorschicht $x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)$ für $t \leq T$ zunächst konstant ($\Theta(t-T) = 0$ für $t \leq T$). Danach spielt der Abstand zwischen augenblicklicher Vorschichtposition $x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)$ und der Position der Schicht $x_{\mathrm{s}}(t-T)$ zum früheren Zeitpunkt $t-T$ die entscheidende Rolle für die Bewegung der Vorschicht, ganz im Gegensatz zur früheren Gleichung (5.2), in die die Schichtposition ebenfalls zum aktuellen Zeitpunkt t einging.

5.5 Vergleich zwischen Simulation und Modell

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse aus der Simulation der Schicht- und Vorschichtexpansion mit den Vorhersagen des im vorigen Abschnitt entwickelten Modells der retardierten Vorschichtreaktion verglichen. Ausgehend von der simulierten Bewegung der Schichtkante $x_{\mathrm{s}}(t)$ (Isotache mit $v = v_B$) wurde mit Hilfe von Gleichung (5.8) die erwartete Bewegung $x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)$ derjenigen Vorschichtbereiche berechnet, die zu den Ionengeschwindigkeiten $v = 0.61\, v_{\mathrm{B}}$, $0.68\, v_{\mathrm{B}}$ und $0.80\, v_{\mathrm{B}}$ gehören. Die ursprüngliche Entfernung jedes dieser Bereiche von der Wand ($x_{\mathrm{v}}(0)$) sowie von der Schichtkante (Δx_0) sind Tabelle 5.1 zu entnehmen. Die Modell-Parameter τ und T wurden nun so gewählt, daß sich eine möglichst gute Übereinstimmung mit den simulierten Isotachentrajektorien ergibt. Die verwendeten Werte sind ebenfalls in Tabelle 5.1 zu sehen. Durch die Expansion verschiebt sich die Schichtkante von ihrer anfänglichen Position bei $x \approx 0.27\,\mathrm{cm}$ nach $x \approx 0.8\,\mathrm{cm}$ und passiert dabei die Vorschichtstelle, an der die Ionen vor Anlegen der Hochspannung die Geschwindigkeit $v = 0.80\, v_{\mathrm{B}}$ hatten. Aus diesem Grund wird dieser Bereich der Vorschicht

Tabelle 5.1: Angepaßte Modellparameter τ und T für jede der betrachteten Vorschichtisotachen.

$\frac{v}{v_{\mathrm{B}}}$	$x_{\mathrm{v}}(0)$ (cm)	Δx_0 (cm)	$\frac{\tau}{\Delta x_0 / v_{\mathrm{B}}}$	$\frac{T}{\Delta x_0 / v_{\mathrm{B}}}$
0.61	1.35	1.10	2.0	1.0
0.68	0.97	0.71	2.0	1.0
0.80	0.56	0.30	2.5	0.0

nahezu verzögerungsfrei in Bewegung versetzt ($T = 0$, siehe Tabelle 5.1). Die weiter entfernt liegenden Vorschichtbereiche werden dagegen nicht mehr direkt von der Schichtkante eingeholt, sondern erst nach Eintreffen der Ionenschallwelle zur Bewegung gebracht. Wie man der Tabelle entnehmen kann, hat die Verzögerungszeit T in diesen Fällen tatsächlich genau den Wert $\Delta x_0/v_\mathrm{B}$. Der Parameter τ, der die Stärke der Reaktion der Vorschicht auf die Schichtexpansion beschreibt, liegt in allen Fällen in der Größenordnung von 2.

Abbildung 5.7 zeigt zum Vergleich die simulierten zusammen mit den berechneten Isotachen. Wie man der Abbildung entnehmen kann, decken sich die berechneten Verläufe sehr gut mit den simulierten. Dadurch wird die Wahl der Parameter nach Tabelle 5.1 gerechtfertigt und das Modell der retardierten Vorschichtreaktion aus Abschnitt 5.4 bestätigt. Weiterhin wird auch die Annahme des Modells in guter Näherung bestätigt, wonach die Ausdehnung der Vorschicht im stationären Zustand nach Anlegen der Hochspannung mit der Ausdehnung zuvor übereinstimmt.

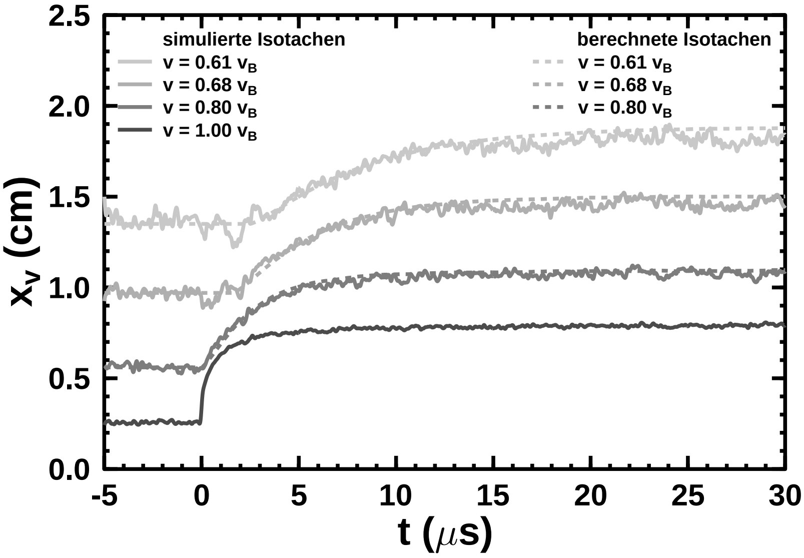

Abbildung 5.7: Vergleich zwischen simulierten Isotachen (durchgezogene Linien) und nach dem Modell der retardierten Vorschichtreaktion berechneten Isotachen (gestrichelte Linien).

5.6 Zusammenfassung

Es wurde ein Verfahren zur Simulation einer Plasmarandschicht unter Vernachlässigung des Plasmabulks entwickelt, daß es erlaubt, zeitaufgelöste Messungen der Schicht- und Vorschichtdynamik bei der PIII durchzuführen. Diese Messungen zeigen, daß die wandnahen Schichtbereiche anfänglich mit Überschallgeschwindigkeit von der hochspannungsführenden Wand zurückweichen und dabei tief in die dahinterliegenden Schicht- und Vorschichtbereiche eindringen. Nach kurzer Zeit geht die Expansion jedoch in eine Unterschallexpansion über. Durch Anlegen der Hochspannung breitet sich eine Schallwelle mit Ionenschallgeschwindigkeit in das Plasma hinein aus und erreicht mit deutlicher zeitlicher Verzögerung die weiter entfernt liegende Vorschichtbereiche. Erst nach Eintreffen der Welle beginnen diese Bereiche ebenfalls von der Wand zurückzuweichen, wobei die Stärke der Reaktion proportional zu $v_\mathrm{B}/\Delta x_0$ ist (Δx_0 ist die ursprüngliche Entfernung des betrachteten Vorschichtbereichs von der Schichtkante) und daher mit zunehmendem Abstand von der Wand immer schwächer wird. Am Ende der Expansion nimmt die Vorschicht, die zeitweilig stark komprimiert, aber immer vorhanden ist, schließlich wieder ihre ursprüngliche Ausdehnung an.

Kapitel 6

PIII bei verschiedenen Pulsfrequenzen und Pulslängen

6.1 Einleitung

Die Plasmaimmersions-Ionenimplantation bietet gegenüber dem Implantationsverfahren mit Ionenstrahlen einen weiteren, die Zerstäubung des behandelten Targets betreffenden, Vorteil. Jede Oberfläche wird durch den Beschuß mit hochenergetischen Ionen zerstäubt, indem die in das Target eintretenden Ionen eine Stoßkaskade auslösen, durch die die oberflächennahen Teilchen des Targets abgedampft werden. Diese Eigenschaft, die beispielsweise bei der Härtung einer Werkzeugoberfläche unerwünscht ist, kann durch das vorherige Aufbringen einer sogenannten Opferschicht auf die zu behandelnde Oberfläche dahingehend vermieden werden, daß nun nicht mehr das Targetmaterial selbst, sondern diese Schicht zerstäubt wird [Clapham und Whitton, 1992]. Die als Plasmaimmersions-Ionenimplantation und Deposition (PIIID) bezeichnete Form der PIII bietet einen eleganten Weg, diesen Prozeßschritt mit in das Verfahren einzubinden [Anders *et al.*, 1995; Anders, 2000]. Während in den vorangegangenen Untersuchungen in dieser Arbeit immer ein unendlich langer Hochspannungspuls an das Target angelegt wurde, benutzt man in der PIII üblicherweise eine Folge von periodisch aufeinanderfolgenden Hochspannungspulsen, zwischen denen das Potential am Target wieder auf das Floatingpotential des Plasmas zurückgeschaltet wird. In der Zeit zwischen den Pulsen kann sich das Plasma nun einerseits regenerieren, andererseits strömen dabei ständig niederenergetische Ionen auf die Oberfläche des Targets. Wenn es sich bei dem verwendeten Plasma beispielsweise um ein Metallplasma handelt, dann können diese Ionen auf der Oberfläche eine Schicht bilden, die dann für den nachfolgenden Hochspannungspuls die Opferschicht darstellt. Durch geeignete Wahl der Pausenlänge zwischen den Pulsen und der Pulsdauer selbst kann erreicht werden, daß in jedem Puls gerade die zuvor aufgebrachte Opferschicht wieder zerstäubt wird. Die sich unter der Opferschicht befindliche eigentliche Targetoberfläche bleibt dabei unversehrt und wird nur, wie gewünscht, durch die implantierten Ionen in ihrer Eigenschaft verändert.

In diesem Kapitel werden die Untersuchungen jetzt auf mehrfache Hochspannungspulse ausgedehnt, die in periodischer Folge an eine planare Wand angelegt werden. Zwischen den Hochspannungspulsen wird das Potential der planaren Wand auf das Floatingpotential des Plasmas zurückgeschaltet und das Plasma kann sich in dieser Phase erholen. Dazu wurden eine Vielzahl von eindimensionalen hybriden PIC/MC-Computersimulationen durchgeführt, mit denen die Eigenschaften des Ionenwandstroms in Abhängigkeit von der Dauer und der Frequenz der Pulse untersucht wird. Das dazu benutzte hybride PIC/MC-Simulationsverfahren wird in Anhang C ausführlich beschrieben.

6.2 Parameter in den Simulationen

Als Ausgangspunkt aller Simulationen diente wieder die Floatingpotential-Randschicht eines Argon-Plasmas mit der Dichte $n_\mathrm{p} = 2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ und der Elektronentemperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$, die durch einen Ionensättigungsstrom von $9.86\,\mathrm{A/m}^2$ aus dem Plasma gespeist wird. Die Modellierung dieser Randschicht wird zusammen mit den übrigen Plasmaparametern ausführlich in Abschnitt 2.2 beschrieben. Die an die Wand angelegten Hochspannungspulse hatten stets die Größe $-1000\,\mathrm{V}$, zwischen den Pulsen lag dagegen das Floatingpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ an. Die angegebenen Spannungen beziehen sich dabei auf das Potential im Plasmainneren. Die verwendeten Pulslängen τ_Puls lagen zwischen $1\,\mu\mathrm{s}$ und $18\,\mu\mathrm{s}$ und damit in einem für die PIII üblichen Bereich [Anders, 2000]. Der Duty-Cycle $D \stackrel{\mathrm{def}}{=} \tau_\mathrm{Puls}/T_\mathrm{Puls}$, der das Verhältnis zwischen der Pulslänge τ_Puls und der Periodendauer der Pulse $T_\mathrm{Puls} = \tau_\mathrm{Puls} + \tau_\mathrm{Pause}$ angibt, bewegte sich zwischen 0.1 und 0.95. Dementsprechend lag die Pulsfrequenz $\nu_\mathrm{Puls} \stackrel{\mathrm{def}}{=} 1/T_\mathrm{Puls}$ zwischen 10 kHz und beinahe 1 GHz, je nach verwendeter Pulslänge. Abbildung 6.1 zeigt in schematischer Weise die zeitliche Abhängigkeit des Wandpotentials Φ_Wand und die Bedeutung der Timingparameter τ_Puls, τ_Pause und T_Puls.

6.3 Verhalten des Plasmas beim periodischen Anlegen von Pulsen

In den bisherigen Simulationen wurde nur das Verhalten des Plasmas beim Anlegen der negativen Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ an die Wand untersucht. Der Abschaltvorgang, bei dem die Wandspannung zurück auf das Floatingpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ gesetzt wird, wurde dagegen noch nicht betrachtet. Dieser Vorgang soll jetzt mit in die Untersuchungen einbezogen werden, da er für das Verhalten des Plasmas beim periodischen Anlegen von Hochspannungspulsen eine wichtige Rolle spielt.

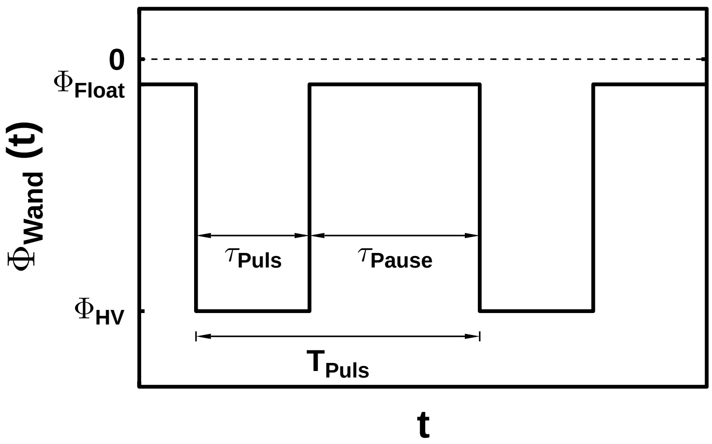

Abbildung 6.1: Schematische Darstellung der zeitlichen Abhängigkeit des Wandpotentials Φ_{Wand} und der Bedeutung der Timingparameter τ_{Puls}, τ_{Pause} und T_{Puls}. Φ_{HV} stellt die Hochspannung dar, die während der Pulse anliegt.

In Kapitel 5 wurde gezeigt, daß sich die Reaktion der Plasmaschicht und -vorschicht anhand der Bewegung verschiedener Isotachen der Ionengeschwindigkeit analysieren läßt. Dazu werden die Positionen x_{v} bestimmt, an denen die Ionen ganz bestimmte Driftgeschwindigkeiten v besitzen und die Bewegung dieser Positionen beobachtet. Nach dem Bohmkriterium erreichen die Ionen der Masse m_{i} nach ihrer Beschleunigung in der Vorschicht an der Schichtkante die Bohmgeschwindigkeit $v_{\mathrm{B}} = (k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{i}})^{1/2}$. Daher wird im folgenden die Isotache zu der Geschwindigkeit $v = v_{\mathrm{B}}$ als die Trajektorie der Schichtkante interpretiert. Dementsprechend kann die Vorschichtdynamik durch Beobachtung der Isotachen mit Geschwindigkeiten $v < v_{\mathrm{B}}$ analysiert werden, weil die Ionen innerhalb der Vorschicht langsamer als mit Bohmgeschwindigkeit in Richtung Wand driften. Die Isotachen der Ionengeschwindigkeit werden auch bei den vorliegenden Untersuchungen benutzt, um die Dynamik des Plasmas aufzuzeichnen. Als Ausgangszustand in den Simulationen, deren Resultate in diesem Kapitel vorgestellt werden, diente stets die Floatingpotential-Randschicht aus Kapitel 2.

6.3.1 Pulsdauer $10\,\mu$s mit Pulsfrequenz $25\,$kHz

Zunächst einmal wird gezeigt, wie sich das Plasma bei Anlegen von relativ langen Pulsen der Dauer $\tau_{\mathrm{Puls}} = 10\,\mu$s mit einer niedrigen Frequenz von $\nu_{\mathrm{Puls}} = 25\,$kHz verhält. Die Pulse wiederholen sich bei dieser Frequenz alle $T_{\mathrm{Puls}} = 1/\nu_{\mathrm{Puls}} = 40\,\mu$s. Der Duty-Cycle $D = \tau_{\mathrm{Puls}}/T_{\mathrm{Puls}} = 0.25$ gibt dabei den zeitlichen Anteil an einer Periodendauer an, während dem der Hochspannungspuls eingeschaltet ist. Für die restliche Zeit von $(1-D)T_{\mathrm{Puls}}$ liegt an der Wand dagegen nur das Floatingpotential an. Abbildung 6.2 zeigt nun den zeitlichen Verlauf des Ionenimplantationsstroms, der mittleren Implantationsenergie der Ionen und die Bewegung der Isotachen, wenn zum Zeitpunkt $t = 0$ der erste Puls angelegt wird. Der Ionenstrom sowie die mittlere Ionenenergie zeigen mit Einsetzen des ersten Hochspannungspulses das gleiche Verhalten, wie es bereits in Abschnitt 4.4 festgestellt wurde: Der Ionenstrom erreicht innerhalb einer Zeit von etwa 60 ns sein Maximum von über 62 A/m^2 und fällt anschließend innerhalb von 2 μs wieder auf den Sättigungsstrom ab, der im Mittel ungefähr 10 A/m^2 beträgt. Die mittlere Ionenenergie beim Auftreffen auf die Wand erreicht nach etwa 2 μs ihren vollen Betrag von 1000 eV. Anhand der Trajektorien der Isotachen aus Abbildung 6.2 c) erkennt man wieder die in Kapitel 5 ausführlich diskutierte verzögerte Reaktion der Vorschicht auf das Anlegen der Hochspannung. Besonders deutlich läßt sich die Verzögerung an der Isotache zu der Geschwindigkeit $v = 0.61 v_B$ beobachten, die zu einem Bereich der Vorschicht gehört, der sich weit von der Wand entfernt befindet. Die Ionenschallwelle, die sich durch Einschalten der Hochspannung mit der Bohmgeschwindigkeit $v_B = 4400$ m/s von der Wand ins Plasma hinein ausbreitet, erreicht diesen Vorschichtbereich erst nach etwa $3 - 4\,\mu$s. Mit zunehmender Entfernung von der Wand nimmt auch die Heftigkeit der Vorschichtreaktion auf die geänderten Spannungsverhältnisse ab, wie sich anhand der unterschiedlichen Steigungen der Isotachen feststellen läßt. Am Ende des ersten Pulses, bei $t = 10\,\mu$s, hat die Schichtkante (Isotache mit $v = v_B$) längst ihre neue Gleichgewichtsposition bei $x = 0.8$ cm eingenommen, während die Isotache zu $v = 0.61 v_B$ gerade erst eine leichte Verlangsamung erkennen läst.

Wie Abbildung 6.2 a) zeigt, bricht der Ionenwandstrom nach dem Abschalten der Hochspannung bei $t = 10\,\mu$s zunächst zusammen, erreicht dann aber nach etwa 2 μs wieder seinen Sättigungswert von etwa 10 A/m^2. Dieser Einbruch kommt dadurch zustande, daß zunächst die schnellen Ionen, die zuvor noch in der Hochspannungsschicht beschleunigt wurden, innerhalb kurzer Zeit aus dem Plasma verschwinden. Die Zeitspanne dafür stimmt in der Größenordnung mit der Flugzeit t_f eines Ions durch eine Child-Langmuir-Schicht der Dicke d_{CL} und mit dem Potentialgefälle $\Delta\Phi$ überein, die durch die Beziehung

$$\begin{aligned} \omega_{p,i} \cdot t_f &= 3 d_{CL}/s_0 \\ t_f &= d_{CL} \cdot \left(\frac{9 m_i}{2 e \Delta\Phi}\right)^{1/2} \end{aligned} \tag{6.1}$$

beschrieben wird [Birdsall und Bridges, 1966; Lieberman, 1989]. Darin hat $\omega_{p,i} \stackrel{\text{def}}{=} (n_p e^2/\epsilon_0 m_i)^{1/2}$ die Bedeutung der Ionenplasmafrequenz und $s_0 \stackrel{\text{def}}{=} (2\epsilon_0 \Delta\Phi/n_p e)^{1/2}$ stellt die Dicke der Matrixschicht dar. Im vorliegenden Fall entspricht d_{CL} der Schichtdicke von etwa 8 mm bei Anliegen des Potentialunterschieds von $\Delta\Phi = 1000$ V zwischen dem Plasma und der Wand. Mit diesen Werten beträgt die Ionenflugzeit zwischen der Schichtkante und der Wand etwa $t_f = 0.3\,\mu$s. Die mittlere Energie, mit der die Ionen auf die Wand treffen, fällt durch das Verschwinden der hochenergetischen Ionen ebenfalls innerhalb kurzer Zeit auf den neuen Wert von 40 eV ab, der nach spätestens 1 μs erreicht wird (Abbildung 6.2 b)).

Unmittelbar nach dem Abschalten der Hochspannung kehren die Elektronen in einer Zeit auf der Skala der inversen Elektronenplasmafrequenz $\omega_{p,e}{}^{-1} = (\epsilon_0 m_e/n_p e^2)^{1/2} = 0.13$ ns wieder in den Bereich der Hochspannungsschicht zurück, aus dem sie zuvor vollkommen verdrängt waren. Sie kompensieren dort die vorhandene Raumladung der Ionen.

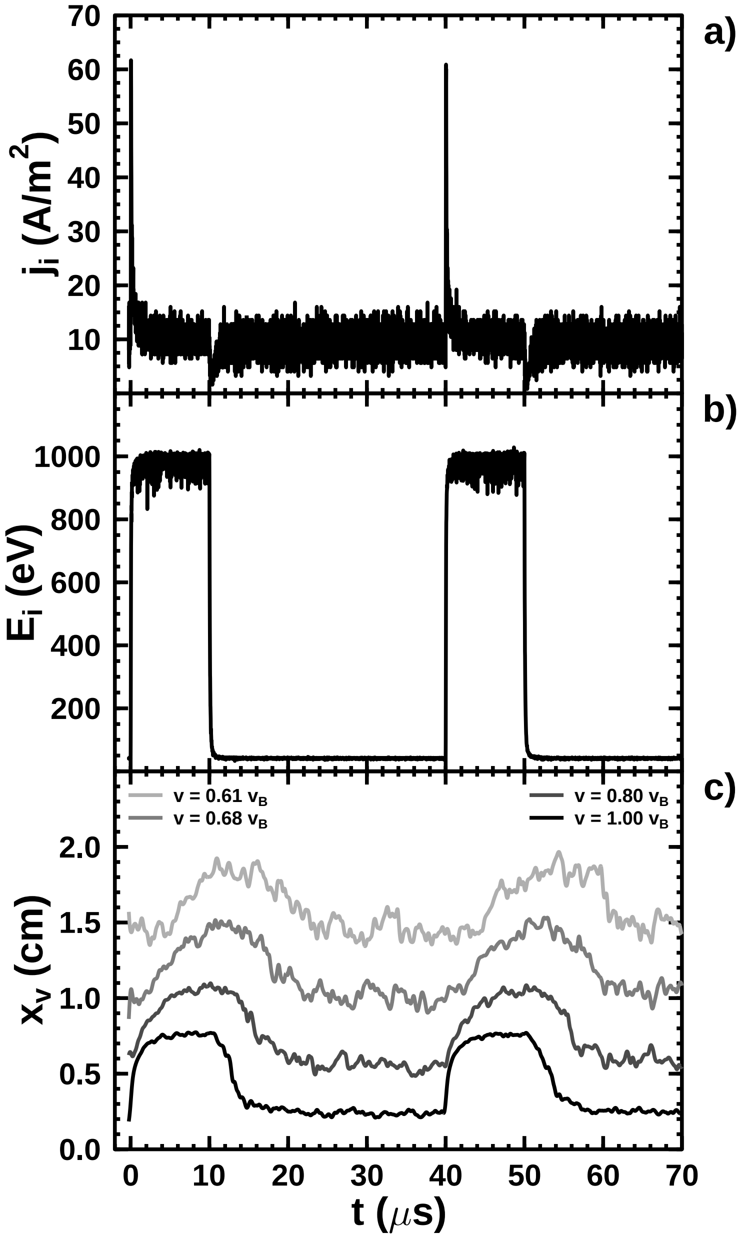

Abbildung 6.2: Zeitlicher Verlauf a) des Ionenimplantationsstroms, b) der mittleren Ionenimplantationsenergie und c) der Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit nach Anlegen einer gepulsten Hochspannung ab dem Zeitpunkt $t = 0$ mit der Pulsdauer $\tau_{\text{Puls}} = 10\,\mu\text{s}$ und der Frequenz $\nu_{\text{Puls}} = 25\,\text{kHz}$ (Duty-Cycle $\tau_{\text{Puls}} \cdot \nu_{\text{Puls}} = 0.25$).

Dieses Verhalten läßt sich in Abbildung 6.3 sehr gut erkennen, wo die zeitliche Entwicklung der Ionen- und Elektronendichte nach Abschalten der Hochspannung durch verschiedene Momentaufnahmen dokumentiert ist. Bereits nach 1 ns sind die Elektronen wieder im Be-

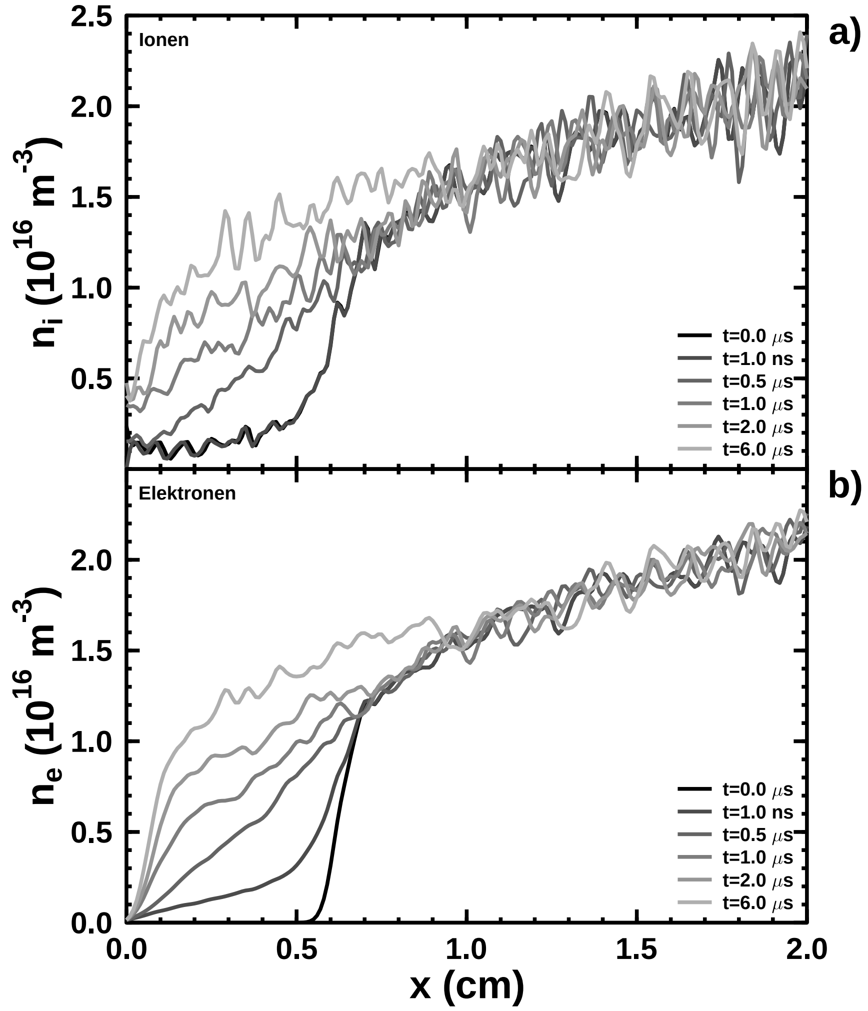

Abbildung 6.3: Zeitliche Entwicklung a) der Ionendichte und b) der Elektronendichte während der ersten $6\,\mu$s nach Abschalten der Hochspannung zum Zeitpunkt $t = 0$.

reich zwischen $x = 0$ und $x = 0.5\,$cm zu finden. Dadurch entsteht vor der Wand für kurze Zeit ein quasineutrales Plasma. Da das Plasma im Bereich der früheren Hochspannungsrandschicht jetzt aber ein großes Dichtegefälle aufweist, setzt augenblicklich ambipolare Diffusion der Plasmateilchen ein, um den Dichtegradienten abzubauen. Die ambipolare Diffusion wird jedoch in ihrer Effektivität durch den vorhandenen Potentialunterschied von nun $\Delta\Phi = 40.285\,$V zwischen dem Plasmainneren und der Wand gehemmt. Das hat zur Folge, daß die Diffusionsmöglichkeit der Elektronen stark eingeschränkt wird und dadurch insgesamt die ambipolare Diffusion abnimmt. Da jedoch aus dem Plasmainneren ständig neue Ionen mit einer Sättigungsstromdichte von $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ in die Randschicht strömen, kann das vorhandene Dichtegefälle schließlich doch abgebaut werden.

Die Größenordnung der Zeit, in der die Randschicht wieder ihren Gleichgewichtszustand erreicht, läßt sich anhand eines einfachen Modells abschätzen. Es handelt sich dabei um die Modifizerung eines Ansatzes von Wood [Wood, 1993], die der Tatsache Rechnung trägt, daß aufgrund des Potentialunterschieds von 40.285 V hier weniger die ambipolare Diffusion für die Relaxation der Randschicht sorgt. Vielmehr ist der aus dem Plasma kommende Sättigungsstrom der Ionen, die an der Schichtkante mit der Bohmgeschwindigkeit v_B in die Randschicht eintreten, maßgeblich. Diese Ansicht stimmt auch mit den Beobachtungen von En *et al.* in Experimenten und Simulationen überein [En und Cheung, 1994; En *et al.*, 1995]. Abbildung 6.4 zeigt zur Verdeutlichung dieses Modells die idealisierte Darstellung einer relaxierenden Plasmarandschicht. In diesem Modell wird angenommen, daß der Bereich der früheren Hochspannungsrandschicht zwischen $x = 0$ und $x = s$ zu Beginn der Relaxation völlig entleert ist und daß die Plasmadichte an der Schichtkante $x = s$ sprunghaft auf den Wert n_p im Inneren zunimmt. Aus dem Plasma strömt nun ständig der Ionensättigungsstrom $j_\mathrm{i} = en_\mathrm{p}v_\mathrm{B}$ in die Randschicht ein. Darin stellt v_B die Bohmgeschwindigkeit dar, die die Ionen an der Schichtkante erreichen. Durch diesen Strom kommt es zu einem Anstieg der Ionendichte n_s im Bereich der Randschicht, die dort als homogen verteilt angenommen wird. Die Ionen bleiben jedoch nicht dauerhaft in der Randschicht, sondern ein Teil von ihnen geht als Ionenwandstrom j_w, der proportional zur augenblicklichen Dichte $n_\mathrm{s}(t)$ ist, wieder verloren. Dabei wird die Beschleunigung der Ionen in dem Potentialgefälle von 40.285 V vernachlässigt und angenommen, daß die Ionen mit der Bohmgeschwindigkeit auf die Wand treffen: $j_\mathrm{w}(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} en_\mathrm{s}(t)v_\mathrm{B}$. Die zeitliche Entwicklung der Dichte $n_\mathrm{s}(t)$ ergibt sich dann aus der Bilanzgleichung zwischen ein- und

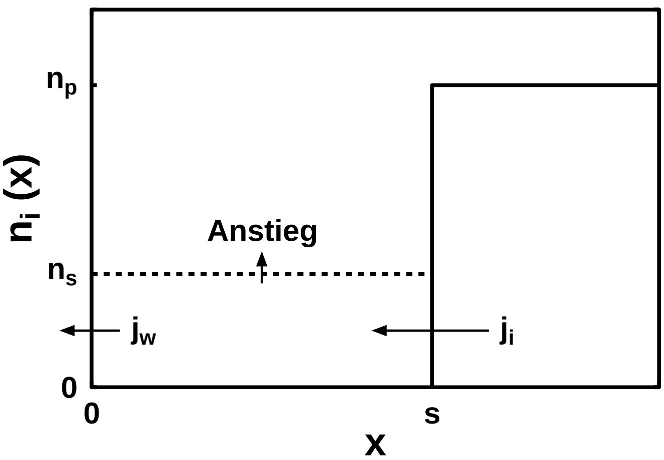

Abbildung 6.4: Idealisierte Darstellung einer relaxierenden Plasmarandschicht, deren Schichtkante bei Anliegen der negativen Hochspannung bei $x = s$ lag: Aus dem Inneren des Plasmas der Dichte n_p strömt der Ionensättigungsstrom j_i in die entleerte Schicht zwischen $x = 0$ und $x = s$. Dadurch steigt die Plasmadichte $n_\mathrm{s}(t)$ mit der Zeit an. Gleichzeitig geht jedoch ein Teil der Ionen wieder als Wandstrom $j_\mathrm{w} \propto n_\mathrm{s}(t)$ verloren.

auslaufendem Strom in dem Bereich der Länge s:

$$
\begin{aligned}
es\frac{dn_\mathrm{s}}{dt} &= j_\mathrm{i} - j_\mathrm{w}(t) \\
\frac{dn_\mathrm{s}}{dt} &= [n_\mathrm{p} - n_\mathrm{s}(t)]\frac{v_\mathrm{B}}{s}.
\end{aligned}
\tag{6.2}
$$

Die Lösung dieser Differentialgleichung mit der Anfangsbedingung $n_\mathrm{s}(0) \overset{!}{=} 0$ lautet

$$
n_\mathrm{s}(t) = n_\mathrm{p}\left(1 - e^{-\gamma t}\right) \text{ mit } \gamma \overset{\mathrm{def}}{=} v_\mathrm{B}/s. \tag{6.3}
$$

Danach vergeht die Zeit $t_{95\%} = 3/\gamma = 3s/v_\mathrm{B}$, bis die anfangs völlig entleerte Randschicht wieder bis zur Dichte $0.95 \cdot n_\mathrm{p}$ aufgefüllt wird und damit als relaxiert gelten kann. Verwendet man im vorliegenden Fall für die Randschichtdicke s den Wert 8 mm und benutzt man $v_\mathrm{B} = 4400$ m/s für die Bohmgeschwindigkeit, dann sollte es diesem einfachen Modell nach etwa $t_{95\%} = 5.5\,\mu$s dauern, bis die Relaxation vollzogen ist. Ein Vergleich mit Abbildung 6.3 zeigt, daß sich nach dieser Zeit tatsächlich wieder eine Plasmarandschicht entwickelt hat, wie sie typisch für den Gleichgewichtszustand bei Anliegen des Floatingpotentials ist (siehe Abschnitt 2.2.1). Diese Übereinstimmung rechtfertigt nun auch die Modellannahme, daß die Relaxation im wesentlichen durch die mit der Bohmgeschwindigkeit an der Schichtkante einströmenden Ionen bestimmt wird.

Die Bewegung der Isotachen eignet sich auch gut dazu, die Reaktion des Plasmas auf das Abschalten der Wandspannung von -1000 V nachzuvollziehen. Wie Abbildung 6.2 c) zeigt, beginnt die Schichtkante ($v = v_\mathrm{B}$) mit einer kurzen Verzögerung von höchstens $1\,\mu$s in ihre Position vor dem Hochspannungspuls zurückzukehren, die sie nach insgesamt $6 - 8\,\mu$s erreicht. Diese Zeit stimmt in der Größenordnung gut mit der nach dem Modell berechneten Relaxationszeit von $t_{95\%} = 5.5\,\mu$s überein. Die Reaktion der Vorschicht setzt dagegen erst deutlich später ein. Die Verzögerung nimmt dabei wieder mit zunehmendem Abstand von der Wand (abnehmende Driftgeschwindigkeit v) zu, während gleichzeitig die Relaxationsgeschwindigkeit abnimmt. Die Bewegung der Isotache mit $v = 0.61v_\mathrm{B}$ beginnt erst $6\,\mu$s nach Abschalten der Hochspannung und erreicht insgesamt nach etwa $14\,\mu$s ihre neue Gleichgewichtsposition. Damit gelangen die Schicht und die Vorschicht wieder in einen Zustand, der dem vor Anlegen des ersten Pulses entspricht. Zu Beginn des zweiten Pulses bei $t = 40\,\mu$s liegen daher die gleichen physikalischen Verhältnisse vor wie am Anfang des ersten Pulses. Daher sollten sich mit Einsetzen des zweiten Pulses alle geschilderten Vorgänge wiederholen, was sich auch in den Kurvenverläufen von Abbildung 6.2 ausdrückt.

6.3.2 Pulsdauer $10\,\mu$s mit Pulsfrequenz $75\,$kHz

Es wird nun untersucht, wie sich die Reaktion des Plasmas verändert, wenn bei der gleichen Pulsdauer von $10\,\mu$s die Pulsfrequenz auf $75\,$kHz erhöht wird. Dadurch verkürzt sich die Periodendauer auf $T_{\text{Puls}} = 1/\nu_{\text{Puls}} = 13.33\,\mu$s und der Duty-Cycle beträgt dann $D = \tau_{\text{Puls}}/T_{\text{Puls}} = 0.75$. Innerhalb einer Periode ist der Puls also nur noch für die Dauer von $(1-D)T_{\text{Puls}} = 3.33\,\mu$s ausgeschaltet. Diese Zeit ist deutlich kürzer als die im vorigen Abschnitt genannten Zeiten von $6-8\,\mu$s bzw. $14\,\mu$s für die Relaxation der Schichtkante bzw. der weiter entfernt liegenden Vorschichtbereiche. Daher wird man erwarten, daß sich das Plasma zwischen den Pulsen nicht mehr ganz erholen kann, was eine Änderung im Verlauf des Implantationsstroms und der Isotachen zur Folge hat. Dies wird durch die Diagramme in Abbildung 6.5 bestätigt, wo der Ionenimplantationsstrom, die mittlere Energie der Ionen beim Auftreffen auf die Wand sowie die Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Zeit dargestellt sind. Für die Dauer des ersten Hochspannungspulses von $t = 0$ bis $t = 10\,\mu$s zeigen alle Kurven erwartungsgemäß zunächst exakt die gleichen Verläufe wie in Abbildung 6.2. In der sich anschließenden Zeit bis $t = 13.33\,\mu$s, in der der Puls ausgeschaltet ist, kommt es zur ebenfalls schon gewohnten Relaxation der Schicht und Vorschicht. Dann setzt jedoch bereits der zweite Hochspannungspuls ein und sorgt für ein Ende der Relaxationsphase. Wie Abbildung 6.5 c) zeigt, wird die Schichtkante (Isotache mit $v = v_{\text{B}}$), die sich gerade erst wieder bis auf $4.5\,$mm auf die Wand zubewegt hat, erneut von dieser weggetrieben. Die weiter entfernt liegenden Bereiche der Vorschicht ($v < v_{\text{B}}$), deren Relaxation sich deutlich langsamer abspielt, schaffen es dagegen kaum noch, sich vor Einsetzen des zweiten Pulses wieder merklich in Richtung Wand zu bewegen. Die Relaxation des entferntesten Vorschichtbereichs ($v = 0.61 v_{\text{B}}$) hat noch nicht einmal begonnen, als schon der zweite Puls eingeschaltet wird. Da sich jedoch die Information über die Spannungsänderung an der Wand nur mit der Ionenschallgeschwindigkeit von $v_{\text{B}} = 4400\,$m/s durch das Plasma bewegt, haben auch diese Vorschichtbereiche noch ein wenig Zeit zur Relaxation. Insgesamt verharren jedoch alle Vorschicht-Isotachen in einer jeweils mittleren Entfernung von der Wand, um die herum sie höchstens leichte Oszillationen ausführen. Nur die Schichtkante selbst zeigt noch eine gut sichtbare Reaktion auf die periodischen Potentialwechsel der Wand. Für eine vollständige Relaxation zwischen den Pulsen reicht die Zeit aber auch hier nicht mehr aus.

Wenn man von der Verkürzung der Pausen zwischen den Pulsen absieht, ändert sich der zeitliche Verlauf der mittleren Ionenenergie nicht (Abbildung 6.5 b)). Da die Ionen zum Durchlaufen der Hochspannungsschicht nur eine Zeit von etwa $0.3\,\mu$s brauchen, kommt es nach dem Abschalten der Hochspannung auf derselben Zeitskala zu einer Anpassung der mittleren Ionenenergie. Die zeitliche Abhängigkeit des Implantationsstrom in Abbildung 6.5 a) offenbart dagegen eine Tatsache, die schon im Zusammenhang mit den Isotachen diskutiert wurde: Das Plasma hat zwischen den Pulsen nicht mehr ausreichend Zeit, um vollständig zu relaxieren. Dadurch kann der Bereich der Hochspannungsschicht, der unmittelbar nach dem Abschalten des ersten Pulses eine Plasmaverarmungsregion darstellt, nicht mehr durch die einsetzende ambipolare Diffusion vom Plasmabulk her aufgefüllt

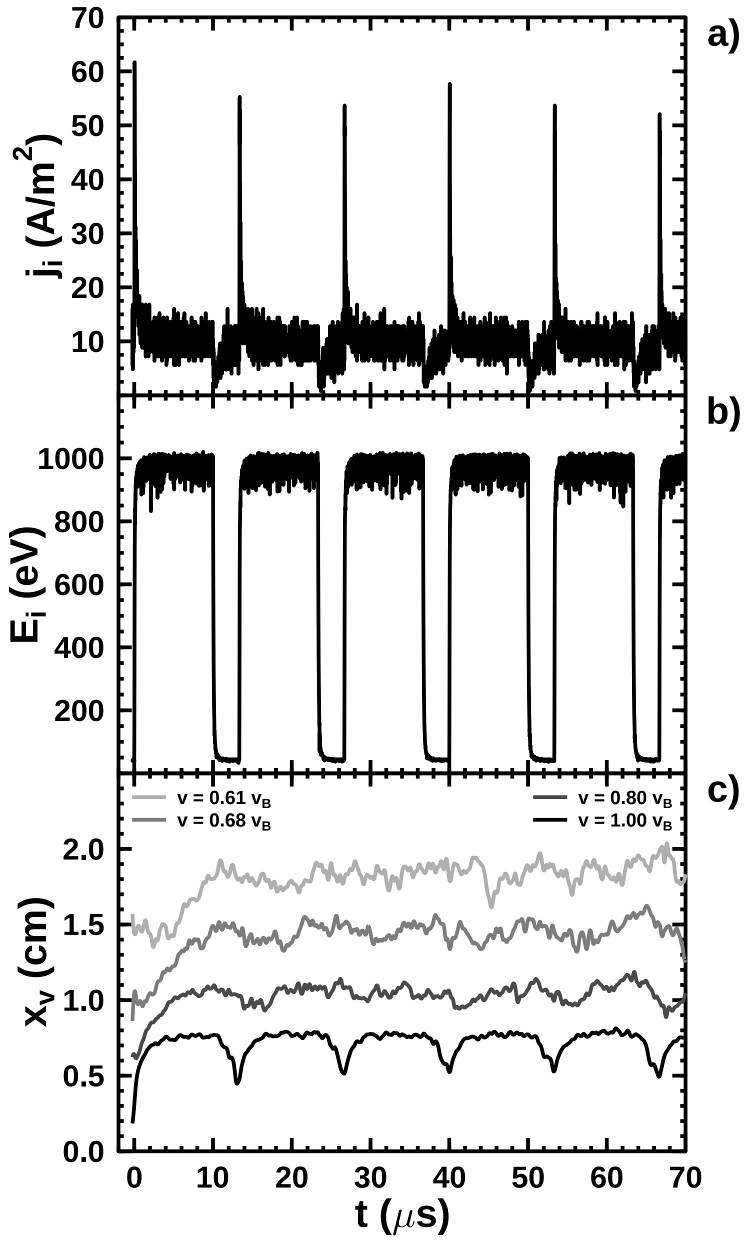

Abbildung 6.5: Zeitlicher Verlauf a) des Ionenimplantationsstroms, b) der mittleren Ionenimplantationsenergie und c) der Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit nach Anlegen einer gepulsten Hochspannung ab dem Zeitpunkt $t = 0$ mit der Pulsdauer $\tau_{\mathrm{Puls}} = 10\,\mu$s und der Frequenz $\nu_{\mathrm{Puls}} = 75$ kHz (Duty-Cycle $\tau_{\mathrm{Puls}} \cdot \nu_{\mathrm{Puls}} = 0.75$).

werden. Als Folge davon ist die Plasmadichte in der Nähe der Wand beim Einsetzen des zweiten Pulses deutlich geringer als noch vor dem ersten Puls. Dadurch erreicht die Stromspitze des zweiten Pulses auch nicht mehr die volle Höhe des ersten Pulses. Diese Vorgänge wiederholen sich auch in den nachfolgenden Pulsen, bis das Plasma im gepulsten Betrieb ein neues Gleichgewicht eingenommen hat. Dadurch stellt sich ein neuer Mittelwert der Strommaxima von etwa $54\,\mathrm{A/m^2}$ ein, was gegenüber der Simulation mit $\nu_{\mathrm{Puls}} = 25\,\mathrm{kHz}$ einer Abnahme um beinahe 13% entspricht.

6.3.3 Pulsdauer $10\,\mu\mathrm{s}$ mit Pulsfrequenz $90\,\mathrm{kHz}$

In diesem Abschnitt soll schließlich noch gezeigt werden, in welcher Form sich die im vorigen Abschnitt bereits angedeuteten Veränderungen bei der PIII weiterentwickeln, wenn die Pulsfrequenz noch weiter bis auf 90 kHz gesteigert wird. Die Periodendauer beträgt dann nur noch $T_{\mathrm{Puls}} = 11.11\,\mu\mathrm{s}$, was einem Duty-Cycle von $D = \tau_{\mathrm{Puls}}/T_{\mathrm{Puls}} = 0.9$ entspricht. Die Zeit zwischen den Pulsen sinkt auf $(1 - D)T_{\mathrm{Puls}} = 1.11\,\mu\mathrm{s}$, wodurch dem Plasma zwischen den Pulsen noch weniger Zeit zur Regeneration zur Verfügung steht. Abbildung 6.6 zeigt in gewohnter Weise den Implantationsstrom, die Implantationsenergie sowie die Isotachen der Driftgeschwindigkeit der Ionen, wie sie sich aus der Simulation ergeben. Wie man in Abbildung 6.6 b) sieht, reicht die kurze Zeit zwischen den Pulsen gerade noch für ein Abklingen der mittleren Ionenimplantationsenergie auf den Floatingpotential-Wert von 40 eV aus, da dieser Vorgang sich auf der Zeitskala von nur $0.3\,\mu\mathrm{s}$ abspielt. Wie die Isotachen in Abbildung 6.6 c) zeigen, verharrt nun auch die Schichtkante ($v = v_{\mathrm{B}}$) trägheitsbedingt nach dem ersten Puls in einer festen Entfernung von der Wand. Gegenüber den Isotachenkurven aus der Simulation mit $\nu_{\mathrm{Puls}} = 75\,\mathrm{kHz}$ zeichnen sich die Kurven jetzt durch noch glattere Verläufe aus. Lediglich die Schichtkante läßt noch ansatzweise eine Bewegung infolge des wechselnden Wandpotentials erkennen, die aber nur noch schwach ausgeprägt ist. Die Plasmadichte in Wandnähe wird wegen der nochmals geringeren Relaxationsmöglichkeit des Plasmas zwischen den Pulsen noch weiter entleert. Das drückt sich besonders in der Abnahme des Mittelwerts der Strommaxima auf etwa $39\,\mathrm{A/m^2}$ aus, was einer Reduktion um 37% gegenüber dem ersten Puls entspricht.

Die bisher vorgestellten Simulationsergebnisse stimmen qualitativ mit den Ergebnissen von Wood [Wood, 1993] überein. Dieser hat ebenfalls unter Verwendung der PIC-Methode eine Abnahme der Strommaxima unter dem Einfluß hochfrequenter Hochspannungspulse beobachtet. Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit gehen jedoch über die von Wood hinaus. Während Wood als Ausgangszustand ein Plasma verwendet hat, das bis zum Target völlig homogenen ist und in dem die Ionen driftfrei ruhten, wurde hier eine Gleichgewichtsrandschicht bei Anliegen des Floatingpotentials verwendet, aus der ständig ein Ionensättigungsstrom auf die Wand floß. Darüber hinaus wurde mit den Simulationen in der vorliegenden Arbeit der Übergang von niedrigen Pulsfrequenzen, bei denen sich das Plasma noch vollständig regenerieren kann, zu hohen Frequenzen, bei denen diese Erholung nicht mehr möglich ist, dokumentiert.

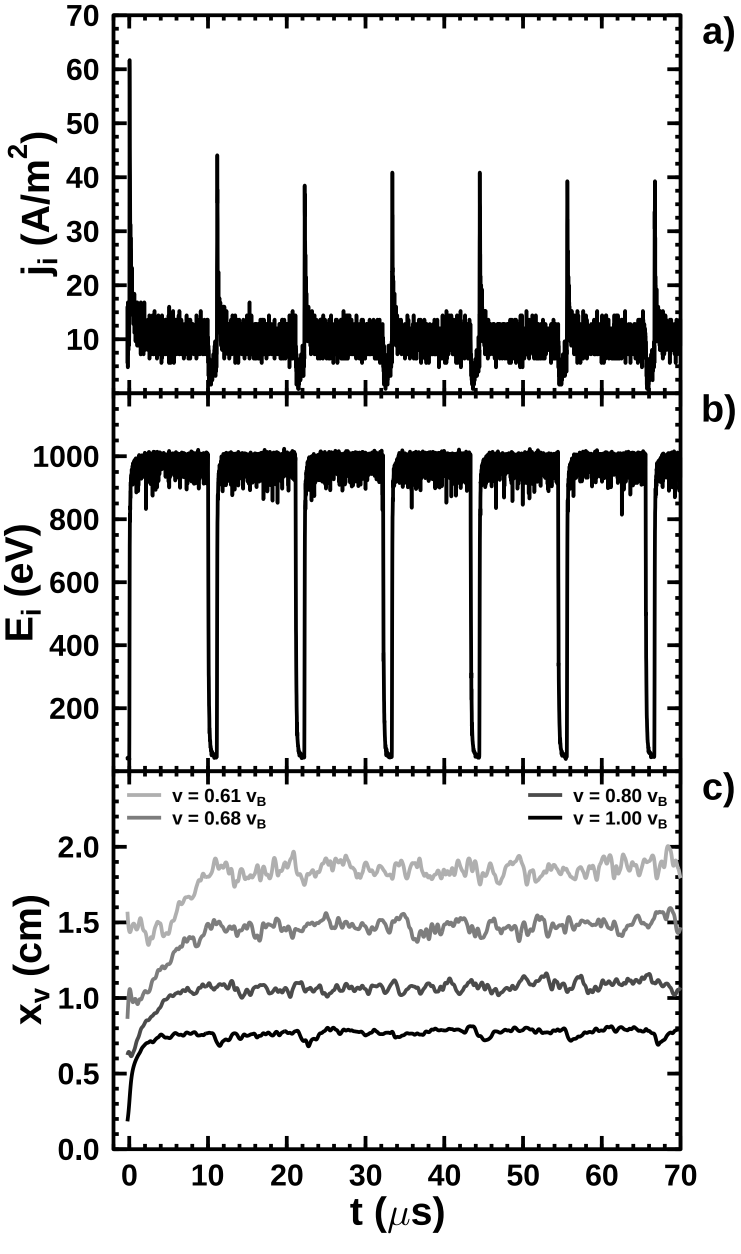

Abbildung 6.6: Zeitlicher Verlauf a) des Ionenimplantationsstroms, b) der mittleren Ionenimplantationsenergie und c) der Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit nach Anlegen einer gepulsten Hochspannung ab dem Zeitpunkt $t = 0$ mit der Pulsdauer $\tau_{\mathrm{Puls}} = 10\,\mu\mathrm{s}$ und der Frequenz $\nu_{\mathrm{Puls}} = 90\,\mathrm{kHz}$ (Duty-Cycle $\tau_{\mathrm{Puls}} \cdot \nu_{\mathrm{Puls}} = 0.90$).

6.4 Abhängigkeit des Maximalstroms von den Pulsparametern

In diesem Abschnitt wird nun gezeigt, wie die Strommaxima, die beim Anliegen der Hochspannungspulse während der Matrixschicht-Implantationsphase auftreten, von den Eigenschaften der angelegten Hochspannungspulse, wie Pulsdauer τ_{Puls} und Pausenlänge τ_{Pause} zwischen den Pulsen abhängen. Dazu wurden PIC/MC-Simulationen mit Pulsen verschiedener Länge zwischen $1\,\mu$s und $10\,\mu$s und jeweils mehreren unterschiedlich langen Pausen zwischen den Pulsen durchgeführt. Die Pulsfrequenz $\nu_{\text{Puls}} = 1/(\tau_{\text{Puls}} + \tau_{\text{Pause}})$ bewegte sich je nach verwendeter Pulsdauer in ganz unterschiedlichen Frequenzbereichen. Um dennoch einen Vergleich zwischen den Simulationen bei verschiedenen Pulsdauern vornehmen zu können, bietet sich die Verwendung des Duty-Cycle $D = \tau_{\text{Puls}}/(\tau_{\text{Puls}}+\tau_{\text{Pause}})$ an, der stets zwischen 0 und 1 liegen muß. Dabei bedeutet $D = 0$, daß überhaupt kein Puls anliegt ($\tau_{\text{Puls}} = 0$) und $D = 1$, daß der Puls unendlich lange andauert ($\tau_{\text{Pause}} = 0$).

Für jede Pulslänge wurden nun verschiedene Simulationen mit Werten des Duty-Cycle D zwischen 0.1 und 0.95 durchgeführt. Tabelle 6.1 zeigt übersichtsartig die dabei verwendeten Pulsfrequenzen ν_{Puls} in Abhängigkeit von der Pulslänge τ_{Puls} und dem Duty-Cycle D. In jeder Simulation wurde der Zeitraum von $100\,\mu$s seit Beginn des ersten Pulses simuliert und der Verlauf des Ionenwandstroms detektiert. Aus diesen Daten wurde dann jeweils die mittlere Höhe der auftretenden Stromspitzen sowie die zugehörige Standardabweichung berechnet. Dabei fand das Strommaximum des jeweils ersten Pulses keine Beachtung. Die auf diese Weise gewonnenen Ergebnisse sind in Abbildung 6.7 zu sehen. Insgesamt betrachtet zeigen alle Kurven einen Abwärtstrend der Stromhöhe mit zunehmendem Duty-Cycle D. Der Grund dafür wurde bereits in Abschnitt 6.3 genannt: Mit zunehmendem Duty-Cycle und damit zunehmender Pulsfrequenz werden die Pausen zwischen den Pulsen, in denen sich das Plasma erholen kann, immer kürzer. Als Folge davon nimmt die Plasmadichte nahe der Wand ab, was sich natürlich auch in der Dichte der Ionenwandströme niederschlagen muß. Auffallend ist, daß alle Kurven sowohl für sehr kleine als auch für sehr große Werte von D konvergieren. Der Grund für das Zusammenlaufen der Kurven für $D \to 0$ liegt darin, daß die Zeit $\tau_{\text{Pause}} = \tau_{\text{Puls}} \cdot (1 - D)/D$ zwischen aufein-

Tabelle 6.1: Werte der Pulsfrequenz ν_{Puls} in den durchgeführten Simulationen in Abhängigkeit von der Pulslänge τ_{Puls} und dem Duty-Cycle D.

τ_{Puls}	Duty-Cycle D					
	0.10	0.25	0.50	0.75	0.90	0.95
$1.0\,\mu$s	100 kHz	250 kHz	500 kHz	750 kHz	900 kHz	950 kHz
$2.5\,\mu$s	40 kHz	100 kHz	200 kHz	300 kHz	360 kHz	380 kHz
$5.0\,\mu$s	20 kHz	50 kHz	100 kHz	150 kHz	180 kHz	190 kHz
$10.0\,\mu$s	10 kHz	25 kHz	50 kHz	75 kHz	90 kHz	95 kHz

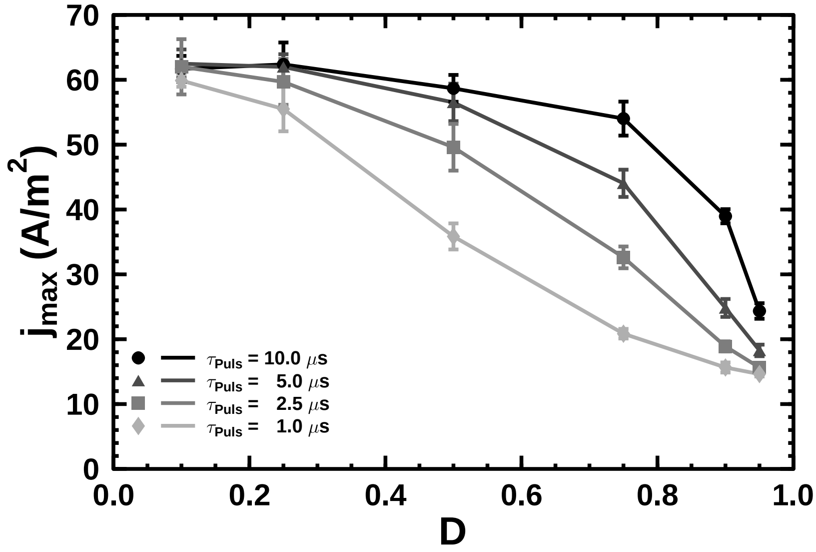

Abbildung 6.7: Mittelwert und Standardabweichung der durch die Hochspannungspulse auftretenden Strommaxima in Abhängigkeit von der Pulslänge τ_{Puls} und dem Duty-Cycle D.

anderfolgenden Pulsen dann hinreichend groß wird für eine nahezu vollständige Erholung des Plasmas. Daher wird jeder Strompuls die gleiche Höhe wie der erste Puls erreichen, dessen Maximum bei $62\,\mathrm{A/m^2}$ liegt. Die Konvergenz der Kurven für $D \rightarrow 1$ läßt sich dagegen durch die immer kürzer werdende Zeit τ_{Pause}, in der sich das Plasma regenerieren kann, erklären. Die Randschicht kann sich in den Pausen nicht mehr ausreichend erholen, sodaß nur noch der Ionensättigungsstrom von rund $10\,\mathrm{A/m^2}$, der aus dem Plasmabulk in die Vorschicht eingespeist wird, extrahiert wird. Das Auseinanderklaffen der Kurven im dazwischenliegenden Bereich hat schließlich seine Ursache darin, daß die Pausenlänge zwischen zwei Pulsen bei festem Duty-Cycle D von der Pulsdauer τ_{Puls} abhängt:

$$\tau_{\mathrm{Pause}} = \tau_{\mathrm{Puls}} \frac{1-D}{D} \tag{6.4}$$

Dadurch stehen dem Plasma bei gleichem Duty-Cycle aber verschiedenen Pulslängen τ_{Puls} unterschiedlich lange Erholungspausen zur Verfügung, was natürlich einen Einfluß auf die maximale Stromdichte haben muß.

Um nun die Abhängigkeit der Höhe der Strommaxima von der Pausenlänge klären zu können, wurden die Daten aus Abbildung 6.7 in Abhängigkeit von τ_{Pause} aufgetragen. Dabei wurde die Beziehung (6.4) benutzt. Das Ergebnis dieser Auftragung ist in Abbildung 6.8 zu sehen. Innerhalb der Fehlerbalken decken sich alle Kurven nahezu perfekt. Das unterstreicht die Bedeutung der Zeit τ_{Pause} für die Regenerationsfähigkeit des Plasmas, die offensichtlich unabhängig von der verwendeten Pulslänge ist. Wie man der Abbildung ent-

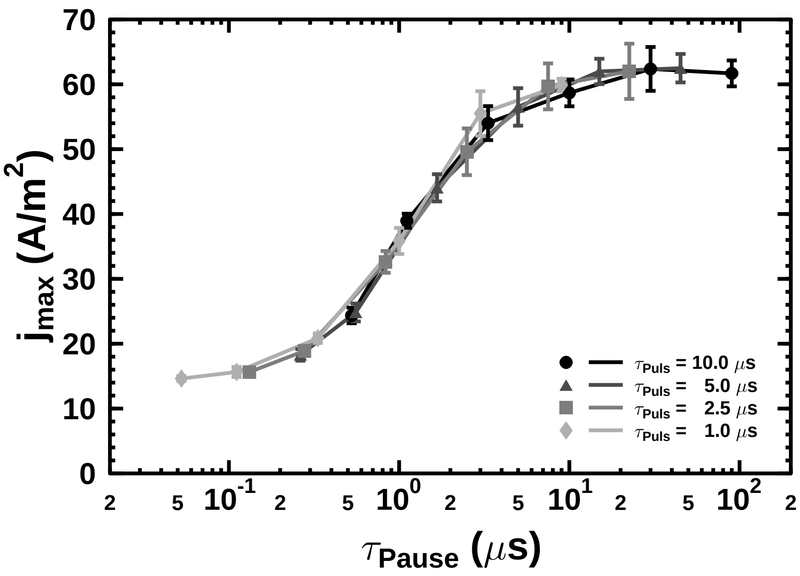

Abbildung 6.8: Halblogarithmische Darstellung des Mittelwerts und der Standardabweichung der Strommaxima in Abhängigkeit von der Pausenlänge τ_{Pause} zwischen den Pulsen.

nehmen kann, erreichen die Stromspitzen Werte in der Größenordnung eines Einzelpulses von $62 \pm 2\,\mathrm{A/m^2}$, solange $\tau_{\mathrm{Pause}} \geq 5\,\mu\mathrm{s}$ ist. Bei kürzeren Pausen nehmen die Stromspitzen schnell ab und erreichen bei $\tau_{\mathrm{Pause}} = 1\,\mu\mathrm{s}$ noch etwa $35\,\mathrm{A/m^2}$, bei $\tau_{\mathrm{Pause}} = 0.1\,\mu\mathrm{s}$ sogar nur noch $18\,\mathrm{A/m^2}$.

6.5 Abhängigkeit der Dosis des Implantationsstroms von den Pulsparametern

Für die technische Nutzung der Plasmaimmersions-Ionenimplantation ist es von entscheidender Bedeutung, die Dosis D_{i} der implantierten Ionen einstellen zu können, weil diese die Zahl der pro Flächeneinheit in eine Oberfläche eindringenden Ionen darstellt. Dazu ist es notwendig, die Abhängigkeit der Dosis von den Pulsparametern wie Dauer τ_{Puls} oder Frequenz ν_{Puls} genau zu kennen. Ein erster Schritt in diese Richtung wurde von Tian und Chu [Tian und Chu, 2000] getan, die ein einfaches analytisches Modell zu dieser Fragestellung auf der Grundlage des Lieberman-Modells [Lieberman, 1989] entwickelten. Dieses Modell geht jedoch wieder von der unrealistischen Annahme aus, daß das Plasma vor dem planaren Target völlig homogen ist und zwischen den Pulsen vollständig relaxiert, unabhängig von der Frequenz der angelegten Pulse. Darauf aufbauend wird dann für die

Ionendosis D_i der Ausdruck

$$D_\mathrm{i}(T) = \left(\frac{32}{9}\frac{{\epsilon_0}^2{n_\mathrm{p}}^4}{e^4 m_\mathrm{i}}\right)^{1/6} \cdot (e\Delta\Phi)^{1/2} \cdot T \cdot \nu_\mathrm{Puls} \cdot {\tau_\mathrm{Puls}}^{1/3} \tag{6.5}$$

$$= \left(\frac{32}{9}\frac{{\epsilon_0}^2{n_\mathrm{p}}^4}{e^4 m_\mathrm{i}}\right)^{1/6} \cdot (e\Delta\Phi)^{1/2} \cdot T \cdot D \cdot {\tau_\mathrm{Puls}}^{-2/3} \tag{6.6}$$

abgeleitet, wobei T die Dauer der Plasma-Behandlung des Targets darstellt. Dieser Ausdruck ist eine Näherung, die solange gilt, wie $\tau_\mathrm{Puls} \gg \frac{3}{2}{\omega_\mathrm{p,i}}^{-1}$ ist. In den in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen mit der Plasmadichte $n_\mathrm{p} = 2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ beträgt die Ionenplasmafrequenz $\omega_\mathrm{p,i} = 2.96 \cdot 10^7\,\mathrm{s}^{-1}$. Damit gelten die Näherungsformeln (6.5) und (6.6) für Pulse mit $\tau_\mathrm{Puls} \gg 50\,\mathrm{ns}$. Da die kleinste Pulslänge, die in den Simulationen verwendet wurde, $1\,\mu$s beträgt, ist diese Näherung hier anwendbar.

Bei konstanter Pulslänge τ_Puls sollte die Ionendosis D_i nach Gleichung (6.5) nun proportional zur Pulsfrequenz ν_Puls und damit auch zum Duty-Cycle $D = \tau_\mathrm{Puls} \cdot \nu_\mathrm{Puls}$ sein (Gleichung (6.6)). Um diese Vorhersage zu überprüfen, wurden aus den Daten der durchgeführten Simulationen, deren Parameter in Tabelle 6.1 zusammengefaßt sind, die Ionendosen auf die Wand für die Dauer von jeweils $T = 1\,\mathrm{s}$ berechnet. Dazu wurde bei jeder Simulationsrechnung anhand des Verlaufs der mittleren Ionenenergie E_i entschieden, ob die Ionen implantiert werden oder nicht. Sobald E_i in einem Zeitschritt Δt die Schranke von 500 eV (entsprechend 50% der Maximalenergie von 1000 eV während eines Hochspannungspulses) überschritten hatte, wurde die Zahl $j_\mathrm{i} \cdot \Delta t$ der in diesem Zeitschritt pro Flächeneinheit auf die Wand treffenden Ionen bei der Dosis mitgezählt. Durch die Wahl der Schranke von 500 eV sollte sichergestellt werden, daß die Ionen auch wirklich genügend Energie für das Eindringen in die Oberfläche mitbringen. Auf der anderen Seite konnten dadurch aber auch die Stromspitzen ganz erfaßt werden, weil diese noch vor Erreichen der Maximalenergie von 1000 eV auftreten. Am Ende jeder Simulation wurde schließlich die so gewonnene Dosis D_i auf den Zeitraum von 1 s hochgerechnet. Die simulierten Ionendosen sind für alle Rechnungen in Abbildung 6.9 zusammenfassend dargestellt. Wie man der Abbildung entnehmen kann, zeigt keine der dargestellten Kurven über den gesamten Bereich eine direkte Proportionalität zum Duty-Cycle D und damit zur Pulsfrequenz ν_Puls. Lediglich im Anfangsbereich bis $D = 0.25$ weisen alle Kurven Verläufe von Ursprungsgeraden auf, deren Steigungen wegen der Auftragung gegenüber D gemäß Gleichung (6.6) mit abnehmendem τ_Puls zunehmen. Im weiteren Verlauf weichen die Kurven mit zunehmendem Duty-Cycle aber immer mehr von diesen Ursprungsgeraden nach unten ab. Diese Abweichung wird gleichzeitig mit abnehmender Pulslänge τ_Puls immer stärker. Auf die Ursache dafür wurde schon in Abschnitt 6.4 hingewiesen, wo mit Abbildung 6.7 gezeigt wurde, daß die Höhe der Stromspitzen mit zunehmendem Duty-Cycle abnimmt und diese Abnahme umso stärker ist, je kleiner τ_Puls ist. Während die Strommaxima im Bereich $D \leq 0.75$ für $\tau_\mathrm{Puls} = 10\,\mu$s um höchstens 13% voneinander abweichen, beträgt die Abweichung für $\tau_\mathrm{Puls} = 1\,\mu$s bis zu 70%. Aus diesem Grund zeigt die Kurve mit der größten Pulsdauer in Abbildung 6.9 auch die kleinste Abweichung vom Geradenverlauf, die größte Abweichung

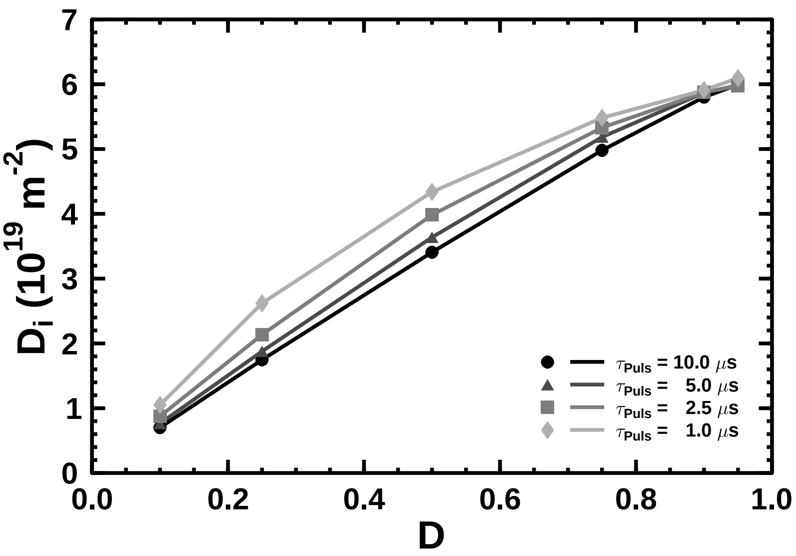

Abbildung 6.9: Abhängigkeit der simulierten Ionendosis D_i vom Duty-Cycle D für verschiedene Pulslängen zwischen $1\,\mu$s und $10\,\mu$s. Die dargestellten Dosen beziehen sich auf einen Zeitraum der Plasma-Behandlung des Targets von jeweils 1 s.

tritt dagegen bei der kleinsten Pulsdauer von $1\,\mu$s auf. Das Modell von Tian und Chu geht davon aus, daß jeder der periodisch auftretenden Hochspannungspulse einen Stromverlauf verursacht, der exakt die gleiche Charakteristik besitzt wie infolge eines Einzelpulses. Die Simulationen haben jedoch gezeigt, daß diese idealisierte Annahme auf ein reales Plasma nicht zutrifft, da sich der Verlauf der Ströme bei höheren Pulsfrequenzen wegen der unvollständigen Randschichtrelaxation immer verändert.

Eine weitere Vorhersage durch Gleichung (6.5) betrifft die Abhängigkeit von der Pulsdauer. Danach sollte die Ionendosis D_i bei fester Pulsfrequenz ν_Puls proportional zu ${\tau_\mathrm{Puls}}^{1/3}$ zunehmen. Zur Überprüfung dieser Modellaussage wurden bei der Frequenz von $\nu_\mathrm{Puls} = 50\,\mathrm{kHz}$ fünf verschiedene Simulationen mit Pulslängen zwischen $2\,\mu$s und $18\,\mu$s durchgeführt und jeweils die Ionendosis bezogen auf 1 s auf die beschriebene Weise bestimmt. Das Ergebnis dieser Simulationen ist in Abbildung 6.10 in doppellogarithmische Weise aufgetragen. Gleichzeitig ist in dieser Abbildung ein Fit an die simulierten Ionendosen dargestellt, der in guter Übereinstimmung mit den simulierten Werten ist. Danach nimmt die Ionendosis aber mit ${\tau_\mathrm{Puls}}^{0.85}$ zu und wächst damit stärker, als es der Proportional nach Gleichung (6.5) entspricht.

Um diese Diskrepanz zu verstehen, muß man einen Blick auf die Herleitung dieser Gleichung werfen. Tian und Chu gehen von dem Lieberman'schen Ansatz aus, wonach zu jedem Zeitpunkt der Implantationsphase eine quasistatische Child-Langmuir-Schicht vorliegt:

$$j_\mathrm{i}(t) = \frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_\mathrm{i}}\right)^{1/2} \frac{(\Delta\Phi)^{3/2}}{s^2(t)}. \qquad (6.7)$$

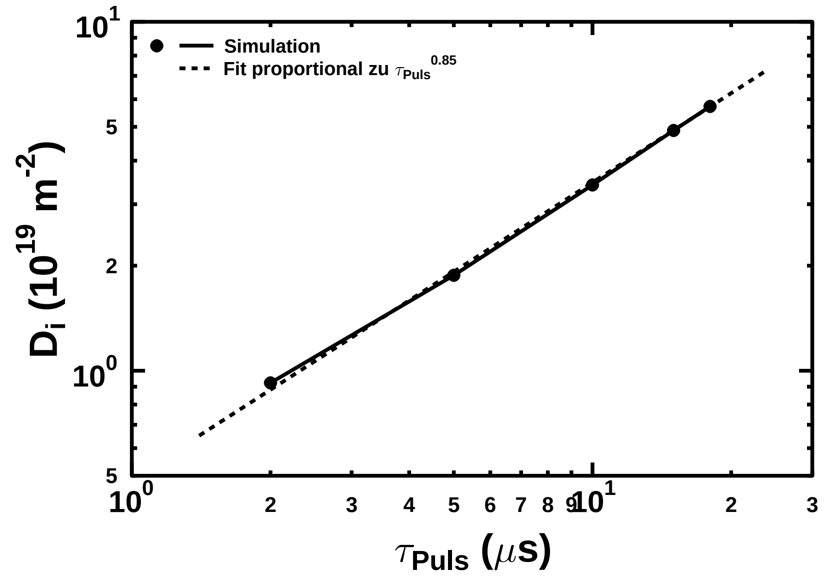

Abbildung 6.10: Doppellogarithmische Darstellung der Abhängigkeit der simulierten Ionendosis D_i von der Pulslänge τ_Puls bei einer festen Pulsfrequenz von 50 kHz. Die gestrichelte Kurve, die proportional zu ${\tau_\mathrm{Puls}}^{0.85}$ verläuft, stellt einen Fit an die simulierten Daten dar.

Darin trägt $s(t)$ die Bedeutung der Position der Schichtkante zum Zeitpunkt t und $j_\mathrm{i}(t)$ stellt den zeitlichen Verlauf der Ionenstromdichte dar. Diese wird dadurch gegeben, daß einerseits durch die Bewegung der Schichtkante ständig ein Ionenstrom der Dichte $en_\mathrm{p}\frac{ds}{dt}$ aus dem Plasma in die Schicht fließt, andererseits aber auch zusätzlich ein Ionensättigungsstrom der Dichte $en_\mathrm{p}v_\mathrm{B}$ durch die Vorschicht-Beschleunigung der Ionen auf die Bohmgeschwindigkeit vorhanden ist. Insgesamt lautet damit der Ansatz nach Lieberman:

$$j_\mathrm{i}(t) = \frac{4}{9}\epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_\mathrm{i}}\right)^{1/2} \frac{(\Delta\Phi)^{3/2}}{s^2(t)} = en_\mathrm{p}\left(\frac{ds}{dt} + v_\mathrm{B}\right). \tag{6.8}$$

Tian und Chu unterschlagen jedoch den Beitrag $en_\mathrm{p}v_\mathrm{B}$ aufgrund der Driftbewegung der Ionen in der Vorschicht und erhalten damit durch Lösung der aus (6.8) hervorgehenden vereinfachten Differentialgleichung die Beziehung

$$s(t) = s_0 \left(\frac{2}{3}\omega_{\mathrm{p,i}} t + 1\right)^{1/3} \tag{6.9}$$

für die Position der Schichtkante in Abhängigkeit von der Zeit. Darin hat s_0 die Bedeutung der Matrixschichtdicke. Setzt man den Ausdruck (6.9) in Gleichung (6.7) ein, dann sieht man, daß die Ionenstromdichte mit

$$j_\mathrm{i}(t) \propto \left(\frac{2}{3}\omega_{\mathrm{p,i}} t + 1\right)^{-2/3} \tag{6.10}$$

abnimmt und daher für große Zeiten $\omega_{\mathrm{p,i}}t \gg 1$ ganz verschwindet. Dieses Verhalten wurde auch schon bei der PIII-Simulation an homogenen Plasmen ohne Ionendriftbewegung beobachtet (Kapitel 4). Die Beachtung des Beitrags $en_{\mathrm{p}}v_{\mathrm{B}}$ zur Ionenstromdichte in Gleichung (6.8) würde dagegen sicherstellen, daß auch am Ende der Schichtausdehnungsphase, wenn $\frac{ds}{dt} = 0$ wird, noch der Ionensättigungsstrom auf die Wand fließt. Dies entspricht auch den Gegebenheiten in den durchgeführten Simulationen, in denen ständig ein Ionenstrom mit einer Dichte von ungefähr $10\,\mathrm{A/m^2}$ aus dem Plasma in die Vorschicht eingekoppelt wird.

Damit wird nun der Unterschied zwischen den simulierten und den berechneten Ionendosen erklärbar: Während bei Tian und Chu der Ionenwandstrom irgendwann zum erliegen kommt und damit gerade für längere Pulse keinen Beitrag mehr zur Ionendosis liefert, nimmt der Strom in den Simulationen auf höchstens $10\,\mathrm{A/m^2}$ ab und bleibt dann konstant. Dadurch wächst jedoch die Ionendosis gerade für lange Pulse immer mehr linear mit der Zeit an, was den in den Simulationen beobachteten fastlinearen Zusammenhang zwischen Dosis und Pulslänge,

$$D_{\mathrm{i}}(\tau_{\mathrm{Puls}}) \propto {\tau_{\mathrm{Puls}}}^{0.85}, \tag{6.11}$$

verständlich macht.

6.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde untersucht, wie sich die Länge und Frequenz von periodischen Pulsen auf die Dynamik der Schicht und Vorschicht sowie auf die Implantationsströme und -dosen auswirkt. Dabei stellte sich heraus, daß der Länge der Pausen zwischen zwei Pulsen eine besondere Bedeutung zukommt. Wenn die Pausen hinreichend lange sind, kann sich das Plasma zwischen den Pulsen vollständig regenerieren. Dadurch verhält sich das Plasma in jedem Puls wie bei einem Einzelpuls. Werden die Pausen dagegen zu kurz, dann kann sich das Plasma aufgrund seiner Trägheit zwischen den Pulsen nicht mehr ganz erholen. Dadurch nehmen die Stromspitzen und mit ihnen die Implantationsdosen ab. Aufgrund der Komplexität der Vorgänge zeigen sich dadurch deutliche Abweichungen zwischen den simulierten und den nach einem Modell von Tian und Chu berechneten Ionendosen, die darauf schließen lassen, daß die Annahmen dieses Modells zu stark vereinfachend sind.

Teil II

Zweidimensionale statische und dynamische Plasmarandschichten

Kapitel 7

Untersuchung einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht

7.1 Einleitung

Im bisherigen Verlauf der vorliegenden Arbeit konzentrierten sich die Untersuchungen auf eindimensionale planare Plasmarandschichten im Gleichgewicht und während der Dynamik. In diesem Kapitel werden die Untersuchungen nun auf die Randschichten in der Nähe eines zweidimensional strukturierten Targets ausgedehnt. Bei dem verwendeten Target handelt es sich dabei um eine in y-Richtung periodische Graben- und Stegstruktur, bei der die Gräben und Stege in Richtung der z-Achse verlaufen und der Einfachheit halber als unendlich ausgedehnt angenommen werden. Solche oder ähnliche Strukturen findet man unter anderem in der Mikroelektronik. Dort werden die Strukturen im Zuge der immer höheren Integrationsdichte der Halbleiter-Bauelemente schon seit längerem auch vertikal auf dem Wafer angeordnet. Ein Beispiel hierfür sind Grabenkondensatoren in Speicherchips, bei denen man die Seitenwände der Gräben, deren Breite im Mikrometerbereich und darunter liegt, durch Anwendung von Plasmaverfahren zu dotieren oder beschichten versucht [Mizuno *et al.*, 1988; Qian *et al.*, 1991; Yu und Cheung, 1994; Anders, 2000]. Eine andere Anwendung solcher Strukturen liegt in der Herstellung von Kupfer-Leiterbahnen auf Mikroprozessoren, die sich durch einen geringeren Leitungswiderstand und eine größere Resistenz gegenüber Elektromigration auszeichnen, als die früher verwendeten Aluminium-Leiterbahnen. Dazu ist es erforderlich, kleinste Gräben in den Silizium-Wafern gleichmäßig mit Kupfer auszufüllen, was ebenfalls durch Anwendung von Plasmaverfahren erreicht wird [Cheung, 1991; Shibuki *et al.*, 1997]. Ein weiteres Anwendungsgebiet umfaßt die sich noch in der Entwicklung befindliche Mikrosystemtechnik, mit deren Hilfe man hofft, kleinste Maschinen bauen zu können [1996]. Dazu müssen sehr kleine Sensoren und Aktoren hergestellt werden, die in Verbindung mit Mikroprozessoren in der Lage sein sollen, auf ihre Umwelt zu reagieren und aktiv auf diese einzuwirken. Schließlich sei stellvertretend für eine ganze Reihe von anderen Anwendungsmöglichkeiten bei der Werkzeug- und Maschinenherstellung die Oberflächenhärtung von Fahrzeuggetrieben oder Zahnrädern genannt. Diese besitzen zwar in der Regel zylindrische oder andere Symmetrien, haben jedoch mit der hier untersuchten Struktur die vorhandenen Ecken und Kanten sowie Vertiefungen und Erhebungen gemeinsam, die für das Auftreten ganz neuer Effekte verantwortlich sind. Zu diesen Effekten zählt auch, wie sich zeigen wird, eine Verletzung des Bohmkriteriums, die dazu führt, daß die Ionen selbst innerhalb der Vorschicht Geschwindigkeiten annehmen können, die größer als die Bohmgeschwindigkeit sind.

7.2 Geometrie des Targets und Parameter der Simulation

Zur Durchführung der Untersuchungen einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht wurde ein Target gewählt, das sowohl aus Gräben- als auch aus Stegstrukturen besteht. Die prinzipielle Geometrie dieses Targets ist in Abbildung 7.1 skizziert. Auf der linken Seite befindet sich eine planare Wand der Breite $L_\mathrm{y} = 1.5\,\mathrm{cm}$, auf der in der Mitte zwei identische Stege der Breite $b_\mathrm{s} = 2\,\mathrm{mm}$ und der Höhe $h = 5\,\mathrm{mm}$ im Abstand $b_\mathrm{t} = 1\,\mathrm{mm}$ voneinander plaziert sind. Dadurch entsteht zwischen den Stegen ein Graben mit dem Aspektverhältnis $h/b_\mathrm{t} = 5$. Die Breite der Wand unter- und oberhalb der beiden Stege beträgt jeweils $b/2 = 5\,\mathrm{mm}$. Das Target setzt sich insgesamt aus einer periodischen Wiederholung des abgebildeten Bereichs längs der y-Achse zusammen und ist in Richtung der z-Achse unendlich ausgedehnt. Dadurch entsteht eine Abfolge von Stegpaaren, zwischen welchen jeweils ein breiter Graben mit der Breite $b = 1\,\mathrm{cm}$ und dem Aspektverhältnis $h/b = 0.5$ liegt. Das Simulationsgebiet stimmt mit dem dargestellten Gebiet der Fläche $L_\mathrm{x} \cdot L_\mathrm{y}$ überein.

In diesem Gebiet wurde nun die Randschicht eines Argon-Plasmas bei Anliegen des Floatingpotentials am Target simuliert. Die dabei angewandte zweidimensionale Variante des PIC/MC-Verfahrens wird in Anhang D eingehend beschrieben. Die Parameter des simulierten Argon-Plasmas stimmen mit denen des Plasmas aus den eindimensionalen Simulationen überein. Im einzelnen sind das eine Plasmadichte von etwa $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$, die sich durch Einkoppeln von Ionen und Elektronen mit den Stromdichten $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m}^2$ bzw. $j_\mathrm{e} = 1516\,\mathrm{A/m}^2$ an der Stelle $x = L_\mathrm{x}$ eingestellt hat. Die Elektronen hatten die Temperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$, womit sich eine Debye-Länge von $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}\epsilon_0/n_\mathrm{p}e^2} = 0.15\,\mathrm{mm}$ ergibt. Die Ionen dagegen hatten eine Temperatur von $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$ und wurden mit dem 0.7-fachen der Bohm- oder Ionenschallgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ in das Simulationsgebiet injiziert. Das elektrische Potential betrug am rechten Rand bei $x = L_\mathrm{x}$ stets $\Phi = 0$, während das zweidimensionale Target links auf dem Wert des Floatingpotentials von $\Phi = -40.285\,\mathrm{V}$ lag. Das Neutralgas hatte eine Dichte von $n_0 = 2.57 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$

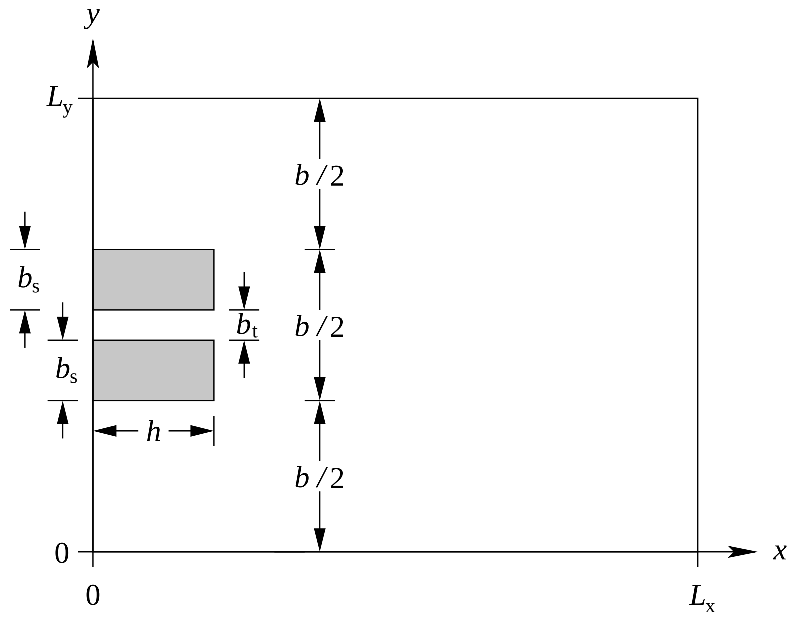

Abbildung 7.1: Skizzenhafte Darstellung der Geometrie des Targets, das für die Untersuchung der Eigenschaften einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht verwendet wurde. Auf der linken Seite befindet sich eine ebene Wand der Breite $L_y = 1.5\,\text{cm}$, auf der in der Mitte zwei identische Stege der Breite $b_s = 2\,\text{mm}$ und der Höhe $h = 5\,\text{mm}$ im Abstand $b_t = 1\,\text{mm}$ voneinander plaziert sind. Die Breite der Wand unter- und oberhalb der beiden Stege beträgt jeweils $b/2 = 5\,\text{mm}$. Das Target setzt sich insgesamt aus einer periodischen Wiederholung des abgebildeten Bereichs längs der y-Achse zusammen und ist in Richtung der z-Achse unendlich ausgedehnt. Dadurch entsteht eine Abfolge von Stegpaaren, zwischen welchen jeweils ein breiter Graben mit der Breite $b = 1\,\text{cm}$ liegt. Das Simulationsgebiet stimmt mit dem dargestellten Gebiet der Fläche $L_x \cdot L_y$ überein und hat die Ausdehnung $L_x = 2.63\,\text{cm}$ in x-Richtung (siehe Ausführungen im Text).

bei einer Temperatur von $T_0 = 300\,\text{K}$ und hatte damit einen Druck von $p_0 = 0.1\,\text{Pa}$. Da die Elektronen durch ein Boltzmann-Gas dargestellt wurden, konnten nur die Ionen Stöße mit den neutralen Ar-Atomen durchführen. Die betrachteten Prozesse waren elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße zwischen den Ar^+-Ionen und den neutralen Atomen. Die Querschnitte für diese Prozesse betragen bei der Bohmgeschwindigkeit $v_B = 4400\,\text{m/s}$ etwa $36\,\text{Å}^2$ bzw. $40\,\text{Å}^2$ [Cramer, 1959], die zugehörigen mittleren freien Weglängen liegen damit bei 11 cm bzw. 10 cm. Die Ortsraumzellen hatten in x- und y-Richtung jeweils die gleiche Ausdehnung $\Delta x = \Delta y = 0.1\,\text{mm}$, die Länge eines Zeitschritts wurde mit $\Delta t = 1\,\text{ns}$ vorgegeben.

Schließlich wurde die Länge des Simulationsgebiets in x-Richtung durch Anwendung des in Abschnitt D.6 beschriebenen Kriteriums bestimmt, wonach das Plasmavolumen bei gleicher Breite L_{y} des Simulationsgebiets unabhängig von der Targetform stets gleich sein soll. Nimmt man an, daß das Target zunächst eine völlig planare Wand bei $x = 0$ ist, dann entspricht dies einem eindimensionalen System und die Länge L_{x} sollte den gleichen Wert besitzen, wie in den bisher schon durchgeführten eindimensionalen Simulationen (siehe Kapitel 2): $L = L_{\mathrm{x}}^0 \stackrel{\mathrm{def}}{=} 2.5\,\mathrm{cm}$. Für das konstant zu haltende Plasmavolumen ergibt sich damit, zusammen mit der vorgegebenen Breite $L_{\mathrm{y}} = 1.5\,\mathrm{cm}$, der Wert $L_{\mathrm{x}}^0 \cdot L_{\mathrm{y}} = 3.75\,\mathrm{cm}^2$. Betrachtet man nun wieder das zweidimensionale Target aus Abbildung 7.1, dann muß das Simulationsgebiet offensichtlich auf die Länge $L_{\mathrm{x}} = 2.63\,\mathrm{cm}$ ausgedehnt werden, weil die beiden Stege sonst das Plasmavolumen verkleinern würden.

7.3 Aufbau der Floatingpotential-Randschicht

Für das im vorigen Abschnitt beschriebene Target wurde nun die zweidimensionale Randschicht unter Verwendung der genannten Plasma- und Simulationsparameter berechnet. Die Ergebnisse dieser Simulation, die den Aufbau der Schicht und Vorschicht beschreiben, sollen jetzt vorgestellt werden.

7.3.1 Dichteverteilung der Ionen und Elektronen

Zunächst wird anhand der Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen der Aufbau von Schicht und Vorschicht diskutiert, bevor auf die Verteilungen des Potentials und des elektrischen Feldes eingegangen wird. Dazu zeigt Abbildung 7.2 die Dichteverteilung der Ionen in der Nähe des zweidimensionalen Targets. Wie man erkennen kann, nimmt die Dichte der Ionen aufgrund ihrer zunehmenden Beschleunigung, ähnlich wie im eindimensionalen Fall, von der rechten Seite bei $x = 2.5\,\mathrm{cm}$, wo die Ionen aus dem Plasmabulk kommen, zum Target auf der linken Seite hin ab. Dabei weist die Dichte für größere Entfernungen vom Target lediglich ein Gefälle in negativer x-Richtung auf, was sich in der Abbildung durch den zur y-Achse parallelen Verlauf der Isolinie $n_{\mathrm{i}} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ ausdrückt. In größeren Entfernungen scheint die Oberflächenstruktur des Targets noch keinen Einfluß auf das Plasma zu haben, das dort offensichtlich noch eine eindimensionale Struktur besitzt. Erst bei weiterer Annäherung an das Target entsteht auch ein Dichtegefälle in y-Richtung, wodurch die Isolinien mit abnehmender Ionendichte immer stärker gekrümmt verlaufen. Direkt vor den Stegen mit dem dazwischen liegenden schmalen Graben tritt dabei das größte Gefälle auf. Das zeigt sich daran, daß die eingezeichneten Isolinien dort die kleinsten Abstände voneinander haben. In dem Graben selbst, wo sich die Dichteabnahme fortsetzt, wird das Gefälle jedoch mit zunehmender Eindringtiefe der Ionen wieder kleiner. In der unteren Grabenhälfte wird die Dichte sogar näherungsweise konstant und erreicht mit etwa $10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ ihr absolutes Minimum. Wie man in der Abbildung auch sehr gut erkennen

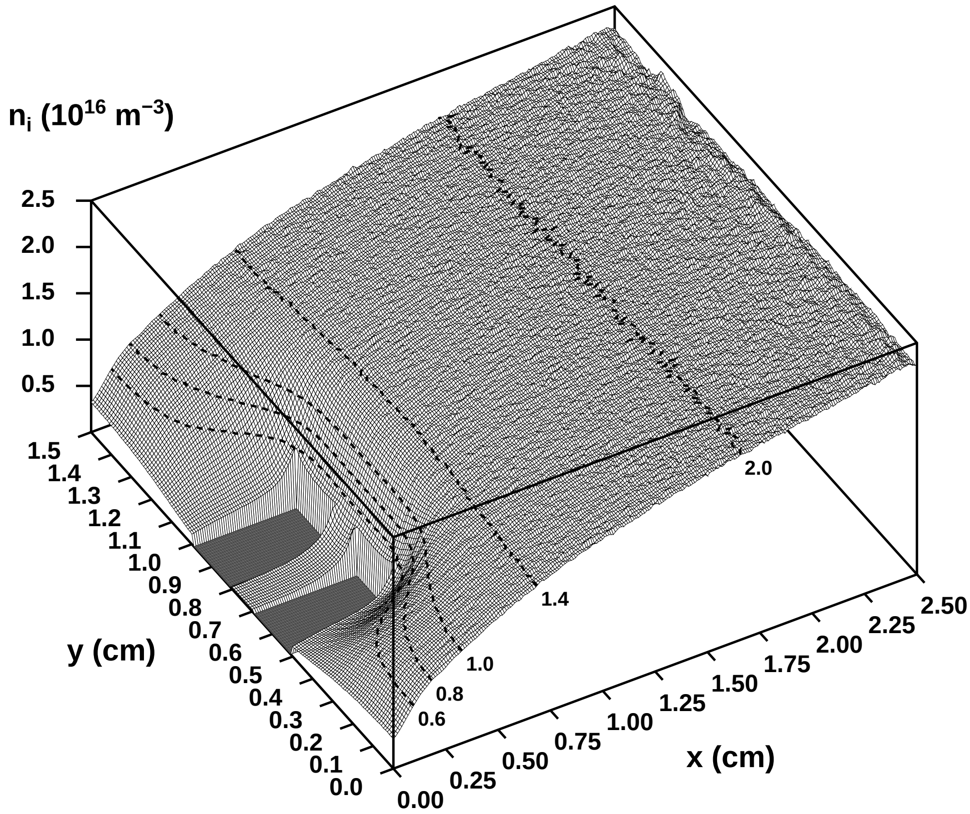

Abbildung 7.2: Dichteverteilung der Ionen in der simulierten Floatingpotential-Randschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien der Ionendichte dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

kann, weist die Ionendichte im Graben, mit Ausnahme des Grabeneingangs, auch keine Variation in y-Richtung auf. Im Bereich des breiten Grabens, dessen beide Hälften durch die unter- und oberhalb der beiden Stege liegenden Regionen ($0.0\,\mathrm{cm} \leq y \leq 0.5\,\mathrm{cm}$) und ($1.0\,\mathrm{cm} \leq y \leq 1.5\,\mathrm{cm}$) dargestellt werden, ist das Dichtegefälle der Ionen deutlich kleiner als vor den Stegen. Außerdem zeigt sich dort eine Abnahme der Ionendichte zu den konkaven Ecken hin, wo die Dichte lokale Minima besitzt. Auf der Targetoberfläche erreichen die Ionen ihre maximale Dichte von etwa $6 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ an den äußeren konvexen Kanten der beiden Stege. Während die Ionen auf den Stegstirnflächen beinahe eine konstante Dichteverteilung haben, treten die größten Schwankungen auf den inneren und äußeren Seitenwänden der Stege auf. In beiden Fällen nimmt die Teilchendichte nach unten hin stark ab. Die Bodenfläche des breiten Grabens schließlich erreichen die meisten Ionen in deren Mitte. Wie sich später zeigen wird, läßt sich der Verlauf der Ionendichte auf der Targetoberfläche auf das elektrische Feld zurückführen, das an den konvexen Kanten sehr groß wird, während es in den konkaven Ecken verschwindet.

Zum Vergleich dazu ist nun in Abbildung 7.3 die Verteilung der Elektronendichte zu sehen. Das Dichteprofil der Elektronen stimmt weitestgehend mit dem der Ionen überein. Es zeigt sich jedoch, daß die Elektronendichte wegen des elektrischen Gegenfeldes in der Schicht, gegen das die Elektronen anlaufen müssen, überall auf der Targetoberfläche nahezu verschwindet. Genauer kann man mit dem Boltzmann-Ansatz $n_\mathrm{e} = {n_\mathrm{e}}^0 \cdot \exp(-e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e})$ und dem sich in den Simulationen automatisch einstellenden Wert ${n_\mathrm{e}}^0 \approx 2.3 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ ausrechnen, daß die Elektronendichte auf der Targetoberfläche mit dem Potential $\Phi = -40.285\,\mathrm{V}$ in der Größenordnung von $10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$ liegt. Wegen des geringen Abstands der inneren Stegflächen voneinander, die überall auf dem Floatingpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ liegen, sind die Elektronen fast nicht in der Lage, in den schmalen Graben zwischen den Stegen einzudringen. Der große Graben ist dagegen mit 1 cm offensichtlich hinreichend breit, sodaß die Elektronen dort noch in relativ großer Zahl vertreten sein können.

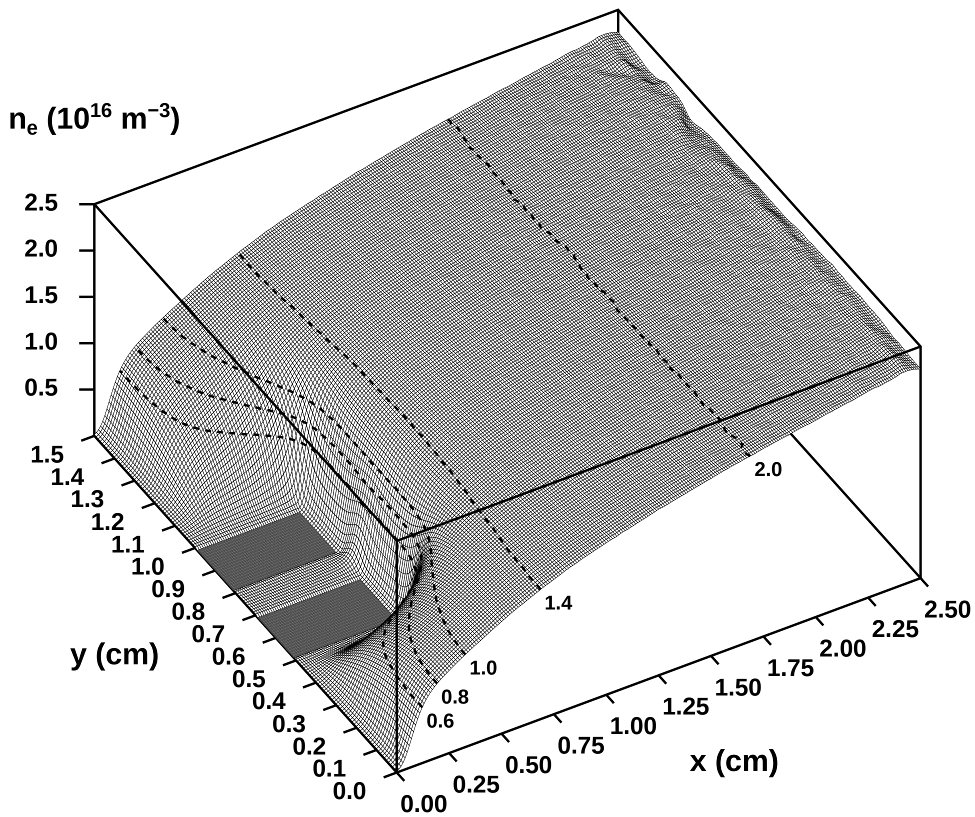

Abbildung 7.3: Dichteverteilung der Elektronen in der simulierten Floatingpotential-Randschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien der Elektronendichte dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

Die tatsächliche Unterteilung des Plasmas in Schicht und Vorschicht zeigt sich aber erst, wenn man sich den auf die Ionendichte bezogenen relativen Unterschied zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ ansieht, dessen Verteilung in Abbildung 7.4 dargestellt ist. In den größten Teilen des Volumens vor dem Target besitzen Ionen und Elektronen die gleiche Dichte und damit einen verschwindenden relativen Unterschied $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$. Dieser Bereich, der sich zwischen $x = 2.5\,\mathrm{cm}$ und der gestrichelt eingezeichneten Linie befindet, stellt wegen der Quasineutralität die Vorschicht des Plasmas dar. Dabei markiert die gestrichelte Linie all jene Orte, an denen die Elektronendichte um 5% unter die Ionendichte abgesunken ist, also $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ gilt. Diese Linie verläuft zwar eigentlich schon in der Schicht, ihre Lage stimmt jedoch wegen der geringen Abweichung

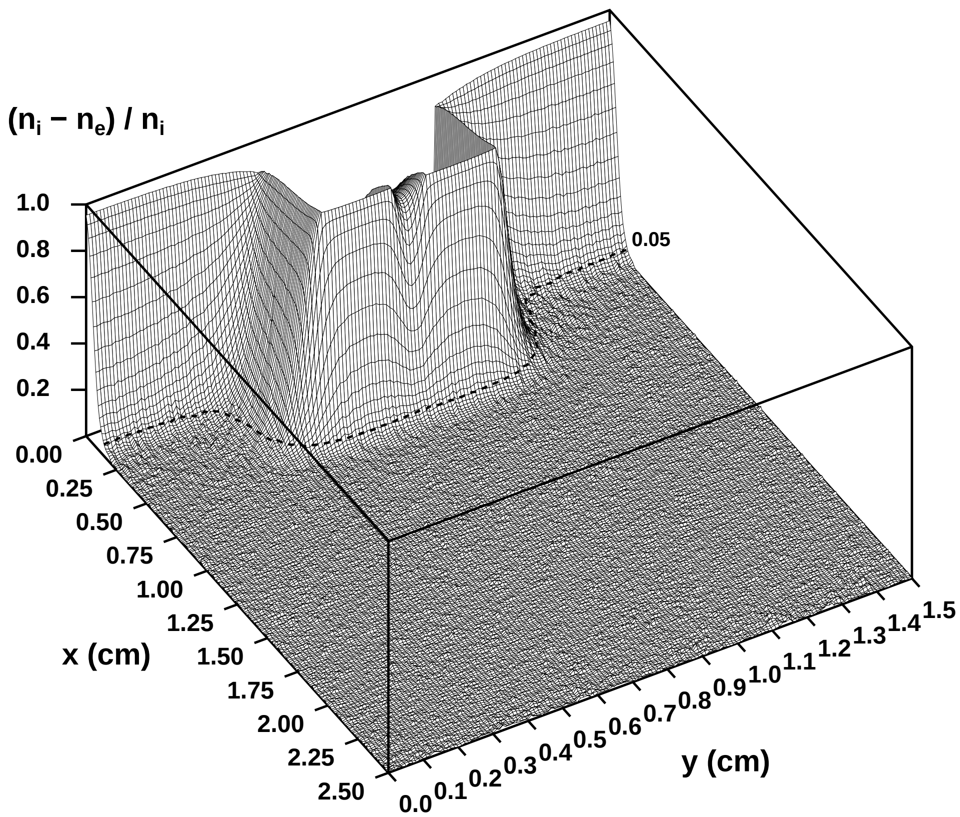

Abbildung 7.4: Verteilung des auf die Ionendichte bezogenen relativen Unterschieds zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$. Die gestrichelte Linie verbindet die Orte, an denen die Elektronendichte um 5% unter die Ionendichte abgesunken ist, also $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ gilt. Diese Linie verläuft eigentlich schon in der Schicht, ihre Lage stimmt jedoch wegen der geringen Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte annäherend mit der der Schichtkante überein. Man beachte die gegenüber den Abbildungen 7.2 und 7.3 gedrehte Lage des Koordinatensystems.

zwischen Ionen- und Elektronendichte annäherend mit der der Schichtkante überein. Diese Linie folgt mit einigen Ausnahmen, die unmittelbar vor dem schmalen Graben zwischen den Stegen und im Bereich der konkaven Ecken des breiten Grabens auftreten, in einem Abstand von etwa 1.4 ± 0.1 mm dem Verlauf der Targetoberfläche. Die eigentliche Schichtkante, wo sich die Ionen- und Elektronendichte gerade zu unterscheiden beginnen, liegt dagegen etwa 2.1 ± 0.1 mm vom Target entfernt. Lediglich im Bereich der konkaven Ecken links und rechts des Stegpaares ist dieser Abstand mit 3.5 mm größer, während er an den äußeren konvexen Kanten der Stege mit 1.4 mm sogar etwas kleiner ist. Diese Beobachtungen stimmen qualitativ gut mit analytischen Modellrechnungen zur Struktur von Child-Langmuir-Schichten [Watterson, 1989] und Matrixschichten [Donnelly und Watterson, 1989] in der Nähe von Ecken und Kanten überein. Danach sollte die Schichtdicke an einer rechtwinkligen konvexen Kante nur 67% der Dicke einer planaren Child-Langmuir-Schicht betragen. An einer rechtwinkligen konkaven Ecke dagegen sollte eine Matrixschicht etwa um den Faktor 1.7 dicker sein als vor einer planaren Wand. Obwohl die hier simulierte Randschicht aufgrund der vorhandenen Elektronen weder eine reine Child-Langmuir-Schicht ist noch aufgrund des Ionendichtegefälles als eine Matrixschicht angesehen werden kann, decken sich die analytischen Vorhersagen erstaunlich gut mit den Simulationsdaten.

Der breite Graben ist mit 1 cm Breite hinreichend groß, um dem Plasma das Eindringen in sein Inneres zu ermöglichen. Der schmale Graben ist dagegen mit nur 1 mm Breite im Vergleich zu der Schichtdicke von etwa 2.1 mm zu eng. Daher wird das Plasma aus dessen Innerem herausgedrängt. Interessant ist dabei, daß der relative Dichteunterschied zwischen Ionen und Elektronen, entgegen dem üblichen Verhalten, mit zunehmender Tiefe im Graben wieder abnimmt. Während $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ am Grabeneingang noch 0.9 beträgt, wird am Grabenboden nur noch 0.4 erreicht. Leider ist dieses Verhalten jedoch in Abbildung 7.4 nicht zu erkennen, weil der Blick ins Grabeninnere durch die verdeckenden Flächen verwehrt wird. Der Grund für diesen Effekt ist die einerseits fast konstante Elektronendichte überall im Grabeninneren und andererseits die nach unten hin abnehmende Ionendichte.

7.3.2 Potentialverteilung

Mit dem eben diskutierten Unterschied zwischen Ionen- und Elektronendichte läßt sich nun die Verteilung des elektrischen Potentials Φ, die in Abbildung 7.5 dargestellt ist, qualitativ verstehen. Zunächst nimmt das Potential von seinem vorgegebenen Wert $\Phi = 0$ auf der rechten Seite leicht auf $-k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ an der Stelle $x = 0.70 \pm 0.04\,\mathrm{cm}$ ab. Dabei zeigt das Gefälle fast ausschließlich in Richtung der negativen x-Achse. Obwohl nach Abbildung 7.4 das Plasma in diesem Bereich der Vorschicht quasineutral ist, muß aufgrund der hier noch in guter Näherung geltenden eindimensionalen Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0}(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e}) \tag{7.1}$$

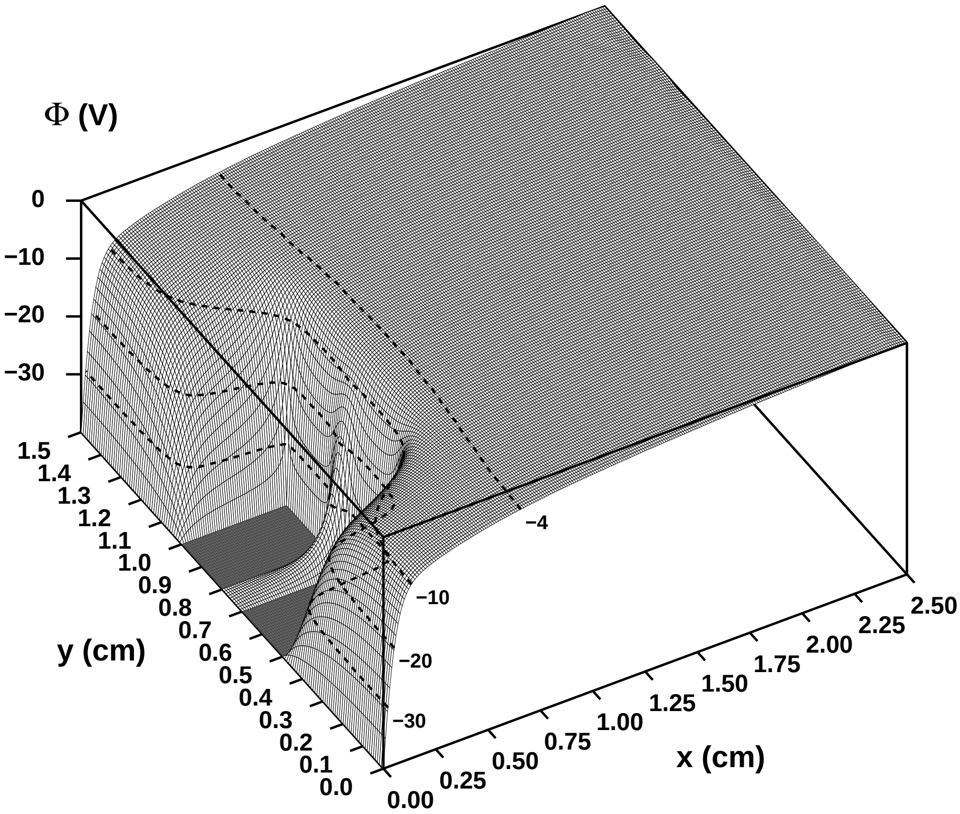

Abbildung 7.5: Verteilung des elektrischen Potentials Φ in der Plasmarandschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien des Potentials dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Potentialverteilung.

ein leichter Überschuß in der Ionendichte vorliegen, damit das Potential die dargestellte negative Krümmung in x-Richtung bekommt. Die Ursache für diesen Dichteüberschuß liegt, wie im eindimensionalen Fall (siehe Kapitel 2), in den elastischen und Ladungsaustauschstößen zwischen Ionen und neutralen Ar-Atomen. In beiden Fällen liegt nach dem Stoß ein langsameres Ion als vor dem Stoß am Ort der Kollision vor, wodurch die lokale Ionendichte zunimmt. Dadurch entsteht ein elektrisches Feld in der Größenordnung von $4\,\mathrm{V}/(2.63\,\mathrm{cm} - 0.7\,\mathrm{cm}) \approx 2\,\mathrm{V/cm}$, das die langsamen Ionen wieder in die negative x-Richtung beschleunigt. Bei weiterer Annäherung an das Target tritt in zunehmendem Maße auch ein Potentialgefälle entlang der y-Achse auf. Schließlich fällt das Potential in der Plasmaschicht nahe der Targetoberfläche, die von der positiven Raumladung der Ionen dominiert wird, schnell auf das Floatingpotential von $-40.285\,\mathrm{V}$ am Target ab. Im Inneren des schmalen Grabens schließlich besitzt das elektrische Potential nur noch eine sehr flache Struktur. Als Grund dafür kann wieder die Tatsache angeführt werden, daß die Grabenbreite mit $1\,\mathrm{mm}$ deutlich kleiner ist als die Randschichtdicke von etwa $2.1\,\mathrm{mm}$, sodaß das Potential im Inneren gar nicht um die volle Differenz von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ variieren kann. Auf dieses Phänomen wurde bereits im Zusammenhang von homogenen Matrixschichten in Löchern und Gräben hingewiesen [Sheridan, 1993; Sheridan, 1994].

7.3.3 Geschwindigkeitsverteilung der Ionen

Die zunehmende Beschleunigung der Ionen im elektrischen Potential läßt sich anhand der Verteilung ihrer mittleren Geschwindigkeit v_i in Abbildung 7.6 sehr gut erkennen. Im Bereich der Vorschicht werden die Ionen auf die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ beschleunigt, die sie bei etwa $x = 0.72 \pm 0.04\,\mathrm{cm}$ erreichen, wie die leicht gekrümmte Isolinie mit $v_\mathrm{i} = 4.4\,\mathrm{km/s}$ zeigt. Direkt an der Targetoberfläche erreichen die Ionen aufgrund der starken Beschleunigung in dem elektrischen Feld der Schicht dann ihre Maximalgeschwindigkeit von etwa $14\,\mathrm{km/s}$. Auffällig ist noch, daß die Ionengeschwindigkeit im Inneren des schmalen Grabens beinahe konstant $14\,\mathrm{km/s}$ beträgt, was sich durch das geringe Potentialgefälle im Graben erklären läßt (siehe Abbildung 7.5).

Nach dem Bohmkriterium sollten die Potential-Isolinie zu $\Phi = -k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ in Abbildung 7.5, sowie die Isotache zur Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4.4\,\mathrm{km/s}$

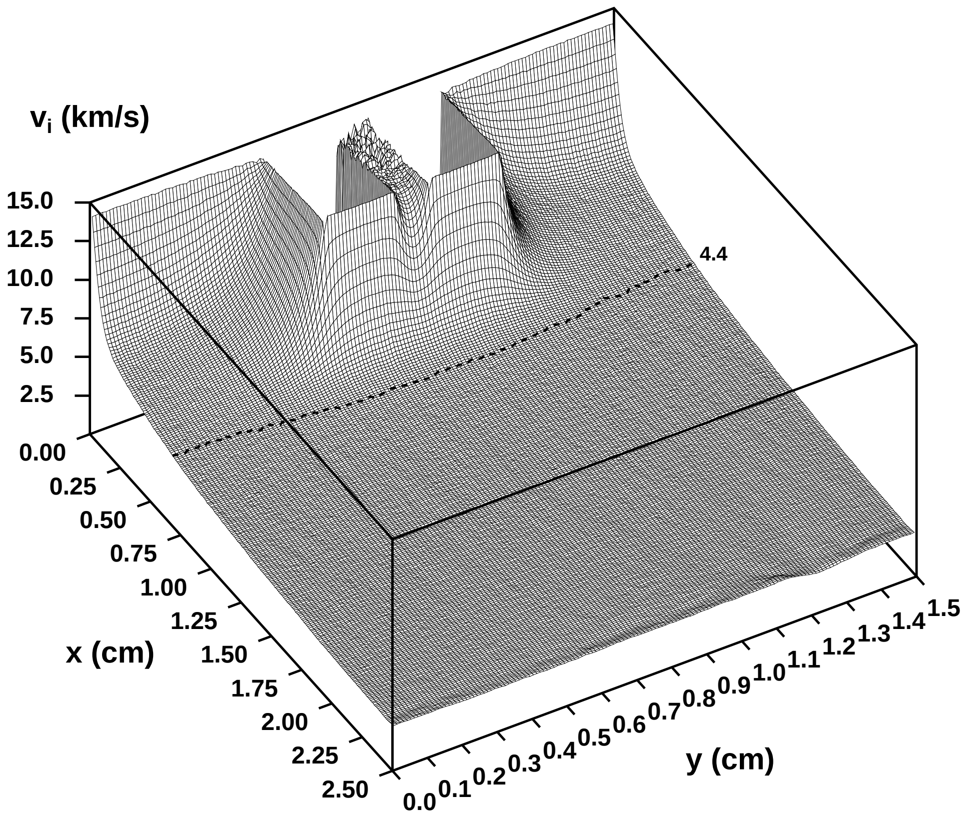

Abbildung 7.6: Verteilung des Betrags der mittleren Ionengeschwindigkeit v_i. Die gestrichelte Linie stellt die Isotache zu $v_\mathrm{i} = 4.4\,\mathrm{km/s}$ dar und markiert die Positionen, an denen die Ionen die Bohmgeschwindigkeit erreichen. Man beachte die gegenüber Abbildung 7.5 gedrehte Lage des Koordinatensystems.

in Abbildung 7.6 die Position der Schichtkante markieren. Obwohl sich die Lagen beider Isolinien auch sehr gut decken, zeigt sich jedoch ein erheblicher Unterschied zur Position der tatsächlichen Schichtkante aus Abbildung 7.4. Direkt vor den Stegen und dem dazwischen liegenden schmalen Graben liegt die Isotache zur Bohmgeschwindigkeit v_B an der Stelle $x = 0.76\,\mathrm{cm}$, was sich noch relativ gut mit der Position der Schichtkante bei $x = 0.70\,\mathrm{cm}$ deckt. Während die Isotache zu $v_\mathrm{i} = v_\mathrm{B}$ vor der Mitte des breiten Grabens jedoch nur eine geringe Anpassung an die Targetstruktur zeigt und etwa bei $x = 0.68\,\mathrm{cm}$ zu finden ist, liegt die tatsächliche Schichtkante dort an der Stelle $x = 0.22\,\mathrm{cm}$, wo die Ionen schon Geschwindigkeiten über 6 km/s erreichen.

7.3.4 Verletzung des Bohmkriteriums in der gekrümmten Vorschicht des Grabens

Offensichtlich handelt es sich hier um eine Verletzung des Bohmkriteriums. Der Grund dafür liegt darin, daß sich der Ionenstrom nach Eintreten in den breiten Graben in der vom Plasma weggekrümmten Vorschicht sowohl auf den Boden des Grabens als auch auf die beiden Stegaußenseiten aufteilen muß. Dadurch nimmt der Betrag j_i des lokalen Ionenstroms mit zunehmender Tiefe im Graben ab.

Um zu verstehen, welchen Einfluß das auf das Bohmkriterium hat, sei ein Plasma betrachtet, in dem die Ionen kalt sind und sich stoßfrei bewegen. Wegen der freien Ionenweglänge von $\lambda = 5.1\,\mathrm{cm}$ ist das in guter Näherung erfüllt, wenn man sich auf Dimensionen in der Größenordnung der Schichtdicke bezieht. Die Temperatur der Elektronen soll überall konstant T_e sein. An der Schichtkante $x = x_\mathrm{s}$, wo das elektrische Potential den Wert Φ_s hat, sei die Plasmadichte n_0 und der Betrag der Ionengeschwindigkeit soll v_0 sein. Abbildung 7.7 zeigt skizzenhaft den Verlauf des Potentials in der Schicht und Vorschicht. Die darin eingezeichneten Pfeile sollen den Betrag des Ionenstroms j_i andeuten, der mit zunehmender Nähe zur Wand immer kleiner wird. Die Elektronendichte in der Schicht und Vorschicht läßt sich in Abhängigkeit vom Potential wie üblich durch einen Boltzmann-Ansatz ausdrücken:

$$n_\mathrm{e}(\Phi) = n_0 \cdot e^{\frac{e(\Phi-\Phi_\mathrm{s})}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}\,. \tag{7.2}$$

Da die Ionen die gesamte Randschicht stoßfrei durchfliegen, ergibt sich der Betrag ihrer Geschwindigkeit in Abhängigkeit von Φ aus der Energieerhaltung zu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m_\mathrm{i} {v_\mathrm{i}}^2(\Phi) &= \frac{1}{2} m_\mathrm{i} {v_0}^2 + e(\Phi_\mathrm{s} - \Phi) \\ v_\mathrm{i}(\Phi) &= v_0 \cdot \left(1 + \frac{2e(\Phi_\mathrm{s}-\Phi)}{m_\mathrm{i}{v_0}^2}\right)^{1/2}. \end{aligned} \tag{7.3}$$

Betrachtet man jetzt einen beliebigen Punkt in der Vorschicht, dann müssen die Ionen

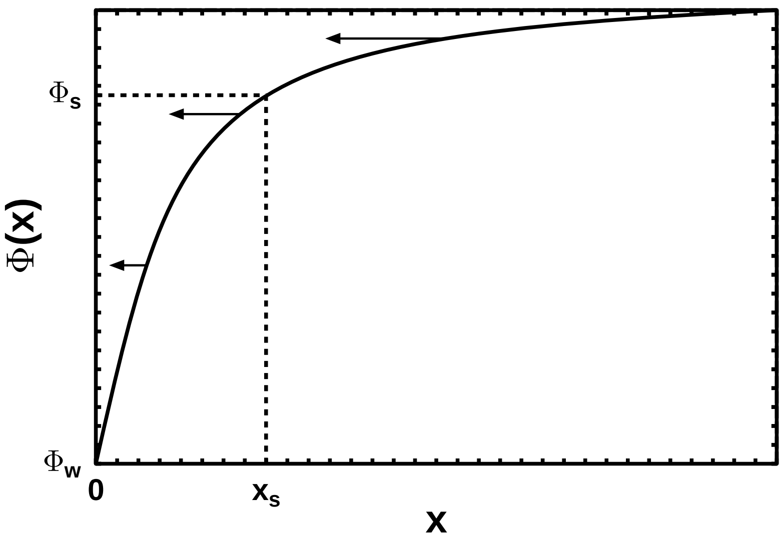

Abbildung 7.7: Skizzenhafte Darstellung des Potentialverlaufs in einer Gleichgewichts-Randschicht. Das Potential Φ nimmt in der Vorschicht leicht ab, erreicht an der Schichtkante bei $x = x_\mathrm{s}$ den Wert Φ_s und fällt schließlich in der eigentlichen Schicht schnell auf den Wert Φ_w an der Wand bei $x = 0$ ab. Die eingezeichneten Pfeile sollen den Betrag des Ionenstroms j_i andeuten, der mit Annäherung an die Wand immer kleiner wird.

und Elektronen aufgrund der Quasineutralität des Plasmas dort die gleiche Dichte haben, $n_\mathrm{i}(\Phi) \stackrel{!}{=} n_\mathrm{e}(\Phi)$. Darin läßt sich die Ionendichte $n_\mathrm{i}(\Phi)$ als Quotient aus den Beträgen des Stroms $j_\mathrm{i}(\Phi)$ und der Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{i}(\Phi)$ darstellen:

$$\frac{j_\mathrm{i}(\Phi)}{v_\mathrm{i}(\Phi)} = n_\mathrm{i}(\Phi) \stackrel{!}{=} n_\mathrm{e}(\Phi). \tag{7.4}$$

Setzt man nun für die Elektronendichte den Ausdruck (7.2) ein und bildet auf beiden Seiten den natürlichen Logarithmus, dann ergibt sich daraus die Beziehung

$$\ln j_\mathrm{i}(\Phi) - \ln v_\mathrm{i}(\Phi) = \ln n_0 + \frac{e(\Phi - \Phi_\mathrm{s})}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}. \tag{7.5}$$

Durch partielle Differentiation entlang der x-Achse ergibt sich daraus die Gleichung

$$\frac{1}{j_\mathrm{i}} \frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x} - \frac{1}{v_\mathrm{i}} \frac{\partial v_\mathrm{i}}{\partial x} = \frac{e}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}} \frac{\partial \Phi}{\partial x}. \tag{7.6}$$

Nach Gleichung (7.3) läßt sich nun das partielle Differential von v_i durch den Ausdruck

$$\frac{1}{v_\mathrm{i}} \frac{\partial v_\mathrm{i}}{\partial x} = -\frac{e}{m_\mathrm{i} v_\mathrm{i}} \frac{\partial \Phi}{\partial x} \tag{7.7}$$

darstellen. Dadurch ergibt sich insgesamt aus Gleichung (7.6) für die Vorschicht die Beziehung

$$\frac{1}{j_\mathrm{i}}\frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x} = \frac{e}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\frac{\partial \Phi}{\partial x}\left(1 - \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{i}{v_\mathrm{i}}^2}\right). \tag{7.8}$$

Nimmt man jetzt an, daß die Ionen, wie im Beispiel der vorliegenden Simulation an manchen Stellen beobachtet, bereits innerhalb der Vorschicht schon eine Geschwindigkeit v_i haben, die größer als die Bohmgeschwindigkeit v_B ist,

$$\begin{aligned} {v_\mathrm{i}}^2 &> {v_\mathrm{B}}^2 = \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{i}} \\ 1 - \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{i}{v_\mathrm{i}}^2} &> 0, \end{aligned} \tag{7.9}$$

und benutzt man gleichzeitig, daß in der Vorschicht $\frac{\partial \Phi}{\partial x} > 0$ ist (siehe Abbildung 7.7), dann folgt aus Gleichung (7.8) schließlich die notwendige Bedingung

$$\frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x} > 0. \tag{7.10}$$

Nimmt man dagegen umgekehrt an, daß innerhalb der Vorschicht $\frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x} > 0$ gilt, dann folgt aus Gleichung (7.8) zusammen mit der Beziehung $\frac{\partial \Phi}{\partial x} > 0$, daß

$${v_\mathrm{i}}^2 > \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{i}} = {v_\mathrm{B}}^2 \tag{7.11}$$

sein muß. Die Bedingungen (7.10) und (7.11) sagen zusammen aus, daß es notwendig und hinreichend für das Auftreten von Überschallgeschwindigkeiten $v_\mathrm{i} > v_\mathrm{B}$ in der Vorschicht ist, daß der Ionenstrom dort divergiert. Das ist aber nur möglich, wenn die Vorschicht und damit auch die Schichtkante selbst vom Plasmabulk weggekrümmt sind.

Diese Aussage erklärt jetzt auch den großen Unterschied zwischen der Lage der Isotache mit der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{i} = 4.4\,\mathrm{km/s}$ in Abbildung 7.6 und der Lage der eigentlichen Schichtkante in Abbildung 7.4. Wie man in Abbildung 7.6 aufgrund der leichten Krümmung der 4.4 km/s-Isotache erkennen kann, weist die Vorschicht vor dem breiten Graben bereits eine Krümmung auf, die vom Plasmabulk wegzeigt. Weil die Ionen nach der Bedingung (7.11) dann jedoch Überschallgeschwindigkeiten erreichen müssen, damit sich eine Schicht ausbilden kann, muß diese Isotache ebenfalls noch zur Vorschicht gezählt werden. Erst mit zunehmender Beschleunigung der Ionen im Bereich des Grabens wird dann eine nicht näher spezifizierte kritische Geschwindigkeit erreicht, ab der sich tatsächlich die Schicht ausbildet.

7.3.5 Verteilung des elektrischen Feldes

Als Abschluß der Diskussion des Aufbaus der Floatingpotential-Randschicht soll jetzt noch die Verteilung des elektrischen Feldes vorgestellt werden. Dazu ist in Abbildung 7.8 der Betrag des elektrischen Feldes $|E| = |\vec{\nabla}\Phi|$ dargestellt. Besonders auffällig sind die Spitzen des elektrischen Feldes an den konvexen Kanten der beiden Stege, die an den äußeren Ecken Maximalwerte von 1.2 kV/cm erreichen, während an den inneren Kanten immerhin noch 1.0 kV/cm erzielt werden. Solche Feldspitzen sind ein bekanntes Phänomen der Elektrostatik in der Nähe von Ecken und Kanten, das man sich beispielsweise bei Blitzableitern zunutze macht. Eigentlich sagt die Elektrostatik für eine rechtwinklige Kante eine Divergenz des elektrischen Feldes mit $|E| \propto r^{-1/3}$ voraus, wobei r den Abstand von der Kante darstellt [Jackson, 1982]. Aufgrund der endlichen Auflösung im diskreten Ortsraumgitter werden jedoch in der Simulation nur endlich große Werte an den Kanten angenommen. Wie in Abschnitt E.3 jedoch gezeigt wird, lassen sich die daraus resultierenden Ungenauigkeiten in der Bewegung der Ionen gut korrigieren. In größerer Entfernung von den Kanten fällt das elektrische Feld in Abbildung 7.8 jedoch

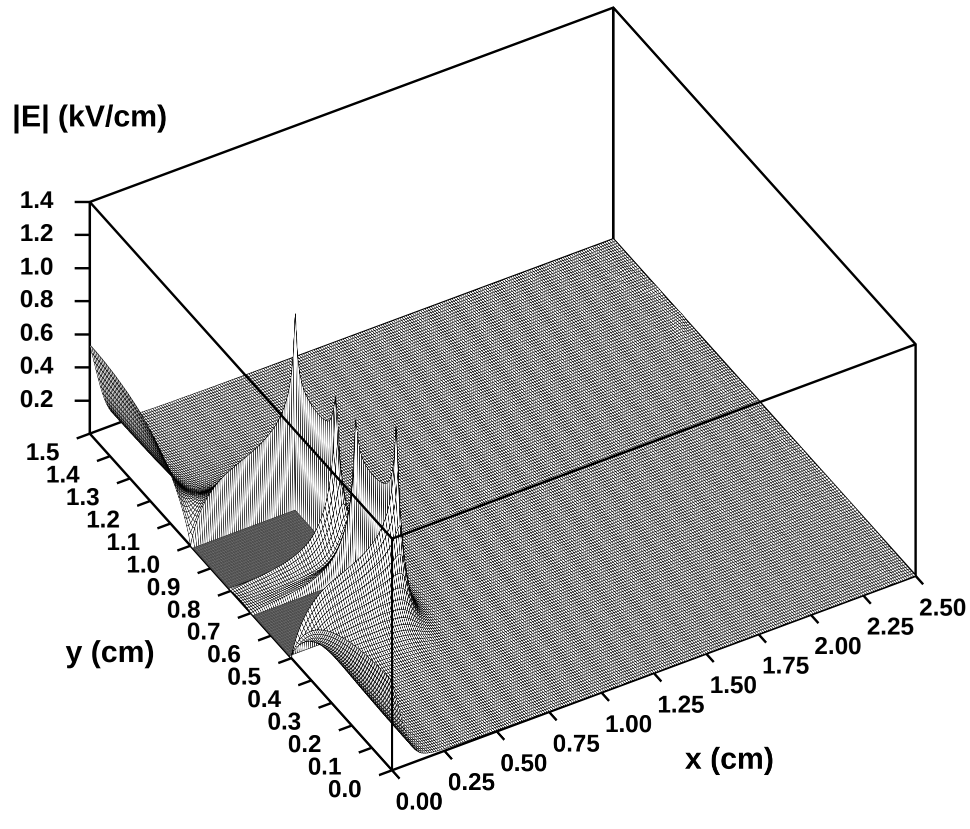

Abbildung 7.8: Verteilung des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ in der Plasmarandschicht und auf der Targetoberfläche.

proportional zu $r^{-1/3} \cdot e^{-r/\lambda_\mathrm{D}}$ und damit deutlich schneller als mit $r^{-1/3}$ ab, weil sich dort bereits die kollektiv abschirmende Eigenschaft der Elektronen bemerkbar macht. Dabei stellt $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e} \epsilon_0 / n_\mathrm{p} e^2}$ die Debye-Länge des Plasmas dar.

Im Vergleich zu den großen Kantenfeldern ist das Feld in der Vorschicht mit Werten um 2 V/cm vernachlässigbar klein. Trotzdem spielt dieses Feld in dem Plasma eine wichtige Rolle, weil es die Ionen in der Vorschicht auf ihre Mindestgeschwindigkeit für den Aufbau der Plasmaschicht beschleunigen. Erst in der eigentlichen Schicht nahe der Targetoberfläche tritt wieder ein nennenswert großes Feld auf, das in der Mitte der beiden Stegstirnflächen etwa 0.7 kV/cm beträgt, während in der Mitte des breiten Grabens immerhin noch über 0.5 kV/cm erreicht werden. Der letztere Wert stimmt in der Größenordnung sehr gut mit dem Betrag des elektrischen Feldes direkt an der Oberfläche eines planaren Targets überein (siehe Kapitel 2).

Während an den konvexen Kanten Spitzenwerte des Feldbetrags erreicht werden, geht das elektrische Feld in der Nähe der konkaven Ecken gegen Null. Auch dieses Verhalten ist in der Elektrostatik bekannt und wird mit der Abhängigkeit $|E| \propto r$ vom Abstand r zur Ecke angegeben [Jackson, 1982]. Man kann sich die Tatsache, daß das Feld direkt in den konkaven Ecken verschwindt, aber auch anschaulich klar machen: Wie aus der Elektrodynamik bekannt ist, ist die Tangentialkomponente des elektrischen Feldes an der Grenzfläche zwischen zwei Medien stetig. Im vorliegenden Fall wird das eine Medium durch ein metallisches Target dargestellt, das überall auf dem gleichen Potential liegt, während das andere Medium das Plasma ist. Da nun im Inneren des Metalls jedes elektrische Feld Null ist, existiert dort auch keine Tangentialkomponente des elektrischen Feldes. Wegen der Stetigkeit der Tangentialkomponente muß dann aber auch auf der Seite des Plasmas jedes tangentiale Feld an der Oberfläche verschwinden. Direkt in der konkaven Ecke sind aber alle Feldkomponenten tangential zu einer der beiden angrenzenden Targetflächen, sodaß dort überhaupt kein elektrisches Feld exisitieren kann.

Wie man anhand der Potentialverteilung in Abbildung 7.5 schon abschätzen konnte, nimmt der Betrag des elektrischen Feldes im Inneren des schmalen Grabens mit zunehmender Tiefe im Graben wieder ab, weil das Potential dort immer flacher verläuft. Dabei tritt entlang der Symmetrielinie des Grabens ($y = 7.5$ mm) an der Stelle $x = 5.1$ mm, also 0.1 mm vor der Grabenöffnung ein Maximum des Feldes von 0.25 kV/cm auf. Dort ist die Beschleunigung der Ionen also maximal und nimmt anschließend im Graben selbst wieder ab, worauf auch schon bei der Diskussion der Ionengeschwindigkeit in Abschnitt 7.3.3 hingewiesen wurde.

7.3.6 Vergleich zu der eindimensionalen Floatingpotential-Randschicht

In diesem Abschnitt soll die Struktur der zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht an ausgewählten Stellen, an denen die Randschicht in guter Näherung eindimensional ist, mit dem Aufbau der eindimensionalen Randschicht aus Kapitel 2 verglichen werden. Dabei sollen im folgenden die Abkürzungen 1D- und 2D-Randschicht für die ein- bzw. zweidimensionale Randschicht verwendet werden. Aus den zweidimensionalen Verteilungen der Teilchendichten n_i und n_e sowie des elektrischen Potentials Φ wurden längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) eindimensionale Verteilungen extrahiert. Diese sind in Abbildung 7.9 zusammen mit den entsprechenden Daten aus der 1D-Randschicht-Simulation dargestellt, wobei letztere der besseren Vergleichbarkeit wegen um die Steghöhe $\Delta x = 0.5\,\mathrm{cm}$ nach rechts verschoben abgebildet wurden. Zunächst fällt auf, daß die Kurven aus der 2D-Randschicht vor dem Steg ($y = 0.6\,\mathrm{cm}$) gute Übereinstimmungen zu den verschoben dargestellten Kurven der 1D-Randschicht haben. Dies trifft sowohl auf die Teilchendichten zu, wo die größten Abweichungen zwischen 5 und 10% betragen, als auch auf das Potential, bei dem der Unterschied maximal 1 V beträgt. Die Positionen der Schichtkante, bei der sich die Ionen- und Elektronendichten in Abbildung 7.9 a) gerade sichtbar zu unterscheiden beginnen, stimmen ebenfalls in beiden Fällen gut überein. Damit zeigt sich, daß die Struktur von 2D-Schicht und Vorschicht vor den Stegen, die die am weitesten in das Plasma hineinragenden Targetkomponenten sind, in sehr guter Näherung durch die eindimensionale Struktur dargestellt werden kann. Im Unterschied dazu zeigen die Teilchendichte- und Potentialkurven der 2D-Randschicht in der Mitte des breiten Grabens (längs $y = 0.0\,\mathrm{cm}$) nur für sehr große Entfernungen vom Target noch Gemeinsamkeiten zu den Kurven aus der 1D-Randschicht. Beginnend bei $x \approx 1.0\,\mathrm{cm}$ zeigt sich außerdem mit zunehmender Annäherung an das Target auch eine wachsende Differenz zu den entsprechenden Kurven vor dem Steg. Dabei reicht die Vorschicht in der Mitte des Grabens ($y = 0.0\,\mathrm{cm}$) nun etwa bis zur Stelle $x = 2.2\,\mathrm{mm}$. Wie Abbildung 7.9 b) zeigt, ist das elektrische Potential an dieser Stelle dort aber bereits um etwa $2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e = 8\,\mathrm{V}$ gegenüber dem Plasmabulk abgefallen. Diese Beobachtung unterstreicht nochmals die Verletzung des Bohmkriteriums, die bereits in Abschnitt 7.3.4 ausführlich behandelt wurde.

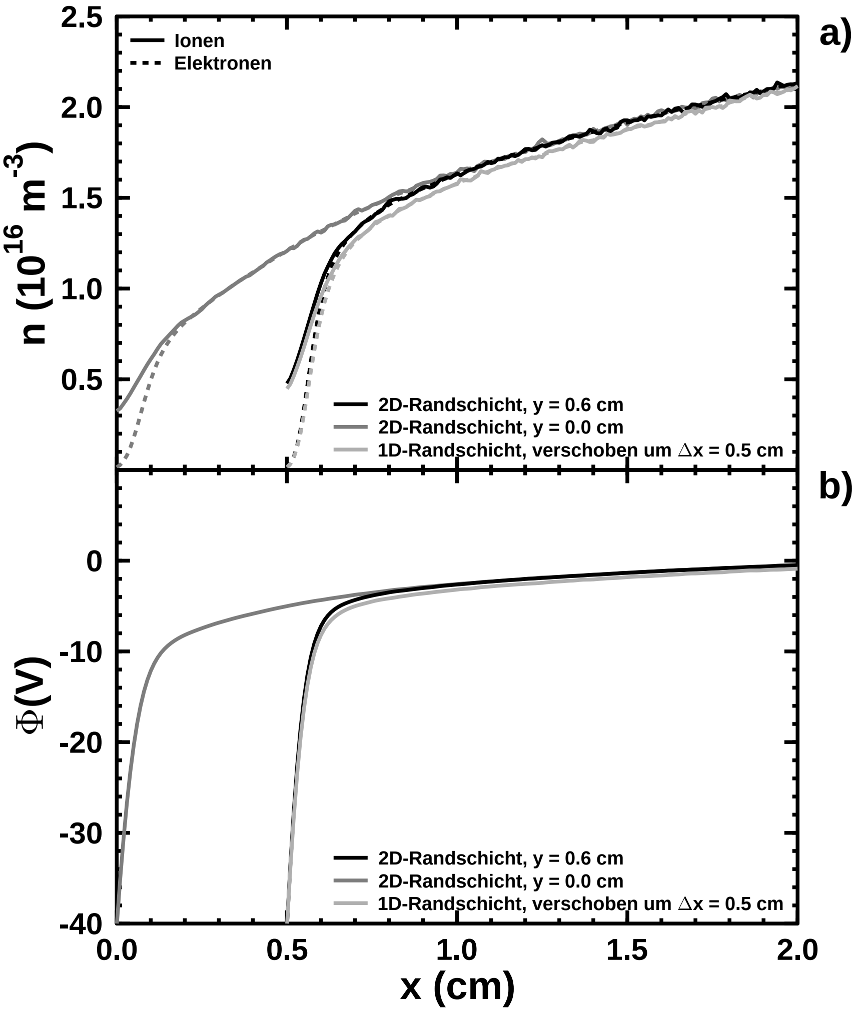

Abbildung 7.9: Vergleichende Darstellung zwischen a) den Ionen- und Elektronendichten n_i, n_e sowie b) des Potentials aus der 2D-Randschicht und den entsprechenden Größen aus der 1D-Randschicht. Die Kurven zu der 2D-Randschicht stellen die Verteilung der Daten längs der Linien $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) und $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) dar. Die Kurven zu der 1D-Randschicht sind der besseren Vergleichbarkeit wegen um die Steghöhe $\Delta x = 0.5\,\mathrm{cm}$ nach rechts verschoben abgebildet.

7.3.7 Vergleich zwischen simulierter und berechneter Potentialverteilung

Bei der Untersuchung der Potentialverteilung von planaren statischen Plasmarandschichten in Kapitel 3 wurde gezeigt, daß eine modifizierte Form des Child-Langmuir-Gesetzes in der Lage ist, die simulierten Potentialverteilungen sehr gut wiederzugeben. Die Modifikationen gegenüber dem Child-Langmuir-Gesetz bestehen darin, daß die Ionen beim Eintritt in die Plasmarandschicht eine Anfangsgeschwindigkeit v_0 haben dürfen und gleichzeitig ein elektrisches Feld E_0 vorhanden sein kann. Das führte schließlich zu dem modifizierten Child-Langmuir-Gesetz, das durch die Formel (3.18) auf Seite 37 dargestellt wird. Im Fall der planaren statischen Plasmarandschichten war dieses Gesetz in der Lage, die simulierten Potentialverteilungen nahezu perfekt zu beschreiben, wenn als Anfangswerte v_0 und E_0 die simulierte Ionengeschwindigkeit bzw. das simulierte elektrische Feld an der Stelle x^* verwendet wurden, an der das simulierte Potential $\Phi(x^*)$ um $2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ gegenüber dem Plasmainneren abgenommen hat.

Ähnlich wie im vorhergehenden Abschnitt sollen jetzt die Verteilungen, die aus der simulierten Potentialverteilung längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) gewonnen wurden, mit den Vorhersagen des modifizierten Child-Langmuir-Gesetzes verglichen werden. Dazu wurde zunächst in diesen beiden Verteilungen jeweils die Stelle x^* gesucht, wo $\Phi(x^*) = -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ gilt. Anschließend wurden dort jeweils die x-Komponente der simulierten Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{x}(x^*)$, der Ionenstromdichte $j_\mathrm{x}(x^*)$ sowie des elektrischen Feldes $E_\mathrm{x}(x^*)$ abgelesen und als Parameter v_0, j_0 bzw. E_0 in das modifizierten Child-Langmuir-Gesetz eingesetzt. Tabelle 7.1 enthält diese Daten in zusammengefaßter Form. Die unter Verwendung der Gleichung (3.18) berechneten Potentialverteilungen sind in Abbildung 7.10 zusammen mit den Verteilungen aus der Simulation dargestellt. Wie man in der Abbildung sehen kann, folgt die Potentialverteilung in der Randschicht vor dem Steg ($y = 0.6\,\mathrm{cm}$) noch gut dem Verlauf, der durch das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz vorhergesagt wird. Die Übereinstimmung ist jedoch nicht mehr so gut wie im Fall der planaren Plasmarandschichten,

Tabelle 7.1: Zusammenfassung der x-Komponenten der simulierten Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{x}(x^*)$, der Ionenstromdichte $j_\mathrm{x}(x^*)$ sowie des elektrischen Feldes $E_\mathrm{x}(x^*)$ an der Stelle x^*, wo $\Phi(x^*) = -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ gilt. Die Daten wurden längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) aus den simulierten zweidimensionalen Verteilungen gewonnen und als Parameter v_0, j_0 bzw. E_0 in das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz eingesetzt.

y	x^*	$j_\mathrm{x}(x^*)$	$v_\mathrm{x}(x^*)$	$E_\mathrm{x}(x^*)$
0.0 cm	0.70 mm	7.52 A/m^2	−9035 m/s	−17693 V/m
0.6 cm	5.48 mm	10.47 A/m^2	−9312 m/s	−31220 V/m

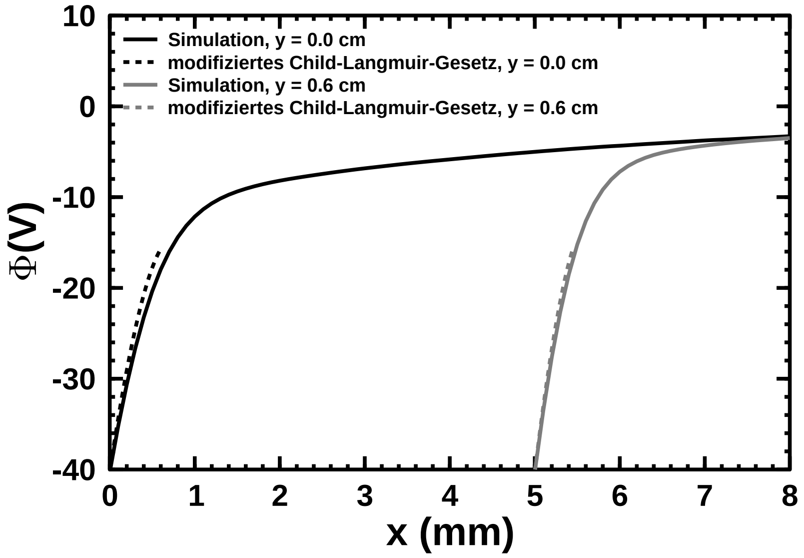

Abbildung 7.10: Vergleich zwischen den Verteilungen, die aus der simulierten Potentialverteilung längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) gewonnen wurden, und den nach dem modifizierten Child-Langmuir-Gesetz berechneten Verteilungen. Als Parameter für die Berechnungen dienten die Werte aus Tabelle 7.1.

die in Kapitel 3 behandelt wurden. Das rührt daher, daß die simulierte Potentialverteilung auch vor den Stegen nur näherungsweise planar aufgebaut ist und daher keine perfekte Beschreibung durch das Child-Langmuir-Gesetz erwartet werden kann. In der Mitte des breiten Grabens weicht die Vorhersage des modifizierten Child-Langmuir-Gesetzes noch mehr von den simulierten Daten ab, obwohl beide qualitativ den gleichen Verlauf aufweisen. Ein Blick in Abbildung 7.9 zeigt die Ursache für diese Abweichung: Aufgrund der Divergenz des Ionenstroms im Inneren des Grabens, die zu der in Abschnitt 7.3.4 beschriebenen Verletzung des Bohmkriteriums führt, liegt das elektrische Potential an der Schichtkante etwa bei $-8\,\mathrm{V}$ und damit deutlich unter $-k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$. An der Stelle, wo das elektrische Potential den Wert $-2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ erreicht, beträgt die Elektronendichte daher immer noch beinahe 60% der Ionendichte. Da aber auch das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz von der Annahme ausgeht, daß sich nur Ionen in der Schicht befinden, kann keine bessere Übereinstimmung erwartet werden.

7.4 Strom- und Winkelverteilung der Ionen auf der Targetoberfläche

In diesem Abschnitt soll nun untersucht werden, wie die Ionenströme auf die Targetoberfläche verteilt sind und unter welchen Winkeln die Ionen das Target treffen.

7.4.1 Verteilung der Ionenströme auf der Targetoberfläche

Für die Verteilung der Ionenströme auf dem Target spielt das elektrische Feld in der Schicht und direkt an der Targetoberfläche eine entscheidende Rolle. Je nach Betrag und Orientierung des Feldes werden die Ionen nämlich auf ihrem Weg zum Target mehr oder weniger aus ihrer ursprünglich zur x-Achse parallelen Bewegung abgelenkt, bevor sie auf das Target treffen. Dadurch wächst der Ionenstrom an manchen Stellen des Targets stark über die eingekoppelte Stromdichte von $9.86\,\mathrm{A/m^2}$ an, während andere Stellen kaum von Ionen getroffen werden. Das ist in Abbildung 7.11 sehr schön zu sehen, in der die Verteilung der Ionenstromdichte j_i auf dem Target dargestellt ist. Wie man in der Abbildung sehr gut erkennen kann, kommt es durch das starke elektrische Feld an den konvexen Kanten der beiden Stegvorderseiten zu einem Absaugeffekt der Ionen. Dadurch entstehen die abgebildeten Stromdichtemaxima, die direkt an den äußeren Kanten der Stegstirnflächen Werte von $13.0\,\mathrm{A/m^2}$ annehmen. An den inneren Kanten dieser Flächen werden aufgrund der etwas geringeren Feldstärken immerhin noch $10.8\,\mathrm{A/m^2}$ erreicht. Das lokale Minimum des Stromes in der Mitte der Stegvorderseiten entspricht dem lokalen Minimum des elektrischen Feldes dort (siehe Abbildung 7.8). Diejenigen Ionen, die die Stege an deren Stirnflächen nur knapp passieren, werden durch die Kantenfelder ebenfalls in Richtung der jeweiligen Stege abgelenkt. Aufgrund ihrer Trägheit treffen sie die Stegseitenflächen jedoch in geringen Entfernungen von den Kanten. Auf den Stegaußenseiten stellen sich dadurch Stromdichtemaxima von etwa $7.7\,\mathrm{A/m^2}$ in den Entfernungen

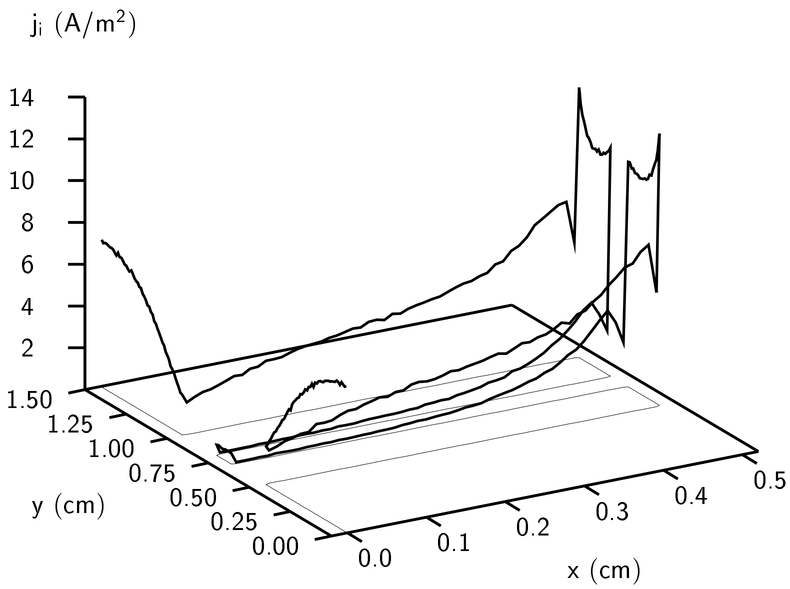

Abbildung 7.11: Verteilung der Ionenstromdichte j_i auf dem Target. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Targetoberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

$0.15 \pm 0.05\,\mathrm{mm}$ von den Kanten ein. Auf den Innenseiten des schmalen Grabens liegen die Maxima $0.25 \pm 0.05\,\mathrm{mm}$ von den Kanten entfernt und erreichen nur noch Werte von $3.8\,\mathrm{A/m^2}$. Die leichte Abwärtsverschiebung der Strommaxima auf den Seitenwänden ist eng verwandt mit dem aus der Sondentheorie bekannten Effekt der Orbitalbewegung geladener Plasmateilchen um eine kugelförmige Sonde herum [Huddlestone und Leonard, 1965; Lochte-Holtgreven, 1968]. Danach kann ein Teilchen, das in das Zentralfeld der geladenen Sonde hinein gelangt, aufgrund seiner Drehimpulserhaltung nicht einfach den Feldlinien folgen und wird daher bei hinreichend großem Drehimpuls an der Sonde vorbeifliegen. Im vorliegenden Fall kommt dem Coulomb-Feld um die Kante herum die Bedeutung dieses Zentralfeldes zu. Es sei noch bemerkt, daß das Auftreten solcher lokaler Strommaxima in einer gewissen Entfernung von Kanten auch schon in früheren fluiddynamischen Simulationen beobachtet wurde, dort aber als numerisches Artefakt interpretiert wurde [Hong und Emmert, 1994]. Auf dem übrigen Target folgt der Verlauf der Ionenstromdichte qualitativ im wesentlichen dem des elektrischen Feldes an der Targetoberfläche, wie ein Vergleich zwischen den Abbildungen 7.8 und 7.11 deutlich erkennen läßt. Aufgrund des verschwindenden elektrischen Feldes in den konkaven Ecken erreichen dort besonders wenige Ionen das Target. An den konkaven Ecken des schmalen Grabens werden daher nur Wandstromdichten von $0.1\,\mathrm{A/m^2}$ erreicht. Der Boden des schmalen Grabens selbst wird aber sehr gleichmäßig verteilt von Ionen mit der Stromdichte $j_\mathrm{i} = 0.5\,\mathrm{A/m^2}$ getroffen. Dagegen zeigt der Boden des breiten Grabens mit $1.9\,\mathrm{A/m^2}$ in den Ecken und $7.0\,\mathrm{A/m^2}$ in der Mitte eine starke Variation des Ionenstroms.

Neben der detaillierten Verteilung des Ionenwandstroms j_i auf dem Target ist auch die mittlere Verteilung $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ auf den einzelnen Segmentflächen des Targets, wie Stegstirnflächen, Stegseitenflächen und die beiden Grabenböden, aufschlußreich. Für diese kann man eine einfache Abschätzung durchführen, bei der man annimmt, daß der aus dem Plasmabulk kommende Ionenstrom der Dichte $j_0 = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ innerhalb der Gräben gleichmäßig auf die Seiten- und Bodenflächen verteilt wird. Die zugehörige Stromdichte muß dabei durch die Aufteilung auf mehrere Flächen zwar abnehmen, soll jedoch auf allen Flächen des jeweiligen Grabens gleich groß sein. Im Fall des breiten Grabens, in dessen Innerem die mittlere Stromdichte mit j_G bezeichnet werden soll, gilt beispielsweise folgende Beziehung:

$$j_\mathrm{G} = j_0 \cdot \frac{b}{b + 2h}. \tag{7.12}$$

In dieser Gleichung hat h die Bedeutung der Grabentiefe oder Steghöhe und b stellt die Breite des breiten Grabens dar. Diese Bezeichnungen stimmen mit den in Abbildung 7.1 verwendeten überein. Auf den Stegstirnflächen sollte die Stromdichte dagegen stets $\langle j_\mathrm{i} \rangle = j_0$ betragen, da sich dort die Ionen nicht auf mehrere Flächen aufteilen müssen. Eine skizzenhafte Darstellung des eben beschriebenen Modells ist in Abbildung 7.12 zu sehen. Tabelle 7.2 zeigt nun einen Vergleich zwischen den nach diesem einfachen Modell berechneten Stromdichten und den simulierten mittleren Stromdichten auf den einzelnen Segmentflächen des Targets. Aufgrund des großen elektrischen Feldes an den Kanten der Stegstirnflächen erhalten diese in der Simulation Ströme, die mit einer Dichte von

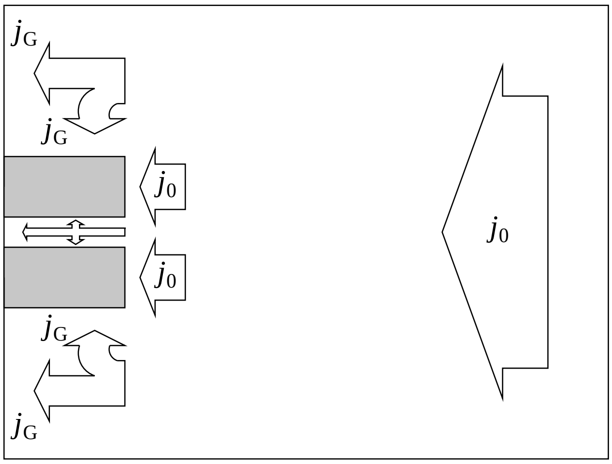

Abbildung 7.12: Darstellung der Aufteilung des eingekoppelten Ionenstroms der Dichte j_0 in einen Strom der Dichte j_0 auf die Stegstirnflächen, Ströme auf die Wände des breiten Grabens, die die Dichte j_G haben und Ströme auf die Wände des schmalen Grabens. Im Fall des schmalen Grabens wurde aus Platzgründen auf die Angabe einer Bezeichnung für die Ströme im Grabeninneren verzichtet.

$10.87\,A/m^2$ etwa 10% höher sind als erwartet wird. Das macht nochmals den durch die Kantenfelder verursachten Absaugeffekt auf diese Flächen deutlich. Von den Ionen, die in den breiten Graben eindringen, können weniger Teilchen als erwartet auf die Seitenflächen abgelenkt werden. Der Grund dafür ist zum einen die Massenträgheit der Ionen und zum anderen die Tatsache, daß nicht überall im Grabeninneren ein transversales Feld in Richtung der Seitenflächen existiert. Dementsprechend erreichen mit $5.20\,A/m^2$ Stromdichte etwa 5% mehr Ionen als erwartet den Boden des breiten Grabens. Die Seiten- und Bodenflächen des schmalen Grabens werden schließlich insgesamt viel seltener von Ionen getroffen als es nach dem einfachen Modell vorhergesagt wird. Auch dieser Effekt ist darauf zurückzuführen, daß viele der Ionen, die im feldfreien Raum in den Graben eindringen würden, durch die Kantenfelder auf die Stegstirnflächen abgelenkt werden.

Tabelle 7.2: Vergleich zwischen berechneten und simulierten mittleren Stromdichten $\langle j_i \rangle$ auf den einzelnen Segmentflächen des Targets.

Segmentflächen des Targets	$\langle j_i \rangle$ berechnet (A/m^2)	$\langle j_i \rangle$ simuliert (A/m^2)
Stegstirnflächen	9.86	10.87
Seitenflächen breiter Graben	4.93	3.96
Bodenfläche breiter Graben	4.93	5.20
Seitenflächen schmaler Graben	0.90	0.82
Bodenfläche schmaler Graben	0.90	0.52

Dabei treffen jedoch die meisten der Ionen, die trotz der ablenkenden Kantenfelder doch noch in den Graben eindringen können, irgendwann auf ihrem Weg eine der Seitenwände. Das hat zum einen seinen Grund in dem Aspektverhältnis von 5 : 1, das das Verhältnis zwischen Tiefe und Breite des schmalen Grabens angibt: Selbst ein Ion, das nur schwach von seiner anfangs zur x-Achse parallelen Richtung abgelenkt wird, trifft wegen des hohen Aspektverhältnisses trotzdem irgendwo eine Seitenwand. Zum anderen gibt es gerade am Eingang des Grabens noch ein relativ großes transversales Feld, das die Ionen durch die Seitenflächen absaugt. Das erklärt, warum nur etwa 58% der nach dem einfachen Modell in erster Näherung erwarteten Anzahl von Ionen den Boden des schmalen Grabens tatsächlich erreichen.

Insgesamt zeigen die Untersuchungen, daß der lokale Ionenstrom in einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht starken Variationen auf der Targetoberfläche unterliegt und keineswegs als konstant angesehen werden kann. Gerade bei der Herstellung von dünnen Schichten auf Oberflächen spielt jedoch die Konformität der Ionenstromdichte auf der Target- oder Substratoberfläche eine große Rolle. Bei einer plasmagestützten Variante der IBAD-Methode (Ion Beam Assisted Deposition) beispielsweise kann man durch gezielten Beschuß einer aufwachsenden Schicht mit niederenergetischen Edelgas-Ionen erreichen, daß die Qualität der Schicht deutlich verbessert wird [Thornton, 1986; Müller, 1987]. Dazu ist es jedoch im Sinne einer überall gleichen Schichtqualität erforderlich, daß auch die Ionenstromdichte auf der Substratoberfläche möglichst homogen ist. Daneben ist eine homogene Ionenstromdichte auch bei der Technik der Plasmaimmersions-Ionenimplantation und Deposition (PIIID) erforderlich, wo man zwischen den Hochspannungspulsen eine Opferschicht abzuscheiden versucht, die in den nachfolgenden Pulsen zu einer deutlichen Steigerung der zurückbehaltenen Ionendosis in der Targetoberfläche führt, weil die Zerstäubung sich im wesentlichen auf die Opferschicht beschränkt [Clapham und Whitton, 1992; Anders *et al.*, 1995; Anders, 2000]. Die hier durchgeführten Untersuchungen zeigen deutlich, mit welchen Problemen diese Techniken zu kämpfen haben. Eine weiterführende Untersuchung zu diesem Thema wird in Kapitel 11 in dieser Arbeit durchgeführt.

7.4.2 Ablenkwinkel der Ionentrajektorien und Aufschlagwinkel der Ionen auf der Targetoberfläche

Durch das in der Schicht und an der Targetoberfläche herrschende elektrische Feld kommt es zur Ablenkung der Ionen aus ihrer anfänglichen Trajektorienrichtung, die bei Eintritt in das Simulationsgebiet im Mittel längs der negativen x-Achse orientiert war. Als Folge des unterschiedlich großen Feldes mit verschiedenen Richtungen ergibt sich auf der Targetoberfläche eine Verteilung der relativ zur x-Achse gemessenen Ionenablenkwinkel ϑ_{x}, die eine starke Variation entlang der Oberfläche des Targets aufweist. Die in der Simulation beobachteten mittleren Beträge der Ablenkwinkel sind in Abbildung 7.13 zu sehen. Darin erkennt man, daß unter dem Einfluß des starken Feldes an den konvexen Kanten auf den Stegstirnflächen eine zunehmende Ablenkung der Ionen stattfinden, die sich auf den Außenseiten der beiden Stege (Seitenwände des breiten Grabens) fortsetzt. Der maximale Winkel beträgt dabei $\vartheta_{\mathrm{x}} = 57°$ und tritt genau in der Mitte der Außenseiten bei $x = 0.25\,\mathrm{cm}$ auf. Dieses Maximum ist darauf zurückzuführen, daß dort solche Ionen auftreffen, die nahe genug an der Außenseite mit ihrem transversalen Feld (einschließlich dem starken Kantenfeld an der Stirnfläche) entlang geflogen sind und dabei beim Eintritt in den breiten Graben gleichzeitig hinreichend weit entfernt waren, um durch die zunehmende Ablenkung ihrer Trajektorien nicht zu früh und damit unter einem flachen Winkel auf die Wand zu treffen. Dieses Schicksal erfahren die Ionen, die zu nahe außen an den Stirnseiten vorbeifliegen und dann unter dem Einfluß der starken Kantenfelder sofort auf die Wand treffen. Längs der Bahnen solcher Ionen, die dagegen weit entfernt von den Außenwänden in den breiten Graben eindringen, ist das transversale Feld bereits so schwach, daß die Ionen nur noch schwach abgelenkt werden und daher ebenfalls wieder flacher auf die Seitenwände treffen. Zudem nimmt das Feld zu den konkaven Ecken hin ab, wodurch die Ablenkung ebenfalls abnimmt. Auf der Bodenfläche des breiten Grabens fallen die Winkel zur Mitte des Grabens hin dann noch weiter ab, weil das Feld dort zunehmend wieder parallel zur x-Achse gerichtet sind. In der Mitte wird schließlich ein lokales Minimum von $\vartheta_{\mathrm{x}} = 2.8°$ angenommen. Ganz analog nimmt der Winkel ϑ_{x} auf den Seitenwänden des schmalen Grabens mit zunehmender Tiefe im Graben zunächst auf über 24° bei $x = 0.44\,\mathrm{cm}$ zu, um anschließend beinahe linear auf etwa 9° an den konkaven Ecken wieder abzufallen. Auch hier ist das Maximum wieder durch das Kantenfeld und

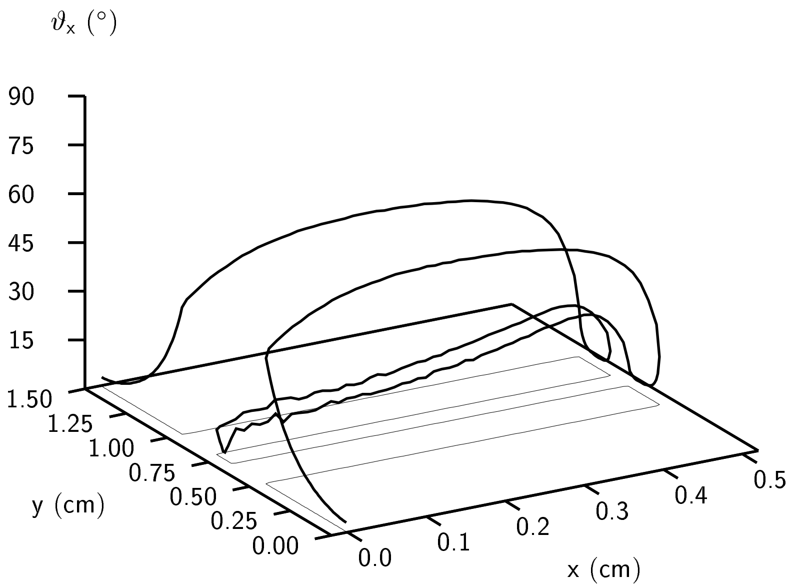

Abbildung 7.13: Verteilung des Betrags der relativ zur x-Achse gemessenen Ionenablenkwinkel ϑ_{x} auf der Targetoberfläche. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Targetoberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

das noch relativ große transversale Feld im oberen Bereich des Grabens zu erklären, das nach unten hin schnell abnimmt. Der Boden des schmalen Grabens zeigt eine V-förmige Verteilung mit einem Minimum von $\vartheta_x = 2.2°$ in der Mitte. Die minimalen Ablenkwinkel in der Mitte der beiden Gräben sowie in der Mitte der beiden Stege, wo $\vartheta_x = 3.4°$ erreicht werden, sind vergleichbar zu den Ionenaufschlagwinkeln in der eindimensionalen Floatingpotential-Randschicht (siehe Kapitel 2).

Neben den Ablenkwinkeln der Ionen aus ihrer ursprünglichen Richtung sind besonders die lokal zur jeweiligen Flächennormale gemessenen Aufschlagwinkel ϑ der Ionen auf die Targetoberfläche interessant, weil diese das Maß der Zerstäubung der Targetoberfläche entscheidend mitbestimmen. Bei den Energien von etwa 40 eV, die die Argon-Ionen in der Floatingpotential-Randschicht maximal erreichen können, liegt beispielsweise die Zerstäubungsausbeute Y_0 bei senkrechtem Beschuß eines Kupfer-Targets in der Größenordnung von $Y_0 = 0.1$ Kupfer-Atomen pro Argon-Ion [Behrisch, 1981; Nastasi *et al.*, 1996]. Mit zunehmendem Einfallswinkel treten die Ionen aber immer flacher in das Target ein, sodaß deren Energie näher an der Targetoberfläche deponiert wird. Als Folge davon nimmt die Zerstäubungsausbeute Y mit zunehmendem Winkel ϑ immer mehr zu und erreicht bei $\vartheta \approx 60 - 70°$ schließlich ein Maximum von Y/Y_0 zwischen 3 und 4. Damit erreicht die Zerstäubungsausbeute eine Größenordnung, die gerade bei andauerndem Ionenbeschuß wie in der Gleichgewichts-Randschicht, zu einem nennenswerten Abtrag der Targetoberfläche führen kann. In Abbildung 7.14 sind nun die Ionen-Aufschlagwinkel ϑ bezogen auf die jeweilige Flächennormale der Targetoberfläche dargestellt. Während sich

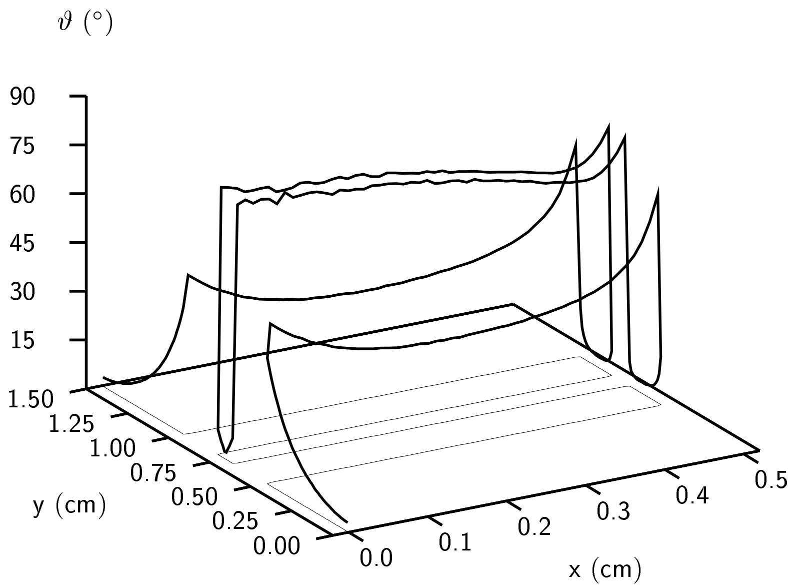

Abbildung 7.14: Verteilung des Betrags der Ionen-Aufschlagwinkel ϑ bezogen auf die jeweilige Flächennormale der Targetoberfläche. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Targetoberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

bei den Winkeln auf den Grabenböden und auf den Stegstirnflächen gegenüber Abbildung 7.13 nichts ändert, kommt es auf den Seitenflächen der beiden Gräben zu einem Sprung von ϑ_x auf $\vartheta = 90° - \vartheta_\mathrm{x}$. Damit liegen die Aufschlagwinkel der Ionen auf den Seitenflächen des breiten Grabens zwischen 65° an der Grabenöffnung und 33° in der Mitte der Flächen. Zum Grabenboden hin werden immerhin noch 51° erreicht. Noch drastischer fallen die Winkel auf den Seitenflächen des schmalen Grabens zwischen den Stegen aus. An der Grabenöffnung betragen sie etwas mehr als 76°, erreichen dann bei $x = 0.44\,\mathrm{cm}$ ihr Minimum von über 65° und steigen anschließend auf bis zu 81° in der Nähe des Grabenbodens wieder an. In beiden Fällen werden im Bereich der Strommaxima auf den Seitenwänden (siehe Abbildung 7.11) Winkel erreicht, die mit $\vartheta \approx 57°$ bei dem breiten Graben und $\vartheta \approx 69°$ bei dem schmalen Graben gerade in der genannten Größenordnung liegen, wo die Zerstäubungsausbeute maximal wird. Mit der Teilchendichte $n_\mathrm{Cu} = 8.45 \cdot 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ von festem Kupfer [Kopitzki, 1989], einer vorsichtig angenommenen Zerstäubungsausbeute von $Y = 0.2$ und den Werten der Strommaxima auf den Seitenwänden von $j_\mathrm{i} = 7.7\,\mathrm{A/m}^2$ und $j_\mathrm{i} = 3.8\,\mathrm{A/m}^2$ lassen sich die Zerstäubungsraten an diesen Stellen des Targets nach der Gleichung

$$Z = \frac{j_\mathrm{i} \cdot Y}{e \cdot n_\mathrm{Cu}} \tag{7.13}$$

zu $Z = 1.14\,\mathrm{Å/s}$ bzw. $Z = 0.56\,\mathrm{Å/s}$ berechnen. Nimmt man für die Dicke einer Monolage in dem Kupfer-Target näherungsweise den Wert $n_\mathrm{Cu}^{-1/3} = 2.28\,\mathrm{Å}$ an, dann betragen diese Zerstäubungsraten umgerechnet etwa $Z = \frac{1}{2}$ Monolage/s und $Z = \frac{1}{4}$ Monolage/s.

7.5 Zusammenfassung

Die Untersuchung der Eigenschaften einer zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht in diesem Kapitel hat eine ganze Menge neuer Phänomene erkennen lassen, die über die Physik einer eindimensionalen Randschicht hinaus gehen. Als wichtigste der neuen Ergebnisse sind zu nennen, daß das Bohmkriterium in seiner bisherigen Form erweitert werden muß, um die Schichtkante zu charakterisieren. Das Plasma ist in der Lage, in einen Graben des Targets einzudringen, sobald die Grabenbreite deutlich größer ist als die typische Schichtdicke des Plasmas. Aufgrund der Krümmung von Schicht und Vorschicht und der damit einhergehenden Divergenz des Ionenstroms im Inneren des Grabens ist die Bildung einer Plasmaschicht aber erst möglich, wenn die Ionen Driftgeschwindigkeiten erreichen, die zum Teil deutlich über der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}}$ liegen. Die erforderliche Mindestgeschwindigkeit nimmt dabei mit wachsender Divergenz $\frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x}$ des Ionenstroms zu. Gleichzeitig bedeutet diese Erweiterung des Bohmkriteriums, daß die Plasmadichte entlang der Schichtkante des Plasmas nicht mehr konstant ist, sondern stark variieren kann. Weiterhin hat sich gezeigt, daß die Struktur von Schicht und Vorschicht vor den Stegen, die die am weitesten in das Plasma ragenden Targetkomponenten darstellen, sehr gut mit dem Aufbau einer planaren Plasmarandschicht übereinstimmt. Schließlich hat die Analyse der lokalen Wandstromdichte und der Aufschlagwinkel der Ionen auf die Targetoberfläche ergeben, daß eine Nutzung zur Abscheidung von Schichten zu inhomogenen Schichtdicken führen würde.

Kapitel 8

PIII an einem zweidimensionalen Target

8.1 Einleitung

In Kapitel 7 wurden die Eigenschaften einer Floatingpotential-Randschicht in der Nähe eines zweidimensionalen Targets untersucht, das aus einer periodischen Folge von Stegen und Gräben aufgebaut ist. Die Stege, die eine Breite von jeweils 2 mm haben und 5 mm hoch sind, sind paarweise im Abstand von 1 mm angeordnet. Dadurch entsteht zwischen jedem Stegpaar jeweils ein schmaler Graben der Breite 1 mm und der Tiefe 5 mm. Gleichzeitig befinden sich die Stegpaare untereinander in einem Abstand von 1 cm, wodurch zwischen zwei Stegpaaren jeweils noch ein breiter Graben der Breite 1 cm und der Tiefe 5 mm entsteht. Eine Darstellung der Targetgeometrie ist in skizzierter Form in der Abbildung 7.1 auf Seite 95 zu finden. Die Plasmaimmersions-Ionenimplantation an periodischen Graben- und Stegstrukturen wurde bereits mit Hilfe von Computersimulationen untersucht [Sheridan, 1995; Sheridan, 1996]. Obwohl sich in Kapitel 7 bei der Analyse der Floatingpotential-Randschicht in der Nähe solcher Strukturen gezeigt hat, daß die Ionendichte im Inneren der Gräben räumlich nicht konstant ist, wurde in diesen Untersuchungen jedoch immer davon ausgegangen, daß die Ionen überall homogen verteilt sind und stets die gleiche Dichte wie im Plasmabulk haben. Außerdem wurde als Startkonfiguration stets ein System von Ionen gewählt, bei dem alle Teilchen in Ruhe sind. Tatsächlich liegt jedoch ein Target, das in ein Plasma eingetaucht wird, zunächst immer auf dem gegenüber dem Plasmabulk negativen Floatingpotential. Dadurch entwickelt sich in der Nähe der Targetoberfläche eine Floatingpotential-Randschicht, in der die Ionen in Richtung auf das Target driften und dabei deren Dichte räumlich variiert. In diesem Kapitel sollen die oben genannten Untersuchungen nun dahingehend vertieft werden, daß ausgehend von einer Floatingpotential-Randschicht untersucht wird, wie sich das Plasma bei Anlegen einer negativen Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$ an das Target verhält. Als Startkonfiguration dient dabei die in Kapitel 7 vorgestellte Floatingpotential-Randschicht.

8.2 Struktur der Matrixschicht

Durch Umschalten des Targetpotentials zum Zeitpunkt $t = 0$ vom Wert des Floatingpotentials $-40.285\,\mathrm{V}$ auf $-1000\,\mathrm{V}$ kommt es, wie im eindimensionalen Fall, zu einem Zurückweichen der Elektronen auf der Zeitskala der inversen Elektronenplasmafrequenz von ${\omega_{\mathrm{p,e}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{e}/n_\mathrm{p} e^2)^{1/2} = 0.13\,\mathrm{ns}$. Dabei wurde bei der Berechnung für die Plasmadichte der Wert $n_\mathrm{p} = 2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ verwendet. Die Verteilung der Elektronendichte zum Zeitpunkt $t = 10\,\mathrm{ns}$ nach Einschalten der Hochspannung ist in Abbildung 8.1 zu sehen. Da die Ionen erst deutlich später, nämlich auf der Zeitskala der inversen Ionenplasmafrequenz von ${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{i}/n_\mathrm{p} e^2)^{1/2} = 34\,\mathrm{ns}$ auf den Potentialsprung reagieren, stimmt ihre Verteilung zu dem Zeitpunkt, für den die Elektronendichte dargestellt ist, noch mit der Gleichgewichtsverteilung in der Floatingpotential-Randschicht überein (siehe Abbildung 7.2 auf Seite 97). Der Bereich, in dem die Elektronendichte in Abbildung 8.1 bereits auf

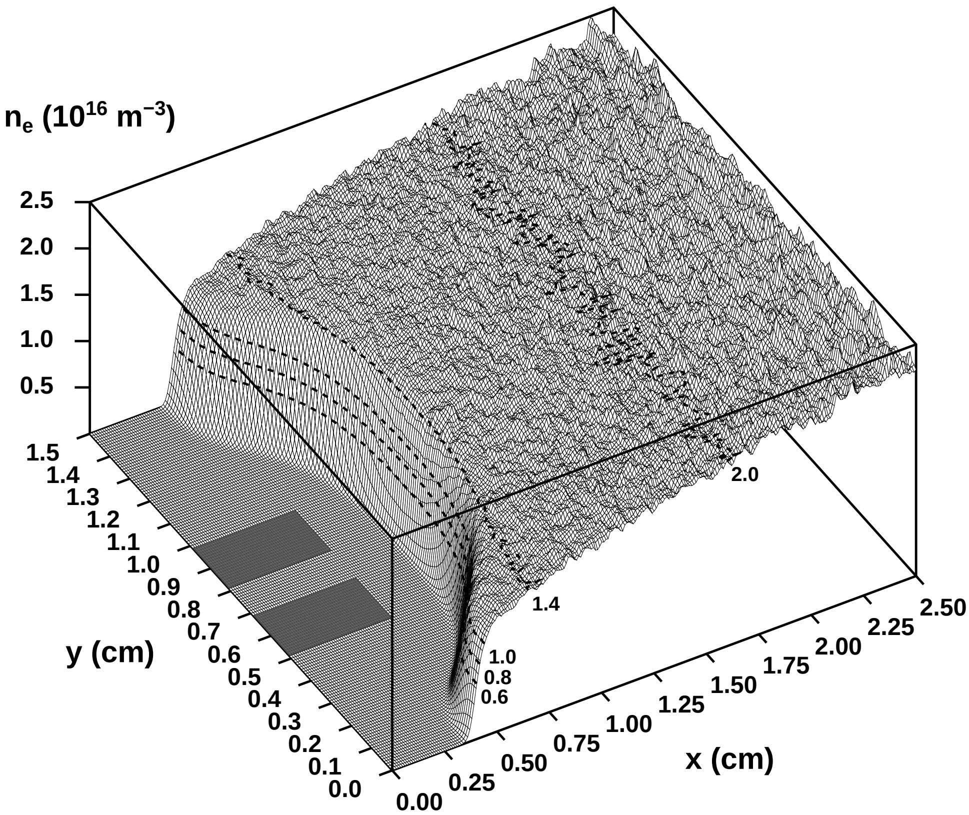

Abbildung 8.1: Elektronendichte-Verteilung in der simulierten Matrixschicht 10 ns nach Einschalten der Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien der Elektronendichte dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

Null abgenommen hat, wird anfangs also noch von Ionen bevölkert, deren Dichte sich in der Größenordnung von $n_\mathrm{i} = 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ bewegt. Dieser Bereich, der nach Abbildung 8.1 vor den beiden Stegen annäherend die Gestalt eines Zylinders um die Stege herum besitzt, stellt daher die Matrixschicht dar. Das Zentrum dieses Zylinders liegt dabei in der Mitte des schmalen Grabens bei $(x, y) = (0.25\,\mathrm{cm}, 0.75\,\mathrm{cm})$. Der Radius der zylindrischen Matrixschicht läßt sich näherungsweise bestimmen, indem man die Positionen mißt, an denen die Elektronendichte auf 1% der Plasmadichte von $n_\mathrm{p} = 2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ abgenommen hat. Als Ergebnis dieser Untersuchung findet man einen Radius von $r_\mathrm{s} = 5.2 \pm 0.3\,\mathrm{mm}$ und eine Matrixschichtdicke von 2.4 mm direkt vor den Stegstirnflächen.

Mit Hilfe der Poisson-Gleichung in Zylinderkoordinaten,

$$\frac{d^2\Phi}{dr^2} + \frac{1}{r}\frac{d\Phi}{dr} = -\frac{\rho}{\epsilon_0}, \tag{8.1}$$

und der Annahme einer homogenen positiven Ionen-Raumladungsdichte von $\rho = en_\mathrm{i}$ in der Matrixschicht läßt sich die Potentialverteilung um ein zylindrisches Target mit dem Radius r_0 berechnen, die den Randbedingungen $\Phi(r_0) = \Phi_0$ und $\left.\frac{d\Phi}{dr}\right|_{r_\mathrm{s}} = 0$ genügt [Conrad, 1987]:

$$\Phi(r) = \Phi_0 + \frac{n_\mathrm{i}e}{2\epsilon_0}\left[{r_\mathrm{s}}^2 \ln\frac{r}{r_0} - \frac{1}{2}\left(r^2 - {r_0}^2\right)\right],\ r_0 \le r \le r_\mathrm{s}. \tag{8.2}$$

Benutzt man für den Potentialabfall innerhalb der Matrixschicht den Ausdruck $\Delta\Phi = \Phi(r_\mathrm{s}) - \Phi_0$, dann findet man als Bestimmungsgleichung für den Radius r_s der Matrixschicht die transiente Beziehung:

$$\frac{{s_0}^2}{{r_0}^2} = \frac{{r_\mathrm{s}}^2}{{r_0}^2}\ln\frac{r_\mathrm{s}}{r_0} + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{{r_\mathrm{s}}^2}{{r_0}^2}\right). \tag{8.3}$$

Darin stellt $s_0 = (2\epsilon_0\Delta\Phi/en_\mathrm{i})^{1/2}$ den Ausdruck für die Dicke einer planaren Matrixschicht dar. Verwendet man nun für die Ionendichte in der Matrixschicht vor den Stegen, ähnlich wie im eindimensionalen Fall (siehe Abschnitt 4.4), einen mittleren Wert von $n_\mathrm{i} = 1.2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ und setzt man für den Potentialabfall $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$ ein, dann erhält man zunächst $s_0 = 3.03\,\mathrm{mm}$. Zusammen mit einem Targetradius von der Größe der halben Steghöhe, $r_0 = 2.5\,\mathrm{mm}$, läßt sich der erwartete Radius der zylindrischen Matrixschicht nach Gleichung (8.3) zu $r_\mathrm{s} = 2.0696 \cdot r_0 = 5.17\,\mathrm{mm}$ berechnen. Trotz der Tatsache, daß die beiden Stege in Wirklichkeit gar kein zylindrisches Target darstellen, stimmt dieses Ergebnis sehr gut mit dem Radius von der simulierten Matrixschicht von 5.2 mm überein.

In der Mitte des breiten Grabens schließlich, wo die Matrixschicht eher wieder eine planare Struktur besitzt, beträgt ihre Dicke etwa 3.5 mm. Dies entspricht dem Wert $s_0 = (2\epsilon_0\Delta\Phi/en_\mathrm{i})^{1/2}$ einer planaren Matrixschicht, in der die Ionen eine homogene Dichte von $n_\mathrm{i} = 9 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ haben. Bei der Diskussion der Floatingpotential-Randschicht in Kapitel 7 wurde gezeigt, daß die Ionendichte im Inneren des breiten Grabens tatsächlich in dieser Größenordnung liegt.

Zum Abschluß der Untersuchung der Matrixschicht sind in den Abbildungen 8.2 und 8.3 die Verteilungen des Potentials Φ sowie des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ dargestellt. Wie man in Abbildung 8.2 gut erkennen kann, tritt der stärkste Potentialabfall vor den Stegen mit dem dazwischen liegenden schmalen Graben auf. Das elektrische Feld nimmt auf den Stegstirnflächen daher Beträge von 7 kV/cm und mehr an und ist dort damit mindestens sechsmal größer als das maximale Feld in der Floatingpotential-Randschicht. Wie Abbildung 8.3 zeigt, werden an den Außenkanten der Stege sogar Spitzenwerte von $|E| = 44\,\mathrm{kV/cm}$ erreicht, während an den Innenkanten immerhin noch 24 kV/cm auftreten. In dem schmalen Graben zwischen den Stegen ist nur in der Nähe des Grabeneingangs ein Potentialgefälle zu sehen, während das Potential im Grabeninneren nahezu konstant $-1000\,\mathrm{V}$ beträgt. Als Grund dafür ist die im Vergleich zur Matrixschichtdicke nur sehr kleine Grabenbreite von 1 mm zu nennen. Daher verschwindet das elektrische Feld im Inneren des Grabens fast vollständig. Im Gegensatz dazu ist im

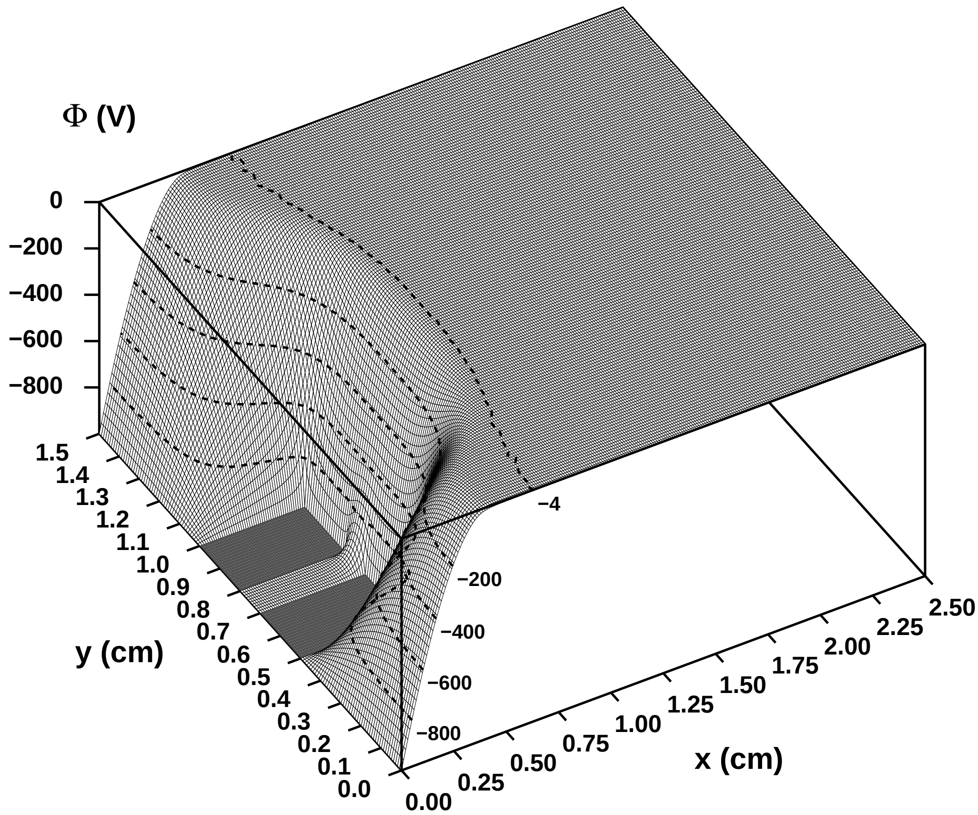

Abbildung 8.2: Verteilung des elektrischen Potentials Φ in der simulierten Matrixschicht 10 ns nach Einschalten der Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien des Potentials dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Potentialverteilung.

Inneren des breiten Grabens, dessen beide Hälften ober- und unterhalb der beiden Stege liegen, noch ein elektrisches Feld von bis zu 4.5 kV/cm vorhanden. Der Potentialabfall von 1000 V muß dort also auf einer größere Strecke stattfinden, wie in Abbildung 8.2 gut zu sehen ist.

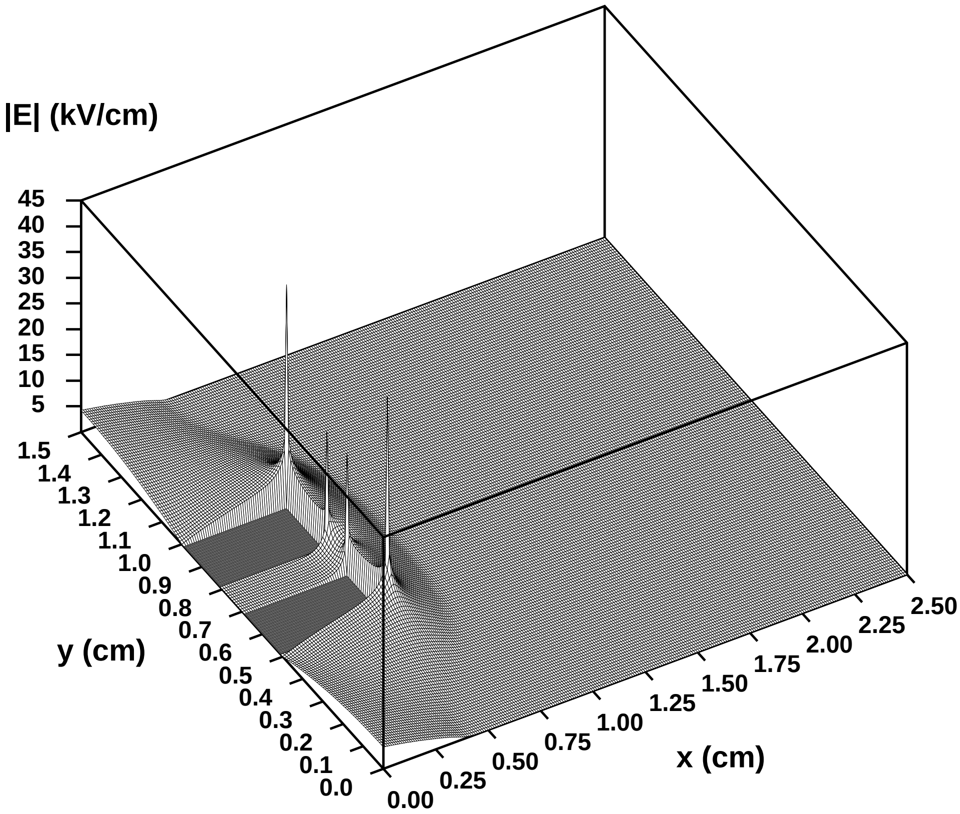

Abbildung 8.3: Verteilung des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ in der simulierten Matrixschicht und auf der Targetoberfläche 10 ns nach Einschalten der Hochspannung von $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$ zum Zeitpunkt $t = 0$.

8.3 Entwicklung der Ionendichte in der Matrixschicht-Implantationsphase

Nach Ausbildung der Matrixschicht setzt die Reaktion der Ionen auf der Zeitskala der inversen Ionenplasmafrequenz von ${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = 34\,\mathrm{ns}$ ein. Dabei werden die Ionen aufgrund des vorhandenen elektrischen Feldes in der Matrixschicht, in der das elektrische Potential jetzt um 1000 V zwischen Plasma und Target abfällt, stark in Richtung des Targets beschleunigt. Die zeitliche Entwicklung der Ionenverteilung in der Umgebung des Targets ist in Abbildung 8.4 dokumentiert, wo die Ionendichte zu den vier verschiedenen Zeitpunkten $t = 0$, 70, 100 und 140 ns während der Matrixschicht-Implantationsphase dargestellt ist. Die Dauer der Matrixschicht-Implantationsphase liegt dabei, ähnlich wie bei den eindimensionalen Matrixschichten aus Kapitel 4, in der Größenordnung von etwa 150 ns. Zum Zeitpunkt $t = 0$ ns haben die Ionen noch die Verteilung wie in der Floating-Potentialrandschicht. Dann setzt jedoch in der Matrixschicht eine Beschleunigung der Ionen in Richtung auf das Target ein, wodurch die Ionendichte überall auf der Targetoberfläche zunimmt, wie das Diagramm zum Zeitpunkt $t = 70$ ns in Abbildung 8.4 zeigt. Gleichzeitig nimmt der Implantationsstrom auf die einzelnen Flächensegmente des Targets zu und erreicht je nach Segment innerhalb einer Zeit von 50 bis 70 ns ein Maximum. Darauf wird in Abschnitt 8.4 noch näher eingegangen. Lediglich auf der Bodenfläche des schmalen Grabens setzt der Strom erst zu dem deutlich späteren Zeitpunkt $t = 140$ ns ein und erreicht dann aber sofort sein Maximum. Dieses Verhalten, das sehr schön in Abbildung 8.4 verfolgt werden kann, hat folgende Ursache: Aufgrund der im Vergleich zur Matrixschichtdicke geringen Breite des schmalen Grabens von nur 1 mm ist das elektrische Feld im Grabeninneren, ähnlich wie im Fall der Floatingpotential-Randschicht, sehr klein. Als Folge davon werden die Ionen dort kaum beschleunigt und ihre Dichte bleibt daher zunächst nahezu konstant. Gleichzeitig dringen nun sehr schnelle Ionen, die in der zylindrischen Matrixschicht vor den Stegen beschleunigt wurden, in den schmalen Graben ein und erzeugen dadurch eine Stoßwelle mit großer Dichte, die sich im Laufe der Zeit immer tiefer in den Graben hineinbewegt. Diese Welle erreicht zum Zeitpunkt $t = 70$ ns ein Maximum von $10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ in einer Tiefe von etwa 1.5 mm im Graben. Mit zunehmender Zeit läuft der Kopf der Stoßwelle immer mehr auseinander und wird dabei ständig kleiner. Schließlich erreicht die Welle etwa 140 ns nach Einschalten der Hochspannung den Boden des Grabens und führt dort zu einem schlagartigen Einsetzen des Implantationsstroms. Während dieses ganzen Prozesses haben die Ionen hinter der Stoßfront überall im Graben die gleiche Dichte wie am Grabeneingang und an den Stegstirnflächen. Das bekräftigt nochmals die Tatsache, daß im Grabeninneren kein nennenswertes elektrisches Feld vorhanden ist, sodaß sich die Ionen dort mit konstanter Geschwindigkeit bewegen und ihre Dichte daher konstant bleibt. In dem Moment, in dem die Ionenfront den Grabenboden erreicht, ist die Dichte der Ionen sogar überall im Graben gleich. Aus der zeitlichen Entwicklung der Dichteverteilung in Abbildung 8.4 kann man abschätzen, daß sich die Welle im Graben mit einer Geschwindigkeit von etwa 50 km/s fortpflanzt.

Das Auftreten einer solchen Ionenwelle, die sich in einen Graben hineinbewegt, wurde auch schon von Sheridan bei PIII-Simulationen beobachtet, die jedoch mit homogenen Dichteverteilungen der Ionen zu Beginn der Simulation durchgeführt wurden [Sheridan, 1995; Sheridan, 1996]. Drückt man den Zeitpunkt, zu dem die Welle den Grabenboden erreicht, als Vielfaches der inverse Ionenplasmafrequenz ${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_\mathrm{i}/n_\mathrm{i} e^2)^{1/2}$ aus, dann erhält man je nach der verwendeten Ionendichte n_i folgende Werte: Setzt man für die Ionen die Dichte $n_\mathrm{i} = 5.3 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ ein, die die Ionen zu Beginn des Hochspannungspulses am Eingang des schmalen Grabens besitzen, dann beträgt die inverse Ionenplasmafrequenz

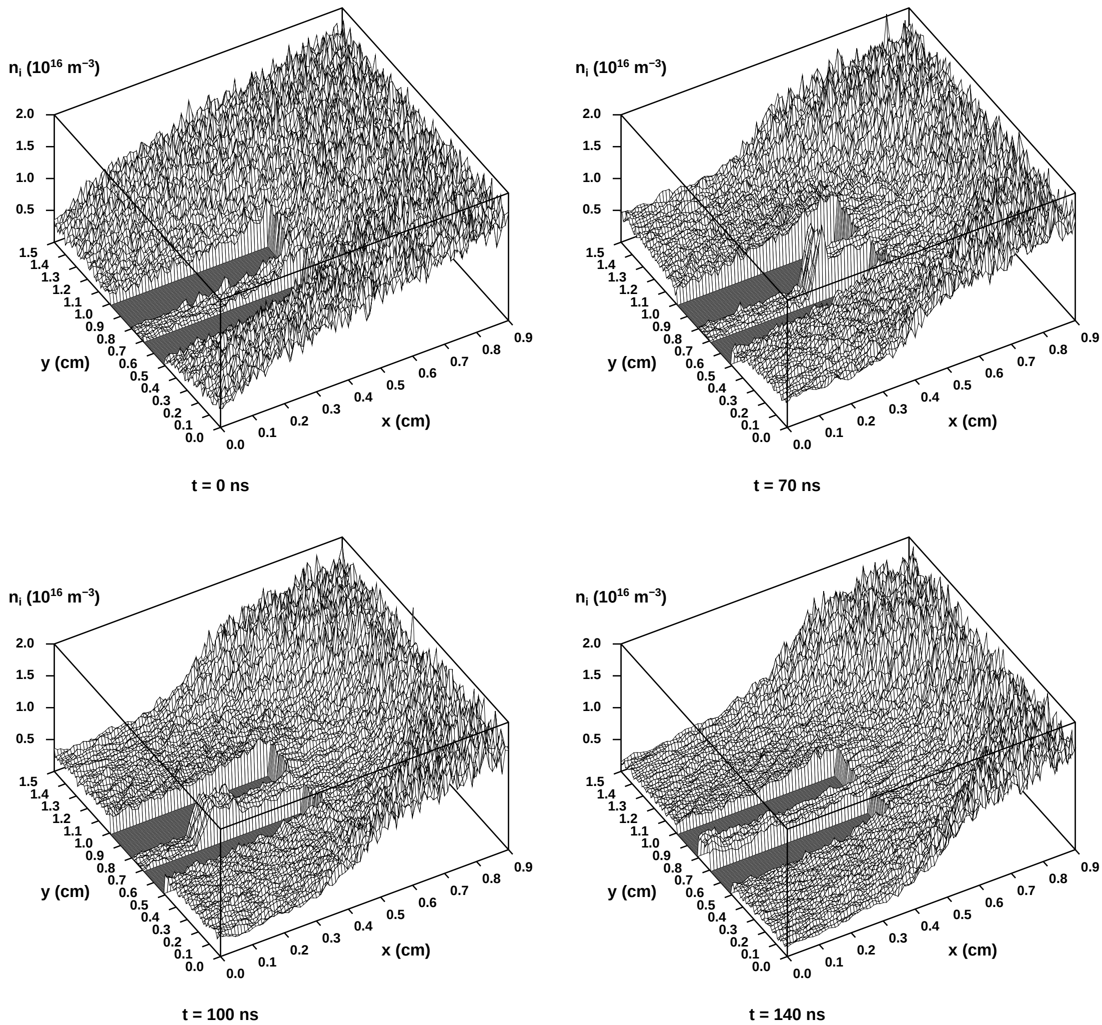

Abbildung 8.4: Zeitliche Entwicklung der Ionendichte in der Umgebung des Targets, dargestellt durch Momentaufnahmen zu den Zeitpunkten $t = 0$, 70, 100 und 140 ns innerhalb der Matrixschicht-Implantationsphase. Die Zeitpunkte, zu denen die einzelnen Bilder aufgenommen wurden, sind jeweils unter den Diagrammen zu finden.

${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = 66\,\mathrm{ns}$ und der Zeitpunkt des Auftreffens der Welle lautet $t = 140\,\mathrm{ns} = 2.1 \cdot {\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1}$. Benutzt man dagegen die mittlere anfängliche Ionendichte im Graben von $n_\mathrm{i} = 1.7 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$, dann erhält man $t = 140\,\mathrm{ns} = 1.2 \cdot {\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1}$. Damit liegt der Zeitpunkt des Auftreffens zumindest in der Größenordnung von $t = 1.5 \ldots 2.0 \cdot {\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1}$, wie er bei der Simulation von homogenen Matrixschichten beobachtet wurde.

Schließlich nimmt die Ionendichte im weiteren Verlauf der Matrixschicht-Implantationsphase überall in der Matrixschicht ab und die Schichtkante beginnt sich allmählich in das Plasma hineinzubewegen. Dabei behält die Schicht zumindest in dem in Abbildung 8.4 dargestellten Zeitraum noch ihre zylindrische Form.

8.4 Zeitliche Abhängigkeit der Ionenstromdichte auf der Targetoberfläche

In diesem Abschnitt soll nun untersucht werden, wie die Ionenstromdichte auf den einzelnen Segmenten der Targetoberfläche von der Zeit abhängt. Dazu ist in Abbildung 8.5 die zeitliche Entwicklung der mittleren Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ der Ionen für die einzelnen Segmentflächen des Targets, wie Stegstirnflächen, Seitenflächen und Bodenflächen der beiden Gräben, dargestellt. Darin ist sehr schön zu erkennen, wie der Ionenstrom auf allen Segmentflächen des Targets, mit Ausnahme des Bodens des schmalen Grabens, unmittelbar nach Einschalten der negativen Hochspannung bei $t = 0$ sehr stark ansteigt und innerhalb kurzer Zeit jeweils ein Maximum erreicht. Dabei tritt die größte Stromdichte an den Stegstirnflächen auf, wo nach etwa 50 ns über 74 A/m^2 erreicht werden. Dieses Strommaximum ist über 17% größer als das Maximum von 63 A/m^2, das bei der vergleichbaren Simulation der Plasmaimmersions-Ionenimplantation an einer planaren Wand beobachtet wurde (Abschnitt 4.4). Das hebt die fokussierende Wirkung der Kantenfelder hervor, durch die mehr Ionen auf die Stegstirnflächen beschleunigt werden. Die Seitenflächen des breiten Grabens erhalten mit maximal 32 A/m^2 zum Zeitpunkt $t = 70$ ns den zweitgrößten Strom auf dem zweidimensionalen Target, wohingegen der Boden dieses Grabens leicht verzögert nach etwa 80 ns von Ionen mit der Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle = 26$ A/m^2 getroffen wird. Der Grund für die gegenüber den Stegstirnflächen kleineren Stromdichten liegt neben dem Einfluß der fokussierende Kantenfeldern ganz einfach in der geringeren Ionendichte der Matrixschicht

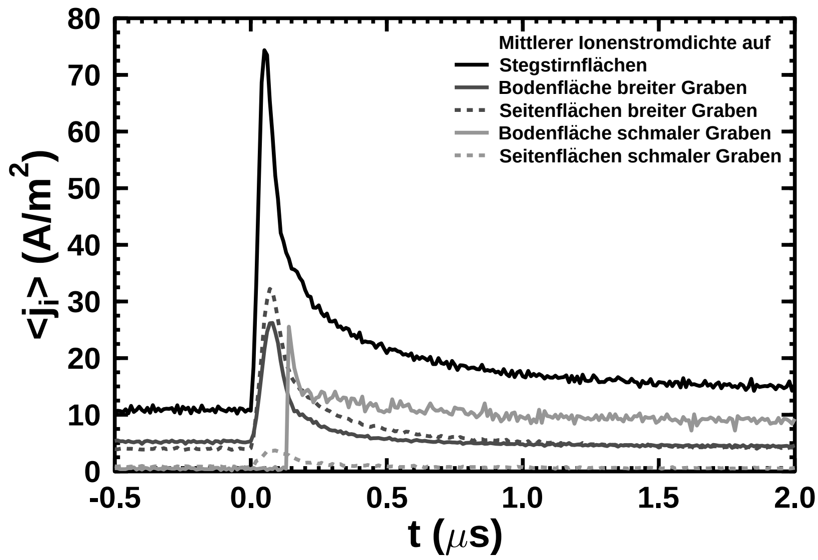

Abbildung 8.5: Zeitliche Entwicklung der mittleren Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ der Ionen auf den einzelnen Segmentflächen des Targets im Zeitraum zwischen 0.5 μs vor und 2 μs nach Einschalten der negativen Hochspannung am Target.

in der Nähe des Grabens. Während die Seitenflächen des schmalen Grabens hauptsächlich am Grabeneingang von Ionen getroffen werden und dadurch zu dem abgebildeten kleinen Strommaximum von 3.7 A/m^2 bei $t = 90$ ns führen, setzt der Implantationstrom auf die Bodenfläche dieses Grabens erst 140 ns nach Einschalten der Hochspannung ein und erreicht augenblicklich sein Maximum von fast 26 A/m^2. Das ist eine Folge der beschriebenen Ionenwelle, die genau zum Zeitpunkt $t = 140$ ns den Grabenboden erreicht (Abbildung 8.4). Bis dahin liegt die mittlere Ionenstromdichte am Grabenboden in der Größe der Stromdichte der Floatingpotential-Randschicht von nur 0.52 A/m^2.

Nach dem Erreichen des jeweiligen Maximums fällt der mittlere Ionenstrom auf den einzelnen Segmentflächen rasch wieder ab und erreicht, ähnlich wie im eindimensionalen Fall, nach etwa 2 μs seine Sättigungswerte in der sich allmählich entwickelnden Hochspannungsrandschicht. Die Sättigungsstromdichten $\lim_{t\to\infty}\langle j_\mathrm{i}\rangle$ sind in Tabelle 8.1 zusammengefaßt und berechneten Stromdichten vergleichsweise gegenübergestellt. Die berechneten Stromdichten basieren dabei wieder auf dem einfachen Modell, daß der aus dem Plasmabulk kommende Ionenstrom der Dichte $j_0 = 9.86$ A/m^2 innerhalb der Gräben gleichmäßig auf die Seiten- und Bodenflächen verteilt wird. Die zugehörige Stromdichte muß dabei durch die Aufteilung auf mehrere Flächen zwar abnehmen, soll jedoch auf allen Flächen des jeweiligen Grabens gleich groß sein. Auf den Stegstirnflächen sollte die Stromdichte dagegen stets $\lim_{t\to\infty}\langle j_\mathrm{i}\rangle = j_0$ betragen, da sich dort die Ionen nicht auf mehrere Flächen aufteilen müssen. Eine skizzenhafte Darstellung dieses Modells ist in Abbildung 7.12 auf Seite 114 zu finden. Wie nun Tabelle 8.1 zeigt, ist die simulierte Stromdichte auf den Stegstirnflächen mit 13.44 A/m^2 mehr als 36% höher als die berechnete Stromdichte und liegt sogar noch fast 24% über dem Niveau der Stromdichte in der Floatingpotential-Randschicht. Diese beträgt nach Tabelle 7.2 auf Seite 114 nur 10.87 A/m^2. Der angewachsene Strom ist wieder eine Folge der fokussierenden Kantenfelder, deren Betrag gegenüber der Floatingpotential-Randschicht nochmals um mehr als eine Größenordnung zugenommen hat. Dadurch werden erheblich mehr Ionen auf die Stegstirnflächen gezogen, als es ohne Vorhandensein dieses Feldes der Fall wäre. Der Sättigungsstrom auf die Bodenfläche des breiten Grabens ist mit 4.31 A/m^2 etwas höher als der Strom von 3.69 A/m^2 auf

Tabelle 8.1: Vergleich zwischen näherungsweise berechneten und simulierten mittleren Sättigungsstromdichten $\lim_{t\to\infty}\langle j_\mathrm{i}\rangle$ auf den einzelnen Segmentflächen des Targets in der Hochspannungsrandschicht.

Segmentflächen des Targets	$\lim_{t\to\infty}\langle j_\mathrm{i}\rangle$ berechnet (A/m^2)	$\lim_{t\to\infty}\langle j_\mathrm{i}\rangle$ simuliert (A/m^2)
Stegstirnflächen	9.86	13.44
Seitenflächen breiter Graben	4.93	3.69
Bodenfläche breiter Graben	4.93	4.31
Seitenflächen schmaler Graben	0.90	0.53
Bodenfläche schmaler Graben	0.90	7.99

dessen Seitenflächen. Beide Werte liegen aber in der Größenordnung, die auf der Grundlage des einfachen Modells erwartet wird. Während der Ionenstrom auf die Seitenflächen des schmalen Grabens sich bei $0.53\,\mathrm{A/m^2}$ einpendelt und damit kleiner ist als berechnet, erfährt der Strom auf die Bodenfläche dieses Grabens mit $7.99\,\mathrm{A/m^2}$ eine fast 9-fache Steigerung gegenüber seinem erwarteten Wert und eine mehr als 15-fache Steigerung gegenüber seinem Wert von $0.52\,\mathrm{A/m^2}$ vor Anlegen der Hochspannung. Das hat seinen Grund in der Verteilung des elektrischen Feldes in dem schmalen Graben, die hier vorweggenommen werden soll: Durch den Abstand von nur 1 mm zwischen den Seitenwänden des schmalen Grabens, der sehr klein ist gegenüber der Schichtdicke der Hochspannungsrandschicht (Größenordnung 1 cm), kompensieren sich die elektrischen Felder, die von den gegenüberliegenden Wände ausgehen, sodaß der schmale Graben in guter Näherung als feldfrei angesehen werden kann. Die Ionen, die nun in den schmalen Graben eindringen, werden daher, ungehindert von einem transversalen elektrischen Feld, beinahe alle bis zum Boden des Grabens weiterfliegen. Das hat zur Folge, daß der Sättigungsstrom am Boden mit $7.99\,\mathrm{A/m^2}$ in der gleichen Größenordnung liegt wie der eingekoppelte Ionenstrom von $9.86\,\mathrm{A/m^2}$.

8.5 Zeitliche Abhängigkeit der Ionendosis auf der Targetoberfläche

Die im vorigen Abschnitt beschriebene mittlere Ionenstromdichte auf den verschiedenen Segmentflächen des Targets führt aufgrund der großen Unterschiede in der Zeitabhängigkeit zu sehr verschiedenen Ionendosen auf der Targetoberfläche. Die Ionendosis D_i hat dabei die Bedeutung der Anzahl der je Flächeneinheit implantierten Ionen. In Abbildung 8.6 ist nun die zeitliche Entwicklung der mittleren Ionendosis $\langle D_\mathrm{i}\rangle$ auf den einzelnen Segmentflächen des Targets für zwei verschiedene Zeiträume nach Einschalten des negativen Hochspannungspulses dargestellt. Zunächst zeigt Abbildung 8.6 a) den Verlauf der mittleren Ionendosis auf den unterschiedlichen Segmenten innerhalb von $1\,\mu$s nach Einschalten der Hochspannung. Alle Kurven, mit Ausnahme der zum Boden des schmalen Grabens gehörenden Kurve, zeigen jeweils zu Beginn des Hochspannungspulses einen stärkeren Anstieg als im weiteren Verlauf, was auf die in Abbildung 8.5 dargestellten anfänglichen Maxima der Ionenströme zurückzuführen ist. Mit dem Abklingen der Ionenströme auf ihre Gleichgewichtswerte nehmen die Kurven im Laufe der Zeit jedoch immer mehr den Verlauf von Geraden an, was in Abbildung 8.6 b) schön zu sehen ist. Insgesamt zeigt $\langle D_\mathrm{i}\rangle$ auf den Stegstirnflächen den größten Anstieg, sowohl zu Beginn als im weiteren Verlauf. Der zweitstärkste Anstieg ist zunächst bei den Seitenflächen des breiten Grabens gefolgt von der Bodenfläche dieses Grabens zu verzeichnen. Deren Kurven weisen im weiteren Verlauf annäherend die gleiche Geradensteigung auf, wobei die mittlere Ionendosis auf der Bodenfläche des Grabens ab etwa $6\,\mu$s sogar größer wird als auf den Seitenflächen. Auf der Bodenfläche des schmalen Grabens ist $\langle D_\mathrm{i}\rangle$ bis zum Zeitpunkt $t = 140\,\mathrm{ns}$ nahezu Null. Erst dann setzt der Implantationsstrom auf diese Fläche ein und die mittlere Dosis beginnt dort schnell zuzunehmen. Weil die Sättigungsstromdichte mit 7.99 A/m^2 fast doppelt soch hoch ist wie auf allen Wänden des breiten Grabens, übertrifft die mittlere Ionendosis $\langle D_\mathrm{i} \rangle$ auf der Bodenfläche des schmalen Grabens ab $t = 0.55\,\mu$s zuerst den Wert auf der Bodenfläche des breiten Grabens und überholt dann bei $t = 0.92\,\mu$s sogar den entsprechenden Wert auf dessen Seitenwänden. Die kleinste mittlere Ionendosis wird schließlich auf den Seitenflächen des schmalen Grabens beobachtet.

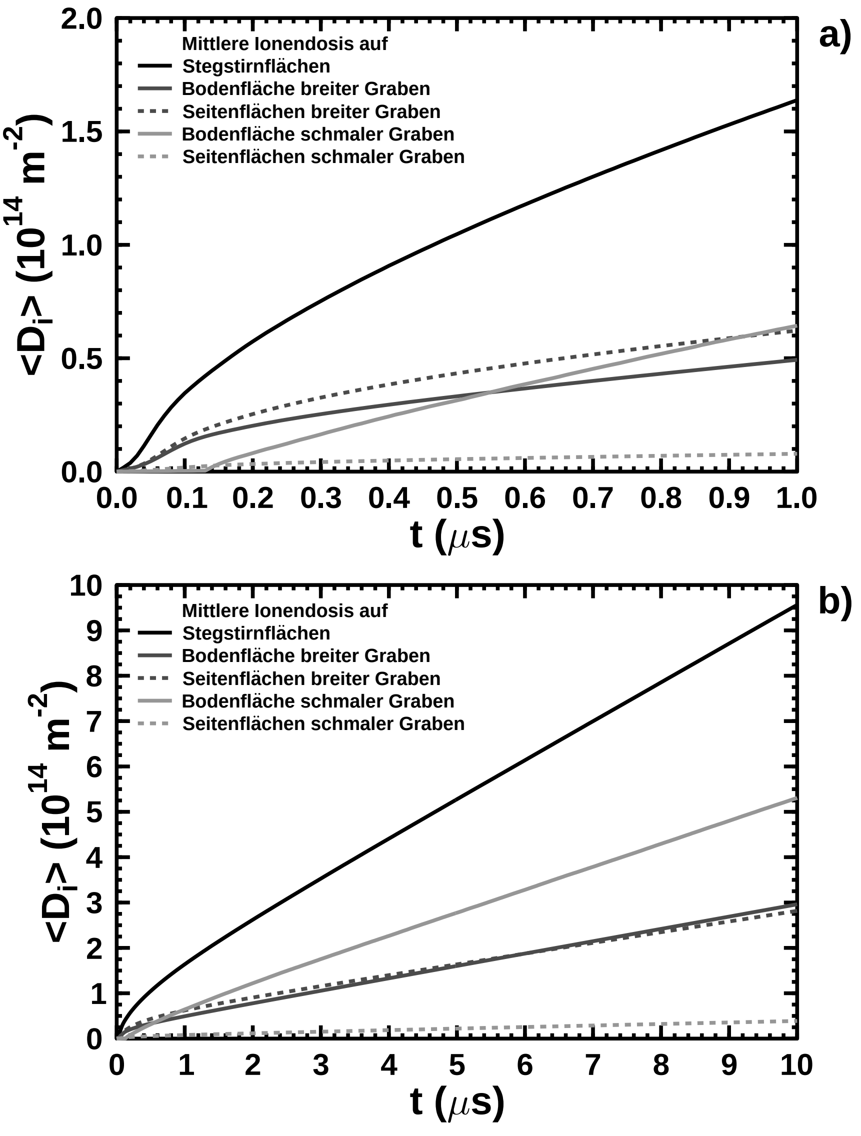

Abbildung 8.6: Zeitliche Entwicklung der mittleren Ionendosis $\langle D_\mathrm{i} \rangle$ auf den einzelnen Target-Segmentflächen a) innerhalb eines Zeitraums von $1\,\mu$s und b) innerhalb von $10\,\mu$s nach Einschalten der negativen Hochspannung am Target.

Neben der mittleren Ionendosis auf den verschiedenen Segmenten des Targets ist besonders die Kenntnis der detaillierten räumlichen Verteilung von D_i auf der Targetoberfläche interessant. Deren zeitliche Entwicklung kann anhand der Momentaufnahmen zu den verschiedenen Zeiten $t = 0.1$, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0 und $10\,\mu$s verfolgt werden, die in Abbildung 8.7 dargestellt sind. Zu Beginn ($t = 0.1\,\mu$s) besitzt das Verteilungsprofil von D_i noch große Ähnlichkeit mit dem Profil der Ionenstromdichte in der Floatingpotential-Randschicht, wie sie Abbildung 7.11 auf Seite 112 zeigt. Die Ähnlichkeit zwischen dieser Dosisverteilung und der Stromdichteverteilung aus der

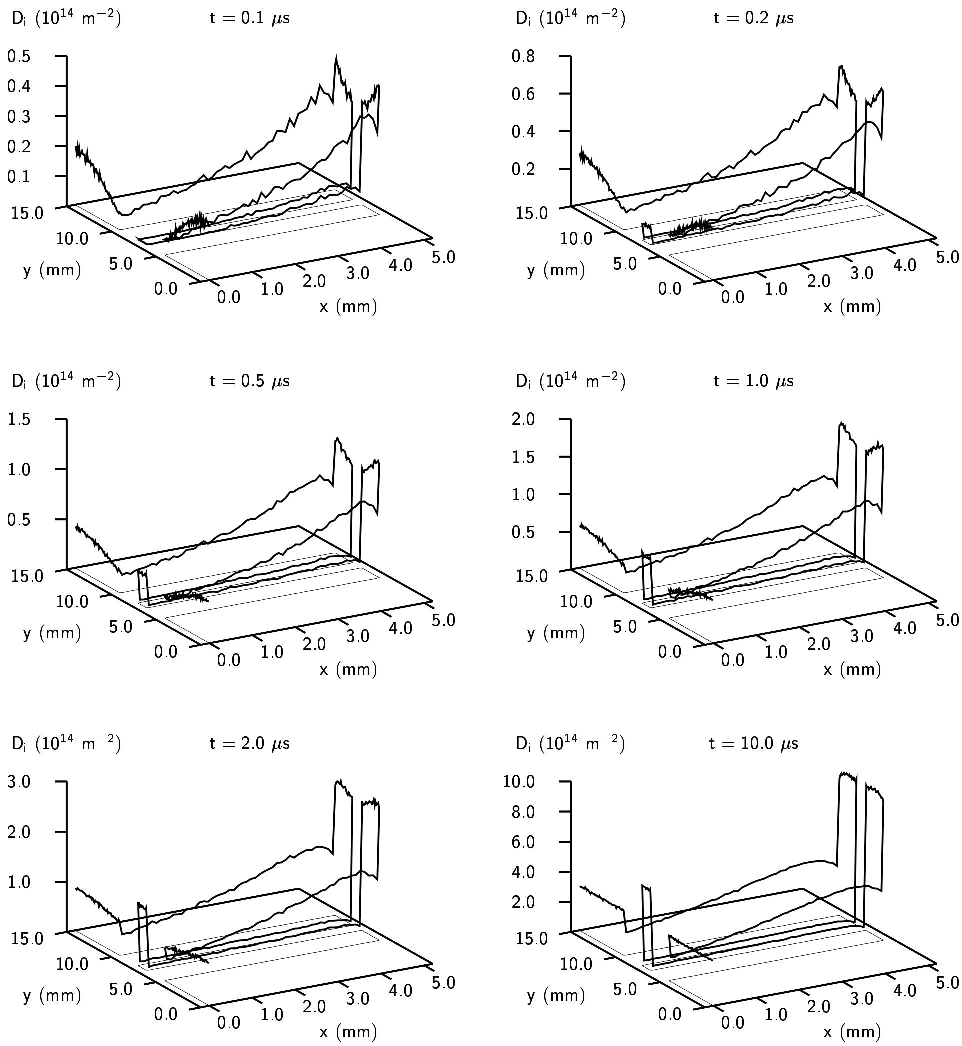

Abbildung 8.7: Zeitliche Entwicklung der Verteilung der Ionendosis D_i auf der Targetoberfläche, dargestellt in Form von Momentaufnahmen zu den Zeiten $t = 0.1$, 0.2, 0.5, 1.0, 2.0 und $10\,\mu$s. Die dünnen Linien symbolisieren den Verlauf des Targets und dienen der besseren Sichtbarkeit.

Floatingpotential-Randschicht ist darauf zurückzuführen, daß der Zeitpunkt $t = 0.1\,\mu$s noch zur Matrixschicht-Implantationsphase gehört. Alle bis dahin auf das Target treffenden Ionen stammen also aus der unmittelbaren Umgebung des Targets, wo sie mit vergleichsweise geringer Geschwindigkeit gestartet sind. Sie sind daher noch in der Lage, dem Verlauf des elektrischen Feldes an der Targetoberfläche zu folgen.

Mit zunehmender Zeit dehnt sich die Schicht nun aber immer mehr aus und ändert dabei gleichzeitig ihre Form von der zylindrischen Gestalt der Matrixschicht hin zu einem immer mehr planaren Aufbau. Darauf wird in Kapitel 9 näher eingegangen. Als Folge davon setzt die Beschleunigung der Ionen in immer größeren Entfernungen von der Targetoberfläche ein und geschieht fast ausschließlich in Richtung der negativen x-Achse. Wenn die Ionen nun in den Einflußbereich des elektrischen Feldes nahe der Targetoberfläche kommen, ist ihre Geschwindigkeit bereits so hoch, daß sie nur noch schwach aus ihrer Bewegungsrichtung längs der negativen x-Achse abgelenkt werden können. Dadurch wird die Ionendosisverteilung auf den verschiedenen Segmentflächen mit zunehmender Zeit immer homogener, weil die Ionen den elektrischen Feldlinien nahe des Targets nicht mehr folgen können. Nach $10\,\mu$s beträgt die Dosis der implantierten Ionen auf den Stegstirnflächen überall etwa $9.5 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$. Auf dem Boden des schmalen Grabens nimmt die Dosis mit konstant $5.3 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$ den zweitgrößten Wert auf dem Target an, während die Dosis auf dem Boden des breiten Grabens noch $3.0 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$ erreicht. Lediglich die Seitenwände des breiten Grabens zeigen nach wie vor eine inhomogene Verteilung von D_i mit einem Maximum von $3.9 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$ im Abstand 0.65 ± 0.05 mm vom Grabeneingang. Hier macht sich, wie schon in der Floatingpotential-Randschicht, der Einfluß des starken Feldes an den Außenkanten der Stege bemerkbar. In den Ecken am Boden erreicht die Ionendosis auf den Seitenwänden dagegen ein Minimum von $1.5 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-2}$. Die Seitenwände des schmalen Grabens werden schließlich ebenfalls nahezu homogen von Ionen getroffen, die dort jedoch nur noch eine Dosis von $D_\mathrm{i} = 3.9 \cdot 10^{13}\,\mathrm{m}^{-2}$ erreichen.

8.6 Vergleich zu experimentell bestimmten Dosisverteilungen

In diesem Abschnitt wird nun die simulierte Ionendosisverteilung auf dem Target mit experimentell gemessenen Verteilungen verglichen. Die Arbeiten von Ensinger *et al.* [Ensinger *et al.*, 1999; Ensinger *et al.*, 2000] wurden im Rahmen von Untersuchungen zur Homogenität der Ionendosis bei der Behandlung U-förmiger Targets mittels Plasmaimmersions-Ionenimplantation durchgeführt. Die Targets bestanden aus einem Metallblock von der Länge 50 mm mit einem Graben der Tiefe $h = 30$ mm in der Mitte, der beidseitig von Stegen der Breite $b_\mathrm{s} = 20$ mm eingerahmt wurde. Die Grabenbreite b_t lag, je nach verwendetem Target, zwischen 1 mm und 16 mm. Die Targets wurden jeweils mit einem Streifen aus Tantal und einer darauf befindlichen Ta_2O_5-Schicht von der Dicke 200 nm beklebt. Durch PIII-Behandlung mit -40 kV-Pulsen wurde ein Teil dieser Schicht weggesputtert, und die verbleibende Schichtdicke konnte anschließend mit Interferenzmethoden optisch bestimmt werden. Das dazu verwendete Argon-Plasma war mit einem Neutralgasdruck von 0.2 Pa und einer Plasmadichte von $5 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ dem hier in der Simulation benutzten Plasma sehr ähnlich. Die an das Target angelegten Hochspannungspulse hatten jeweils eine Dauer von $18\,\mu$s. Da die Targets bei diesen Experimenten auf einem stabförmigen Halter befestigt waren, hatte die expandierende Schicht stets eine sphärische Struktur.

Die in den Experimenten beobachteten Dosisverteilungen der Ionen stimmen qualitativ mit den simulierten Verteilungen für $t \leq 0.5\,\mu$s aus Abbildung 8.7 überein: Von innen nach außen zunehmende Ionendosis auf den Stegstirnflächen, von oben nach unten abnehmende Dosis auf den Stegaußenseiten mit einem lokalen Maximum nahe der oberen Stegkante und eine vergleichsweise kleine bis verschwindende Ionendosis auf den Seitenwänden des Grabens zwischen den Stegen. Die bis dahin gute Übereinstimmung zwischen simulierten und experimentellen Ergebnissen rührt daher, daß die simulierte Schicht anfangs eine zylindrische Struktur besitzt, die dem stets sphärischen Schichtaufbau in den Experimenten sehr ähnlich ist und zu vergleichbaren Resultaten führt. Wie jedoch schon diskutiert wurde, wird der Aufbau der Schicht in der Simulation im Laufe der Zeit immer mehr planar, sodaß die simulierte Dosisverteilung mehr und mehr von den experimentell gemessenen Verteilungen abzuweichen beginnt. Trotzdem besitzen die Dosisverteilungen noch eine weitere Gemeinsamkeit, die gerade bei länger andauernder Implantation ins Auge fällt: Die Ionendosis wird am Boden des Grabens zwischen den Stegen sehr groß. Während die Dosis an dieser Stelle in der Simulation nur noch von der Dosis auf den Stegstirnflächen übertroffen wird, die etwa doppelt so groß ist, nimmt sie in den Experimenten am Grabenboden sogar ihre absoluten Maximalwerte auf dem ganzen Target an. Dabei war die Zerstäubungsrate der aufgebrachten Ta_2O_5-Schicht am Boden eines 1 mm breiten Grabens, wie er auch in der Simulation verwendet wurde, etwa dreimal so groß wie auf den Stegstirnflächen. Als Gründe für diesen deutlichen Unterschied zwischen Simulation und Experimenten können zwei Argumente angeführt werden, die schon von Ensinger *et al.* als Erklärungsversuch verwendet wurden: Zum einen können die Ionen in den Experimenten beim Auftreffen unter streifenden Winkeln auf die Seitenwände der Gräben von diesen reflektiert werden und dadurch ebenfalls zu einem Strom auf den Grabenboden beitragen. Dies ist in der Simulation nicht möglich, weil dort angenommen wird, daß die Ionen unabhängig vom Aufschlagwinkel stets in die Oberfläche eindringen. Zum anderen haben die in den Experimenten verwendeten Targetblöcke nur eine endliche Länge von 50 mm und sind dabei vorne und hinten offen. Das hat zur Folge, daß die Ionen auch seitlich aus der sphärischen Schicht in den Graben eindringen können und dabei den Grabenboden unter größeren Winkeln treffen. Da die Zerstäubungsrate jedoch mit zunehmendem Einfallswinkel (gemessen zur Flächennormale) immer größer wird [Behrisch, 1981; Nastasi *et al.*, 1996], steigt dadurch der Materialabtrag der Ta_2O_5-Schicht am Boden zusätzlich an, wodurch eine größere Ionendosis vorgetäuscht wird. In der Simulation dagegen konnten die Ionen den Grabenboden nur erreichen, indem sie von oben in den Graben eindringen. Angesichts dieser prinzipiellen Unterschiede zeigen die Ergebnisse aus den Experimenten und der hier durchgeführten Simulation zufriedenstellende Übereinstimmungen.

In einem von Mändl *et al.* durchgeführten Experiment [Mändl *et al.*, 1997] wurde anstelle eines Argon-Plasmas ein Stickstoff-Plasma mit einer Plasmadichte von $6 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ bei einer Elektronentemperatur von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 2\,\mathrm{eV}$ und einem Neutralgasdruck von 0.2 Pa verwendet. Der angewandte Hochspannungspuls hatte die Größe von $-30\,\mathrm{kV}$ und die Länge von $10\,\mu\mathrm{s}$. Als Target wurde ein metallischer Zylinder mit dem Durchmesser 50 mm verwendet, der in der Mitte ein Loch der Tiefe $h = 30\,\mathrm{mm}$ hatte, das einen Durchmesser von 8 mm besaß. Auf die Targetoberfläche wurde eine 0.25 mm dicke Aluminium-Folie aufgebracht, die durch die auftreffenden Plasmaionen zum Teil weggesputtert wurde. Aus der verbleibenden Schichtdicke, die mittels RBS (Rutherford Backscattering Spectroscopy) gemessen wurde, konnte dann die Ionendosis bestimmt werden. Ähnlich wie in den Experimenten von Ensinger *et al.* hatte die expandierende Schicht stets eine sphärische Gestalt. Im Unterschied zu diesen war das Loch in der Mitte des Targets jedoch nach allen Seiten geschlossen, weshalb die Ionen den Boden nur von oben erreichen konnten. Die experimentelle Messung ergab schließlich eine Verteilung der Ionendosis, die qualitativ sehr gut mit der simulierten Verteilung nach $10\,\mu\mathrm{s}$ übereinstimmt, wie sie in Abbildung 8.7 zu sehen ist: Innerhalb der Fehlerschranken war die Ionendosis zunächst auf den Stegstirnflächen konstant. Während die Seitenwände des Lochs eine Dosis erhielten, die unter der Nachweisgrenze der RBS-Methode lag, wurde am Boden des Lochs eine Dosis gemessen, die etwa einem Viertel der Dosis auf den Stegstirnflächen entspricht. Im Gegensatz zu den Experimenten von Ensinger *et al.* konnten die Ionen hier nicht seitlich in das Loch eindringen und durch die gesteigerte Oberflächenzerstäubung zu einer scheinbar größeren Ionendosis am Boden des Lochs beitragen. Aus diesem Grund hat der Boden des Lochs, ähnlich wie der Grabenboden in der Simulation, auch nicht die größte Ionendosis auf dem gesamten Target erhalten. Das verdeutlicht nochmals den bei Ensinger *et al.* auftretenden prinzipiellen Fehler bei der Bestimmung der Ionendosis, der durch die seitlich in den Graben eindringenden Ionen verursacht wird.

8.7 Vergleich zur PIII ausgehend von einem homogenen Plasma

Wie bereits in der Einleitung zu diesem Kapitel bemerkt wurde, wurde in alle Simulationen, die bisher zur Untersuchung der PIII an zweidimensionalen Targets durchgeführt wurden, ein homogenes Plasma verwendet, in dem die Ionen und Elektronen anfangs in Ruhe waren [Sheridan, 1995; Sheridan, 1996]. Bei der Untersuchung der PIII an einer planaren Wand konnte jedoch schon in Kapitel 4 gezeigt werden, daß die Wahl der Startkonfiguration einen großen Einfluß auf den zeitlichen Verlauf der Ionenstromdichte auf der Wand hat. Da sich um ein Target, das in ein Plasma eingetaucht wird, üblicherweise eine inhomogene Plasmarandschicht aufbaut, entspricht die Wahl einer Floatingpotential-Randschicht als Startkonfiguration eher den realen Gegebenheiten. In diesem Abschnitt sollen nun die Änderungen in der Ionenstromdichte diskutiert werden, wenn statt der Floatingpotential-Randschicht ein homogenes Plasma als Anfangszustand verwendet wird.

Dazu wurde eine Simulation unter Verwendung des gleichen zweidimensionalen Targets durchgeführt, bei der die anfängliche Plasmadichte jetzt aber überall $n_\mathrm{p} = 2 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ betrug und die Ionen, außer einer thermischen Geschwindigkeitsverteilung entsprechend der Temperatur $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$, keinerlei Driftgeschwindigkeit besaßen.

Zunächst ist in Abbildung 8.8 die zeitliche Entwicklung der Ionendichte während der ersten 140 ns nach Einschalten der Hochspannung in Form von vier verschiedenen Momentaufnahmen dargestellt.

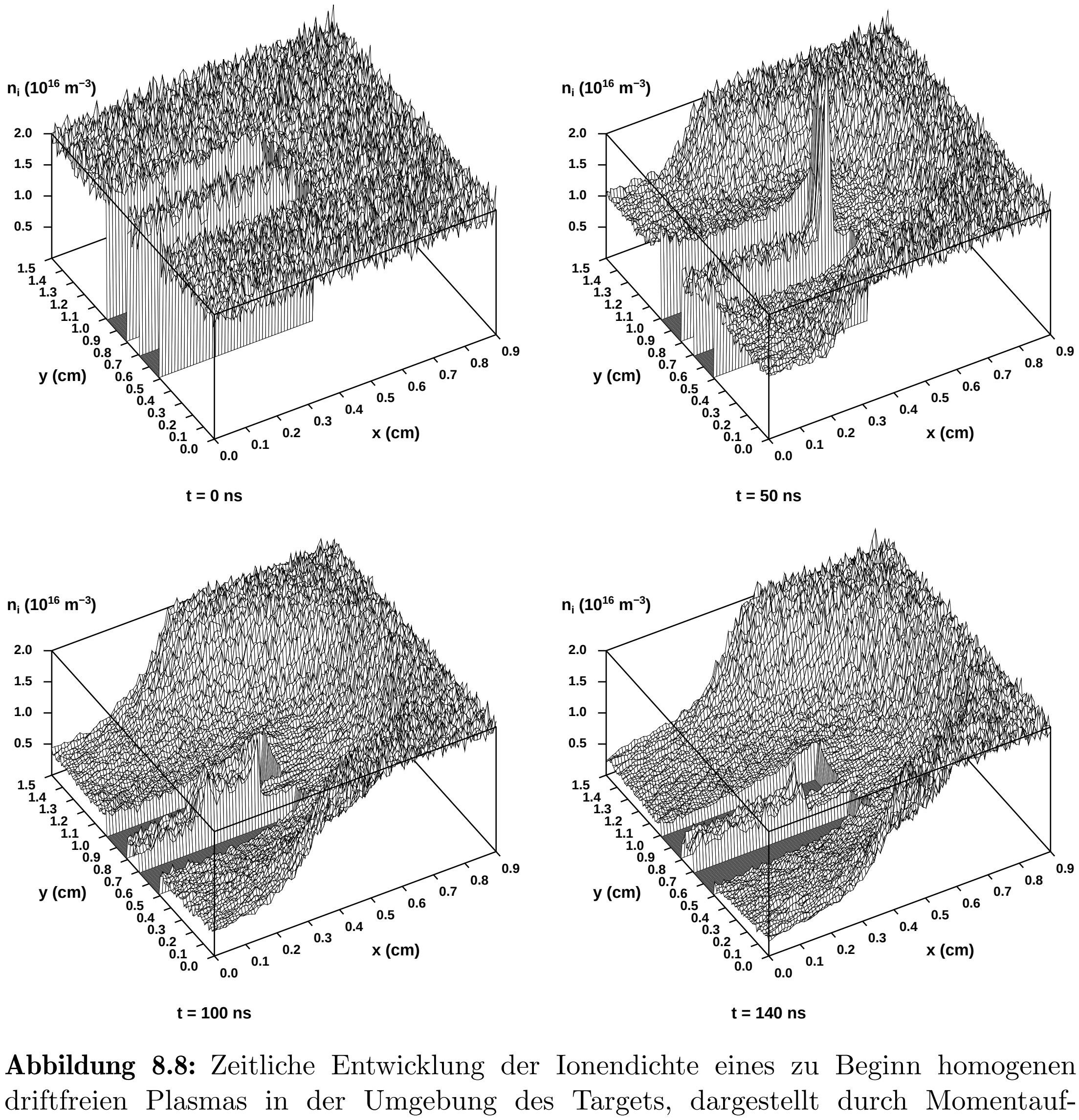

Abbildung 8.8: Zeitliche Entwicklung der Ionendichte eines zu Beginn homogenen driftfreien Plasmas in der Umgebung des Targets, dargestellt durch Momentaufnahmen zu den Zeitpunkten $t = 0$, 50, 100 und 140 ns innerhalb der Matrixschicht-Implantationsphase. Die Zeitpunkte, zu denen die einzelnen Bilder aufgenommen wurden, sind jeweils unter den Diagrammen zu finden.

Zum Zeitpunkt $t = 0\,\mathrm{ns}$ ist die Ionendichte überall, auch in dem schmalen Graben zwischen den Stegen, konstant. Diese Anfangsverteilung unterscheidet sich sehr von der einer Floatingpotential-Randschicht, wie ein Vergleich mit Abbildung 8.4 zeigt. Nach dem Umschalten der Targetspannung von $0\,\mathrm{V}$ auf $-1000\,\mathrm{V}$ bei $t = 0\,\mathrm{ns}$ weichen die Elektronen nahezu instantan vom Target zurück und hinterlassen eine Region mit einer homogenen Ionenraumladungsdichte, die Matrixschicht. Anschließend setzt auf der Zeitskala von ${\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1} = (\epsilon_0 m_{\mathrm{i}}/n_{\mathrm{p}}e^2)^{1/2} = 34\,\mathrm{ns}$ eine Beschleunigung der Ionen aus dieser Matrixschicht in Richtung auf das Target ein. Als Folge davon nimmt deren Dichte in der unmittelbaren Umgebung des Targets zunächst überall gleichmäßig ab und beträgt nach $50\,\mathrm{ns}$ nur noch die Hälfte des Anfangswertes. Gleichzeitig beobachtet man, daß sich, ähnlich wie in Abbildung 8.4, wieder eine aus dem Plasma kommende Wellenfront in dem schmalen Graben abwärts bewegt. Diese erreicht zu dem dargestellten Zeitpunkt $t = 50\,\mathrm{ns}$ ihre größte Dichte von etwa $4 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$, die in einer Tiefe von $0.8\,\mathrm{mm}$ im Graben auftritt. Die Welle entsteht dadurch, daß einige Ionen, die in der Matrixschicht vor den Stegen in Richtung auf die Stegstirnflächen mit dem dazwischen liegenden Grabeneingang beschleunigt wurden, mit hoher Geschwindigkeit in den schmalen Graben eindringen. In dem schmalen Graben selbst ist nun das Potentialgefälle aufgrund der geringen Grabenbreite von Anfang an sehr klein. Die Ionen, die sich bereits zu Beginn des Hochspannungspulses im Graben befinden, konnten daher bisher nur auf relativ kleine Geschwindigkeiten beschleunigt werden. Diese langsamen Ionen werden nun von den schnellen Ionen, die in den Graben eindringen, eingeholt, wodurch die extrem hohe Wellenfront entsteht. Aufgrund der insgesamt größeren Ionendichte in der Matrixschicht ist die maximale Dichte in der Wellenfront etwa viermal so groß wie im Fall der Simulation mit einer Floatingpotential-Randschicht als Startkonfiguration. Nach $100\,\mathrm{ns}$ sind bereits soviele Ionen in das Target eingedrungen, daß die verbleibende Ionendichte auf der Targetoberfläche im Mittel nur noch $5 \cdot 10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$ beträgt. Gleichzeitig hat sich die Welle in dem schmalen Graben noch weiter abwärts bewegt, wobei ihr Kopf immer mehr auseinander läuft. Schließlich trifft die Welle, genau wie im Fall der Floatingpotential-Randschicht aus Abbildung 8.4, zum Zeitpunkt $t = 140\,\mathrm{ns}$ auf den Boden des schmalen Grabens. Die Matrixschicht und die anschließend expandierende Randschicht behalten während des gesamten dargestellten Zeitraums eine zylindrische Gestalt.

Die Wahl eines homogenen driftfreien Plasmas als Anfangszustand führt auch zu starken Änderungen im Verlauf der mittleren Ionenstromdichte $\langle j_{\mathrm{i}} \rangle$ auf den verschiedenen Segmentflächen des Targets. Um diese Änderungen leichter erkennen zu können, ist in Abbildung 8.9 eine vergleichende Darstellung der zeitliche Entwicklung der mittleren Ionenstromdichte, getrennt nach den einzelnen Segmentflächen, dargestellt. Darin soll die Bezeichnung „Randschichtplasma“ auf die Verwendung eines Plasmas mit ausgebildeter Floatingpotential-Randschicht als Startkonfiguration der Simulation hindeuten. Aus den verschiedenen Teilbildern der Abbildung kann man gut erkennen, daß das homogene Plasma auf fast allen Targetsegmenten zu deutlich größeren Strommaxima führt. Dies ist eine Folge der höheren Anfangsdichte der Ionen in der unmittelbaren Nähe zur Targetoberfläche. Zudem treten diese Stromspitzen überall zum Zeitpunkt $t = 35\,\mathrm{ns} = 1.03 \cdot {\omega_{\mathrm{p,i}}}^{-1}$ und damit zwischen 15 und 45 ns früher auf als bei Verwendung eines Plasmas mit ausgebildeter Randschicht. Auch das ist eine Folge der höheren Anfangsdichte der Ionen, weil diesen jetzt eine viel kleinere Geschwindigkeit genügt, um die gleiche Stromdichte zu erzeugen. Der Zeitpunkt des Auftretens der Strommaxima stimmt sehr gut mit jenem überein, der unter Verwendung des gleichen homogenen Plasmas vor einer planaren Wand beobachtet wurde (Abschnitt 4.3). Der Maximalstrom ist auf den Stegstirnflächen mit 124 A/m^2 jetzt fast 68% größer geworden. Auf der Bodenfläche und den Seitenflächen des breiten Grabens wachsen die maximalen Ströme mit 85 A/m^2 bzw. 92 A/m^2 sogar um fast 230% bzw. 190% gegenüber dem Randschichtplasma an. Auch die Seitenflächen des schmalen Grabens haben nun einen nennenswerten Ionenstrom mit der maximalen Dichte von 26 A/m^2 zu verzeichnen, der allerdings genauso schnell wieder verschwindet wie zuvor. Interessant ist das Auftreten der zwei Strommaxima auf dem Boden des schmalen Grabens (Abbildung 8.9 d)). Das erste Maximum von 13 A/m^2 bei $t = 35$ ns stammt von den anfangs im Graben vorhandenen Ionen. Ein solches Maximum wurde bei der Simulation ausgehend von einer Floatingpotential-Randschicht nicht beobachtet, weil dort die Ionendichte in Nähe des Grabenbodens zu Beginn des Hochspannungspulses verschwindend klein war. Das zweite Maximum in Abbildung 8.9 d) stammt dagegen wieder von der Ionenwelle. Es ist jedoch bemerkenswert, daß dieses Maximum trotz der überwiegend größeren Ionendichte in der Welle mit 21 A/m^2 sogar 20% kleiner ist als in der Randschichtplasma-Simulation. Ein Vergleich zwischen den Abbildungen 8.4 und 8.8 zeigt jedoch, daß die Ionendichte zum Zeitpunkt des Kontakts der Wellen mit der Bodenfläche ($t = 140$ ns) jeweils etwa gleich ist und damit Ströme in der gleichen Größenordnung erzeugt werden.

Schließlich läßt sich noch feststellen, daß die mittleren Ionenströme auf die verschiedenen Targetsegmente bei Verwendung eines homogenen driftfreien Plasmas mit der Zeit kleiner werden als die entsprechenden Ströme in einem anfänglichen Randschichtplasma. Auf dieses Verhalten wurde bereits in Kapitel 4 im Zusammenhang mit planaren Targets hingewiesen. Der Grund dafür liegt darin, daß in der Simulation ausgehend von einer Floatingpotential-Randschicht stets ein Ionenstrom der Dichte $j_\mathrm{i} = 9.86$ A/m^2 aus dem Plasmabulk in die Randschicht eingekoppelt wird. In der Simulation unter Verwendung eines driftfreien Plasmas fehlt dagegen solch ein Strom. Es werden daher nur diejenigen Ionen auf das Target beschleunigt, die aufgrund der sich bewegenden Schichtkante in die Randschicht gelangen. Da die Expansion der Schicht mit der Zeit jedoch immer langsamer wird und mit Eintreten des neuen Gleichgewichtszustandes der Hochspannungsrandschicht schließlich sogar ganz zum Stillstand kommt, muß auch der Ionenstrom auf das Target immer mehr abnehmen und schließlich ganz verschwinden. Auf den Stegstirnflächen sowie den Wandflächen des breiten Grabens unterschreitet der mittlere Ionenstrom aus der Simulation mit dem homogenen Plasma ab etwa 0.4 bis 0.5 μs den entsprechenden Strom aus der Simulation mit dem Randschichtplasma. Auf der Bodenfläche des schmalen Grabens tritt dieser Fall dagegen erst ab etwa 1 μs ein.

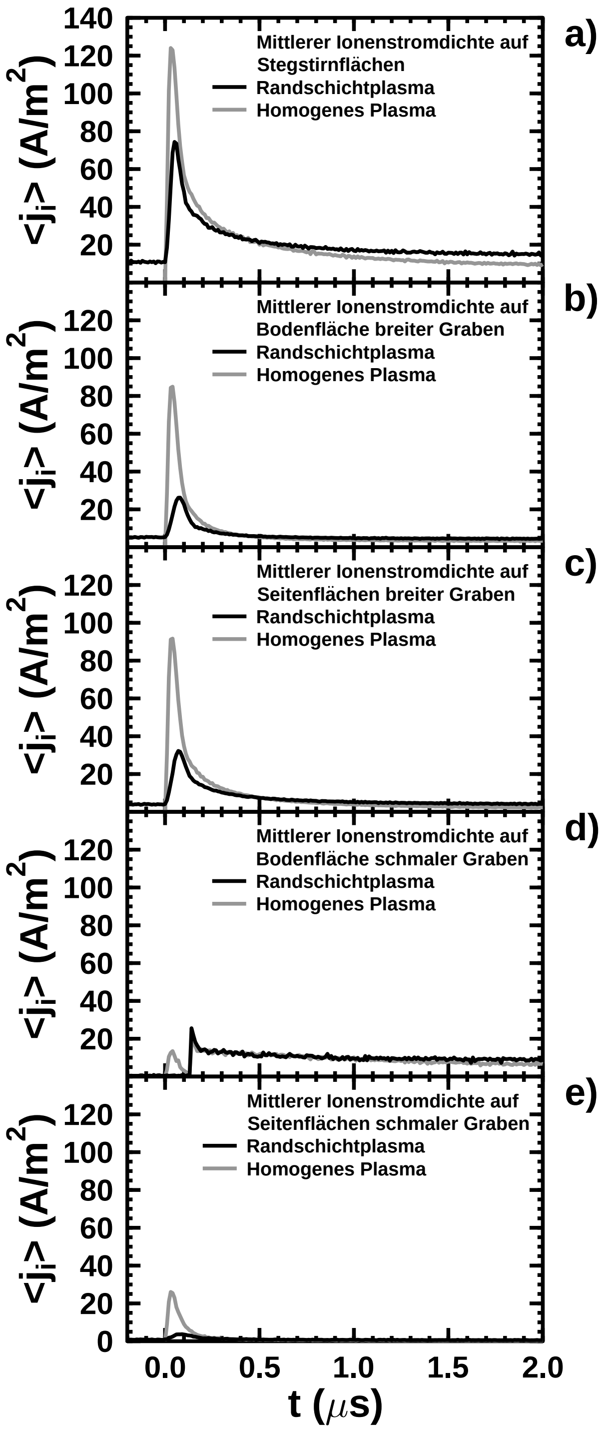

Abbildung 8.9: Vergleich der zeitlichen Entwicklung der mittleren Ionenstromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ auf a) den Stegstirnflächen, b) der Bodenfläche des breiten Grabens, c) den Seitenflächen des breiten Grabens, d) der Bodenfläche des schmalen Grabens und e) den Seitenflächen des schmalen Grabens für den Fall unterschiedlicher Startkonfigurationen (Randschichtplasma mit ausgebildeter Floatingpotential-Randschicht, homogenes Plasma).

8.8 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Physik untersucht, die sich in der Plasmarandschicht in der Umgebung eines zweidimensionalen Targets abspielt, wenn dessen Potential plötzlich vom Floatingpotential auf das Hochspannungspotential von $-1000\,\mathrm{V}$ geändert wird. Es hat sich gezeigt, daß um die in das Plasma hineinragende Doppelstempel-Struktur nach Anlegen der negativen Hochspannung zunächst eine annäherend zylindrische Matrixschicht entsteht. Die Ionen, die sich anfangs in dieser Matrixschicht befinden, werden in dem entstandenen Potentialgefälle auf das Target beschleunigt und führen auf den einzelnen Segmenten der Targetoberfläche innerhalb kurzer Zeit zu verschieden hohen Strommaxima. Die Ionenstromdichte auf den Stegstirnflächen ist dabei durch die fokussierenden Kantenfelder am größten, ähnlich wie es bereits bei der Simulation der Floatingpotential-Randschicht in Kapitel 7 beobachtet wurde. In den schmalen Graben zwischen den beiden Stegen bewegt sich während der Matrixschicht-Implantationsphase eine aus dem Plasma kommende Ionenwelle hinein, die erst nach einer deutlichen Verzögerung den Grabenboden erreicht und dann auch dort zu einem Einsetzen des Implantationsstroms führt. Während der anschließenden Expansionsphase der Randschicht entwickelt sich im Laufe der Zeit immer mehr eine planare Randschicht. Darin werden die aus dem Plasma kommenden Ionen zunächst nur in Richtung der negativen x-Achse beschleunigt und können erst in unmittelbarer Nähe zur Targetoberfläche seitlich abgelenkt werden. Aufgrund ihrer Trägheit und ihrer großen Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung können die Ionen den Feldlinien in Targetnähe aber kaum noch folgen. Das führt dazu, daß sich im Laufe der Zeit eine Dosisverteilung auf der Targetoberfläche entwickelt, bei der die Ionendosis auf den einzelnen Segmenten des Targets jeweils nur noch gering variiert. Insgesamt unterscheidet sich die mittlere Dosis auf den verschiedenen Segmentflächen aber sehr. Die größte mittlere Dosis tritt dabei auf den Stegstirnflächen auf und wird von der mittleren Dosis auf der Bodenfläche des schmalen Grabens gefolgt. Die Seitenwände dieses Grabens werden dagegen am seltensten von Ionen getroffen, weil sich die elektrischen Felder, die von diesen Seitenwänden ausgehen, durch die geringe Grabenbreite gegenseitig so stark schwächen, daß die Ionen nicht auf die Seitenwände gezogen werden. Dagegen erhalten alle Wände des breiten Grabens im Mittel die gleiche Ionendosis. Insgesamt zeigen die Untersuchungen, daß die PIII, zumindest bei makroskopischen Strukturen, wie sie hier untersucht wurden, nicht dazu in der Lage ist, zu einer homogenen Implantation der Ionen zu führen. Eine Vorhersage der Dosisverteilung auf einem strukturierten Target scheint ohne vorherige Computersimulationen kaum noch möglich zu sein. Wie wichtig die richtige Wahl der Startkonfiguration bei solchen Simulationen jedoch ist, haben die Untersuchungen in Abschnitt 8.7 gezeigt. Die Verwendung eines homogenen driftfreien Plasmas als Ausgangszustand führt im Vergleich zu einem Plasma mit ausgebildeter Floatingpotential-Randschicht zunächst zu deutlich größeren Stromspitzen während der Matrixschicht-Implantationsphase. In der anschließenden Phase der expandierenden Randschicht nehmen die Ionenströme jedoch schnell ab, weil in einem driftfreien Plasma keine Sättigungsströme mehr aus dem Plasmainneren in die Randschicht gelangen und damit die Ströme auf das Target mit der Zeit verschwinden.

Kapitel 9

Eigenschaften einer zweidimensionalen Hochspannungsrandschicht

9.1 Einleitung

Im Kapitel 8 wurde die zeitliche Entwicklung sowie die räumliche Verteilung des Ionenstroms und der Ionendosis auf einem zweidimensional Target untersucht, wenn an dieses plötzlich eine negative Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ angelegt wird. Als Ausgangszustand der durchgeführten Simulation diente dabei eine Floatingpotential-Randschicht um das Target herum. In diesem Kapitel soll nun untersucht werden, welche Eigenschaften die stationäre Hochspannungsrandschicht hat, die sich während der an dem Target durchgeführten PIII im Laufe der Zeit entwickelt. Diese Gleichgewichtseigenschaften sind bei hinreichend lange andauerendem Hochspannungspuls entscheidend für die Ionendosisverteilung auf dem Target. In dem simulierten Plasma stellt sich dieser Gleichgewichtszustand schon nach wenigen Mikrosekunden ein.

9.2 Dichteverteilung in der stationären Hochspannungsrandschicht

Die simulierten Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen in der stationären Hochspannungsrandschicht bei Anliegen des Target-Potentials von $-1000\,\mathrm{V}$ sind in den Abbildungen 9.1 und 9.2 dargestellt. Wie man in den beiden Abbildungen sehr gut sehen kann, hat sich die Plasmarandschicht im stationären Fall soweit vom Target zurückgezogen, daß die genaue Struktur des Targets keinen besonderen Einfluß mehr auf den Aufbau der Randschicht hat. Die Plasmarandschicht ist jetzt beinahe wieder planar, wie die Verläufe der

Teilchendichte-Isolinien in den beiden Darstellungen zeigen. Die Ausdehnung der Randschicht und die Position der Schichtkante läßt sich, wie im Fall der Floatingpotential-Randschicht, wieder gut erkennen, wenn man die relative Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ betrachtet, die in Abbildung 9.3 dargestellt wird. Die Orte, an denen die Elektronendichte um 5% unter die Ionendichte abgenommen hat, an denen also $n_\mathrm{e} = 0.95\, n_\mathrm{i}$ gilt, befinden sich auf einer leicht gekrümmten Linie an der Position $x = 1.08 \pm 0.04\,\mathrm{cm}$. Diese Linie befindet sich genau genommen schon in der Schicht, da die Ionen und Elektronen an der Schichtkante selbst ja gerade noch die gleichen Dichten haben. Daher muß sich die Schichtkante sogar noch weiter vom Target entfernt befinden. Die Schichtdicke beträgt also unmittelbar vor den beiden Stegen mindestens 6 mm und erreicht im Zentrum des breiten Grabens sogar mehr als 1 cm. Im Vergleich dazu hatte die Schicht in der stationären planaren Hochspannungsrandschicht eine Dicke von etwa 8 mm, die zwischen diesen Werten liegt. Innerhalb der Schicht fallen die Dichten der beiden Teilchenarten schnell ab. Während die Elektronendichte aber schon ab $x = 9.0 \pm 0.3\,\mathrm{mm}$ verschwindet, liegt die Ionendichte in der gesamten Schicht in der Größenordnung von $10^{15}\,\mathrm{m}^{-3}$.

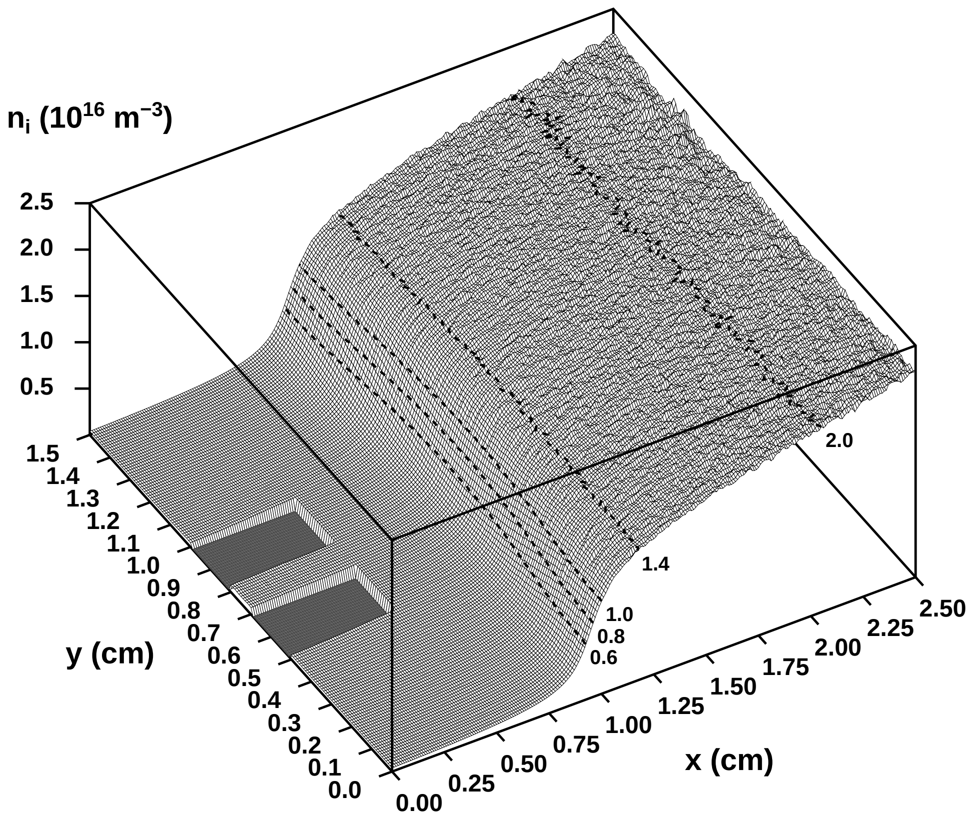

Abbildung 9.1: Dichteverteilung der Ionen in der simulierten stationären Hochspannungsrandschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien der Ionendichte dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

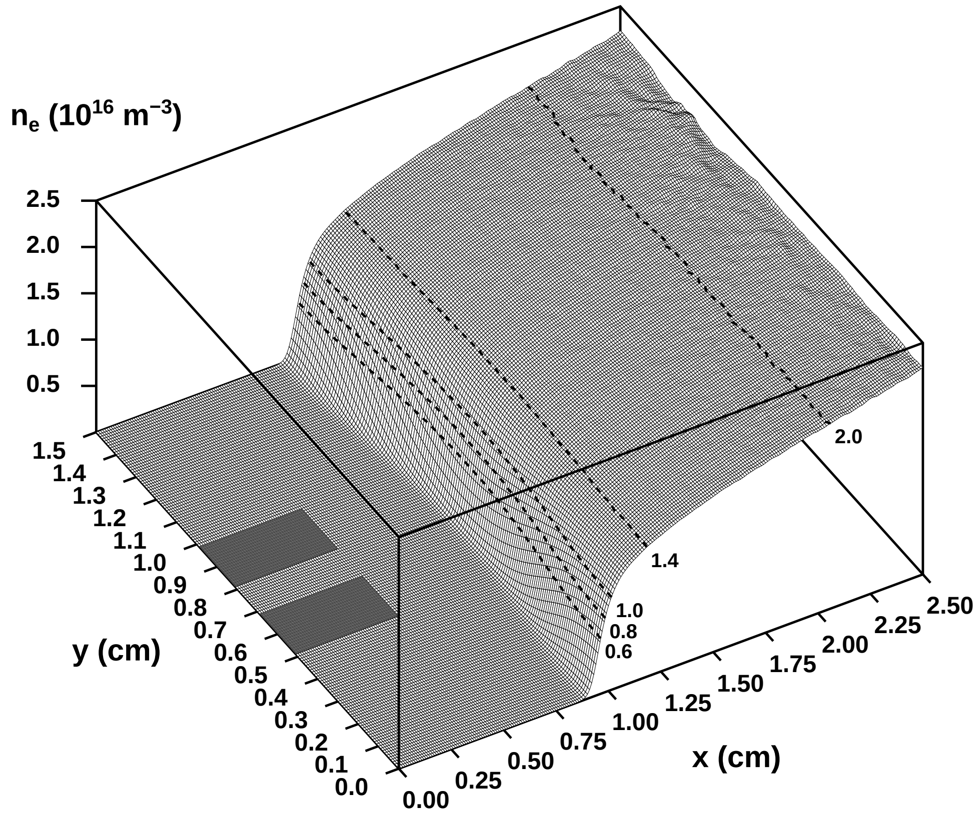

Abbildung 9.2: Dichteverteilung der Elektronen in der simulierten stationären Hochspannungsrandschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien der Elektronendichte dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

9.3 Verteilung des Potentials und des elektrischen Feldes

Aufgrund der geringen Teilchendichten im Bereich der Schicht erstreckt sich der Potentialabfall von $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$ über einen deutlich größeren Bereich als in der Matrixschicht, wie in Abbildung 9.4 gut zu erkennen ist. Die Orte, an denen das elektrische Potential von $0\,\mathrm{V}$ im Plasmabulk auf $\Phi = -k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ abgefallen ist, befinden sich an der Stelle $x = 1.17 \pm 0.03\,\mathrm{cm}$. Nach dem Bohmkriterium sollten diese Orte die Schichtkante markieren. Wenn man beachtet, daß die Position $x = 1.08 \pm 0.04\,\mathrm{cm}$, wo die Elektronendichte um 5% unter die Ionendichte abgesunken ist, bereits zur Schicht gehört und damit noch näher am Target liegt, dann stimmen diese Beobachtungen gut miteinander überein. Ähnlich wie in der Matrixschicht tritt das stärkste Potentialgefälle vor den beiden Stegen auf, weshalb das elektrische Feld dort Beträge von $4\,\mathrm{kV/cm}$ in der Mitte der Stegstirn-

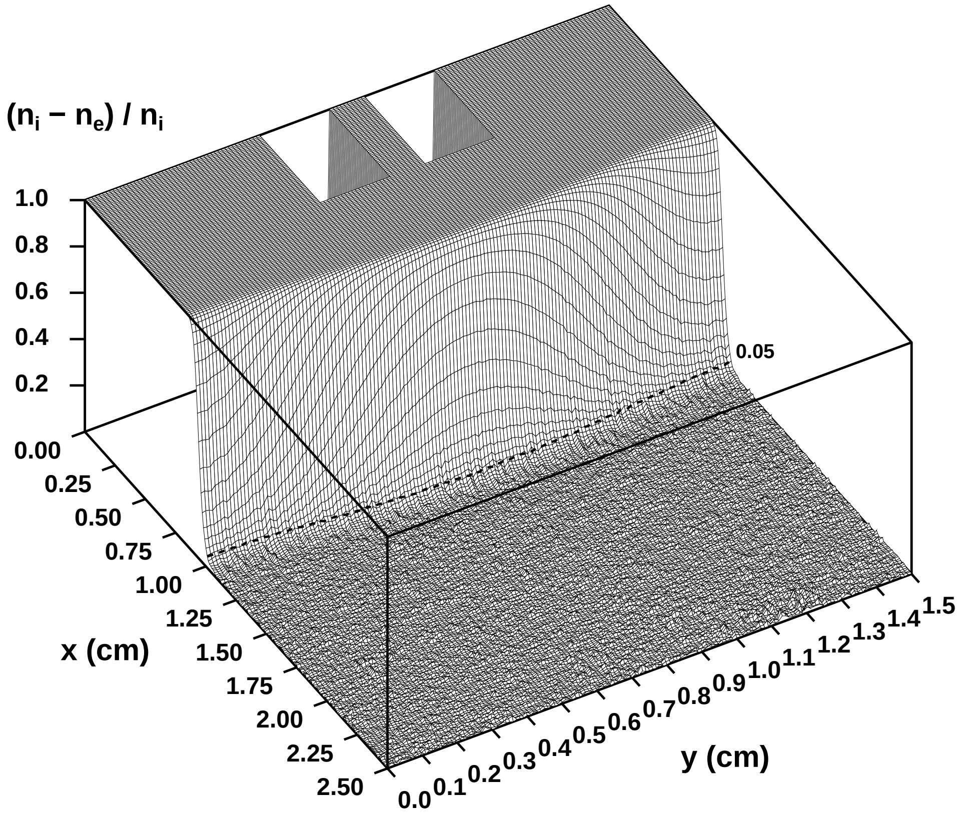

Abbildung 9.3: Verteilung des auf die Ionendichte bezogenen relativen Unterschieds zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$. Die gestrichelte Linie verbindet die Orte, an denen die Elektronendichte um 5% unter die Ionendichte abgesunken ist, also $n_\mathrm{e} = 0.95\, n_\mathrm{i}$ gilt. Diese Linie verläuft eigentlich schon in der Schicht, ihre Lage stimmt jedoch wegen der geringen Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte annäherend mit der der Schichtkante überein. Man beachte die gegenüber den Abbildungen 9.1 und 9.2 gedrehte Lage des Koordinatensystems.

flächen annimmt, wie Abbildung 9.5 zeigt. An den Kanten der beiden Stege treten wieder die schon mehrfach beobachteten Feldspitzen auf, die an den Außenkanten eine Höhe von 20 kV/cm und an den Innenkanten etwa 12 kV/cm erreichen. Diese sorgen für die in Kapitel 8 beschriebene Fokussierung der Ionen auf die Stegstirnflächen sowie auf die oberen Regionen der Seitenwände der Gräben. Der beinahe lineare Potentialabfall im Bereich des breiten Grabens führt dagegen zu dem nahezu konstanten Feld im Inneren des Grabens, das in der Größenordnung von 1 kV/cm liegt. Schließlich sei noch auf das elektrische Feld im Inneren des schmalen Grabens hingewiesen: Genau wie in der Matrixschicht hat dieser Graben mit 1 mm gegenüber der Schichtdicke von etwa 1 cm eine so geringe Breite, daß das Potential überall im Grabeninneren fast konstant ist. Infolge dessen verschwindet das elektrische Feld in dem schmalen Graben auch nahezu vollständig.

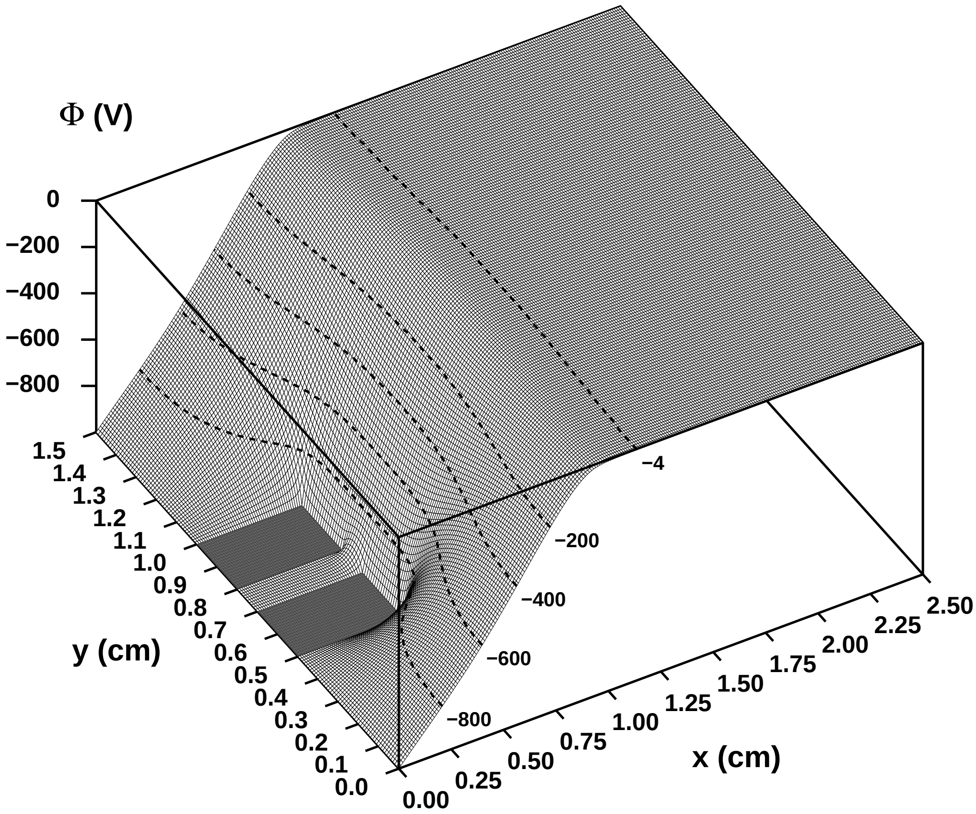

Abbildung 9.4: Verteilung des elektrischen Potentials Φ in der simulierten stationären Hochspannungsrandschicht. Die gestrichelten Linien stellen Isolinien des Potentials dar und dienen der besseren Sichtbarkeit von Krümmung und Gefälle in der Verteilung.

9.4 Geschwindigkeitsverteilung der Ionen

Die Geschwindigkeit der Ionen nimmt in der Schicht von der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4.4\,\mathrm{km/s}$, die sie an der Stelle $x = 1.20 \pm 0.02\,\mathrm{cm}$ erreichen, bis zur Targetoberfläche auf mehr als $69\,\mathrm{km/s}$ zu. Die gesamte Verteilung des Betrags der mittleren Ionengeschwindigkeit v_i ist in Abbildung 9.6 dargestellt. Während das Bohmkriterium im Fall der Floatingpotential-Randschicht aufgrund der Krümmung der Schicht und der damit verbundenen Divergenz des Ionenstroms (Abschnitt 7.3.4) nicht überall in der Lage war, die Position der Schichtkante zu beschreiben, deckt sich in der stationären Hochspannungsrandschicht die Lage der nach dem Bohmkriterium bestimmten Schichtkante gut mit der nach Abbildung 9.3 ermittelten Position der Schichtkante.

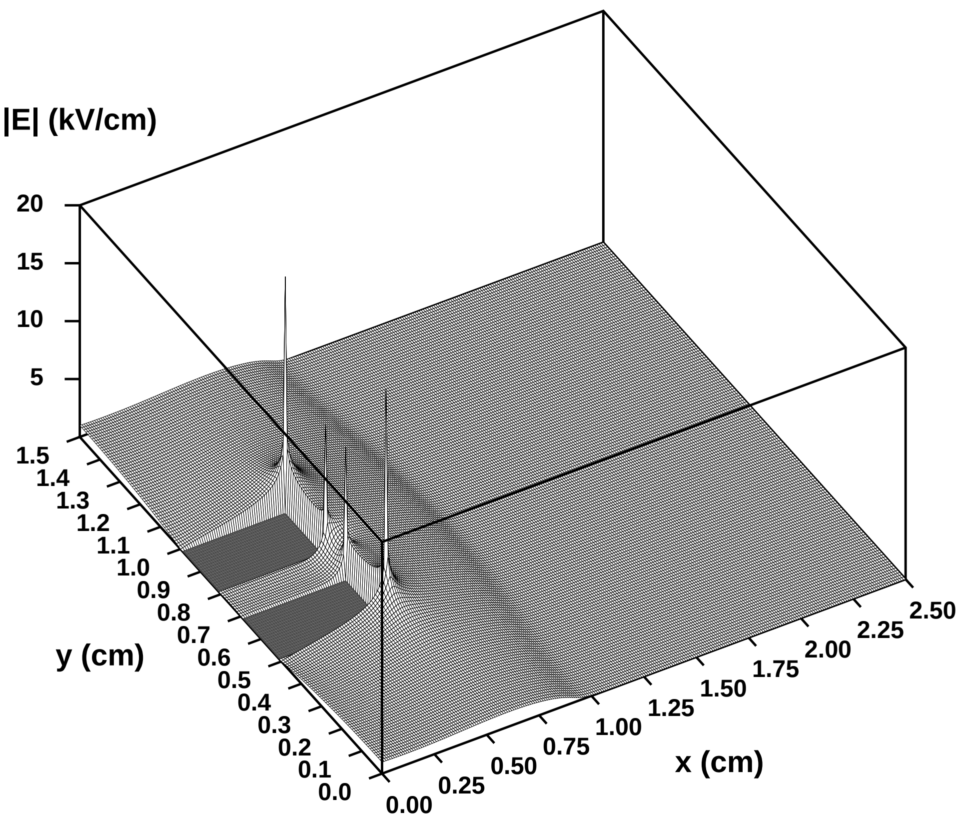

Abbildung 9.5: Verteilung des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ in der simulierten stationären Hochspannungsrandschicht.

9.5 Strom- und Winkelverteilung der Ionen auf der Targetoberfläche

Bei der Untersuchung der Floatingpotential-Randschicht in Abschnitt 7.4 hat sich gezeigt, daß die Verteilung der Ionenstromdichte auf der Targetoberfläche qualitativ gut mit dem Verlauf des elektrischen Feldbetrages auf dem Target übereinstimmt. Das hat seine Ursache darin, daß sich die Randschicht, aufgrund des geringen Potentialunterschieds von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ zwischen Plasmabulk und Target, gut an das Target anpassen kann und der Verlauf der Schichtkante der Struktur der Targetoberfläche weitestgehend folgen kann. Wie sich jedoch in den Abschnitten 9.2 bis 9.4 in diesem Kapitel gezeigt hat, ist das in der Hochspannungsrandschicht nicht mehr der Fall. Die Schichtkante hat sich so weit vom Target entfernt, daß der Targetaufbau für ihren Verlauf kaum noch eine Rolle spielt und die Schichtkante daher nahezu planar geformt ist. Wie Abbildung 9.4 gezeigt hat, tritt erst tief in der Randschicht, wenn das Potential gegenüber dem Plasmainneren bereits um einige 100 V abgefallen ist, eine Anpassung der Potentialverteilung an die Targetober-

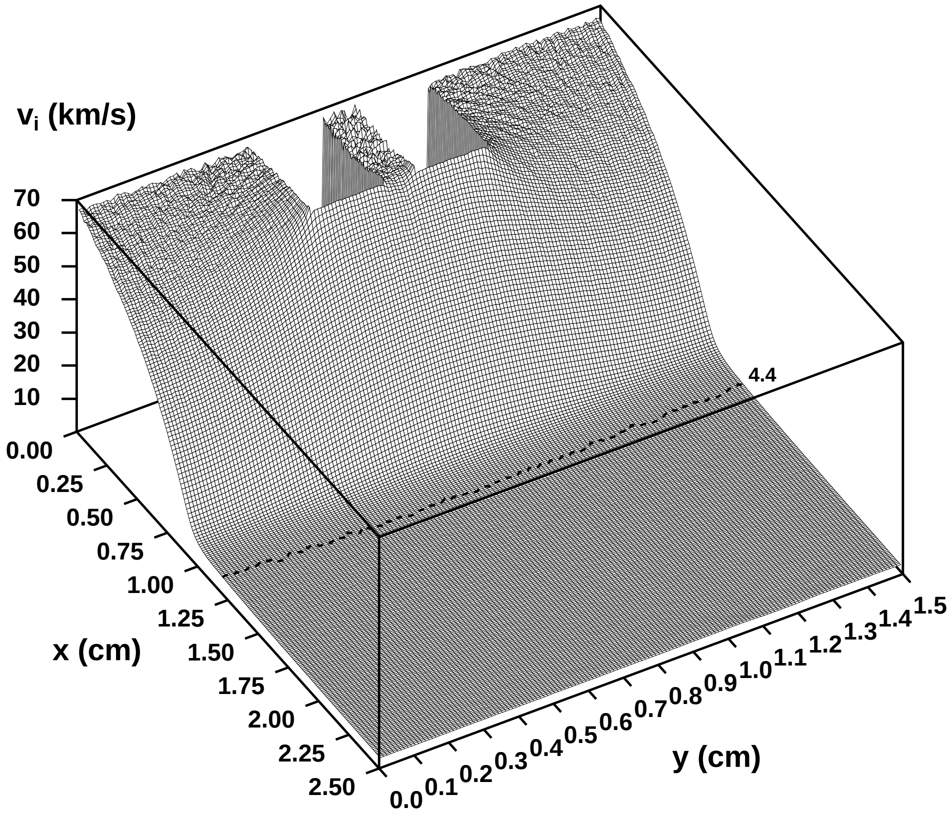

Abbildung 9.6: Verteilung des Betrags der mittleren Ionengeschwindigkeit v_i. Die gestrichelte Linie stellt die Isotache zu $v_\mathrm{i} = 4.4\,\mathrm{km/s}$ dar und markiert die Positionen, an denen Ionen die Bohmgeschwindigkeit erreichen. Man beachte die gegenüber Abbildung 9.4 gedrehte Lage des Koordinatensystems.

fläche ein. Die aus dem Plasmabulk kommenden Ionen werden daher bei Eintritt in die Randschicht zunächst überall nahezu parallel zur negativen x-Achse auf hohe Geschwindigkeiten beschleunigt. Erst in der unmittelbaren Nähe zur Targetoberfläche tritt dann ein nicht verschwindendes elektrisches Feld auf, das auch schief zur x-Achse oder sogar parallel zur y-Achse orientiert ist. Aufgrund der Trägheit der Ionen und ihrer dann bereits sehr großen Geschwindigkeitskomponente in Richtung der negativen x-Achse können diese den elektrischen Feldlinien aber nicht mehr folgen. Sie treffen daher überall unter vergleichsweise geringen Ablenkwinkeln ϑ_x, die relativ zu x-Achse gemessen werden, auf das Target. Das ist in Abbildung 9.7 gut zu sehen. Auf den Stegstirnflächen nehmen die Ablenkwinkel unter dem Einfluß der äußeren Kantenfelder von bis zu $20\,\mathrm{kV/cm}$ Stärke von innen nach außen zu und erreichen an der Außenkante maximal 15°. Dieser Zuwachs setzt sich dann zunächst auf den Stegaußenseiten (Seitenwände des breiten Grabens) fort, wo die Ablenkwinkel mit $\vartheta_\mathrm{x} = 28.4°$ in der Flächenmitte ihre Maximalwerte auf dem gesamten Target erreichen. Ähnlich wie im Fall der Floatingpotential-Randschicht treten in der

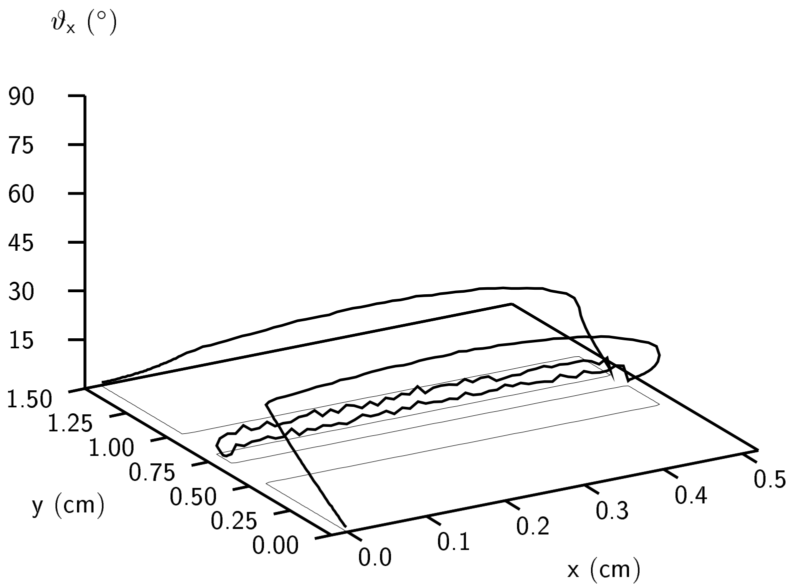

Abbildung 9.7: Verteilung des Betrags der relativ zur x-Achse gemessenen Ionenablenkwinkel ϑ_x auf der Targetoberfläche. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Targetoberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

Umgebung der Stegaußenseiten die größten transversalen Feldkomponenten auf. Dadurch werden die Ionen, die die Stegstirnflächen verfehlt haben, mit zunehmender Tiefe in dem breiten Graben immer mehr auf das Target umgelenkt. Zum Boden des breiten Grabens hin fallen die Ablenkwinkel dann jedoch wieder leicht ab und erreichen direkt an den konkaven Ecken nur noch Werte um $\vartheta_x = 25°$. Diese Abnahme läßt sich wie folgt begründen: Mit zunehmendem Abstand, mit dem die Ionen an den Stegstirnflächen vorbeifliegen, wird das auf sie wirkende elektrische Feld immer schwächer, wie der Feldverteilung in Abbildung 9.5 zu entnehmen ist. Als Folge davon werden die Ionen immer weniger aus ihrer anfangs zur x-Achse parallelen Bewegung abgelenkt und können die Stegaußenseiten nur noch weiter unten im Graben erreichen. Gleichzeitig wird der Betrag des elektrischen Feldes allgemein sowie die Feldkomponente in y-Richtung mit Annäherung an die konkave Ecke des breiten Grabens immer geringer. Selbst wenn also ein Ion tief im Graben noch in die Nähe der Seitenwände gelenkt wird, ist die weitere Ablenkung seiner Trajektorie dort deutlich schwächer als in der Eingangsregion des Grabens. Dadurch nehmen die Winkel ϑ_x, mit denen die Ionen auf die Seitenwänden des Grabens treffen, nach unten immer mehr ab. Auf dem Boden des breiten Grabens setzt sich die Abnahme der Winkel bis auf $\vartheta_x = 1.5°$ in dessen Mitte fort, da das elektrische Feld dort wieder zunehmend parallel zur x-Achse orientiert ist. In dem schmalen Graben schließlich erreichen die Ablenkwinkel der Ionentrajektorien nur noch Werte zwischen 0.8° in der Mitte und 2.6° an den Rändern des Grabenbodens sowie im Mittel 6° auf den Seitenflächen. Der Grund für diese niedrigen Werte läßt sich ebenfalls in Abbildung 9.5 erkennen: Mit Ausnahme der Region nahe des

Grabeneingangs herrscht im Inneren des schmalen Grabens ein so kleines elektrisches Feld, daß die Ionen, die alle nahezu parallel zur x-Achse in den Graben eindringen, dadurch nur geringfügig aus ihrer Anfangsrichtung abgelenkt werden können.

Während die Ablenkwinkel in anschaulicher Weise dazu dienen, die Trajektorien der Ionen nachzuvollziehen, spielen die relativ zur Flächennormale gemessenen Winkel ϑ, unter denen die Teilchen in die Targetoberfläche eindringen, eine sehr wichtige Rolle bei der technischen Nutzung der PIII, denn diese beeinflussen die Zerstäubung der Targetoberfläche sehr stark. Die Zerstäubungsausbeute eines Kupfer-Targets liegt bei senkrechtem Beschuß mit Argon-Ionen der Energie 1 keV in der Größenordnung von etwa $Y_0 = 3$ Kupfer-Atomen pro Argon-Ion [Behrisch, 1981; Nastasi *et al.*, 1996]. Die Ausbeute Y wächst mit zunehmendem Beschußwinkel ϑ sogar noch an, weil die Ionenenergie dabei immer näher an der Targetoberfläche deponiert wird. Als Folge davon tritt bei Winkeln von $\vartheta \approx 60 - 70°$ ein Maximum von Y/Y_0 zwischen 3 und 4 auf. Für noch größere Beschußwinkel fällt die Zerstäubungsausbeute aber wieder stark ab, weil die Ionen in der Realität dann sogar von der Targetoberfläche reflektiert werden. Die simulierte Verteilung der Winkel ϑ, unter denen die Ionen in der Hochspannungsrandschicht auf die Targetoberfläche treffen, ist nun in Abbildung 9.8 dargestellt. Während sich die Winkelverteilung auf den Grabenböden sowie auf den Stegstirnflächen gegenüber Abbildung 9.7 nicht verändert, kommt es auf den Seitenflächen der beiden Gräben zu einem Sprung von ϑ_x auf $\vartheta = 90° - \vartheta_\mathrm{x}$. Auf den beiden Seitenwänden des breiten Grabens (Außenseiten der beiden Stege) treffen die Ionen daher mit Winkeln ϑ zwischen 61.6° in der Mitte

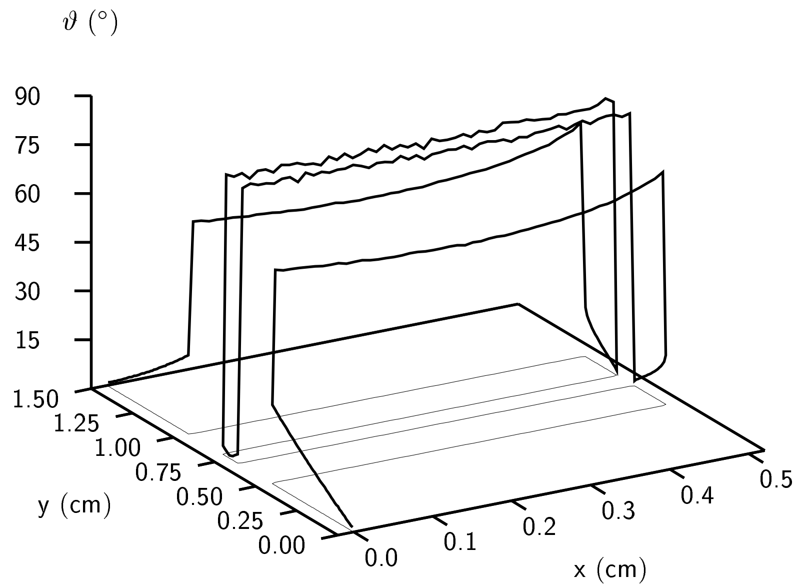

Abbildung 9.8: Verteilung des Betrags der auf die jeweilige Flächennormale der Targetoberfläche bezogenen Ionen-Aufschlagwinkel ϑ. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Oberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

und 65° bzw. 72° an den beiden Enden auf. Diese Winkel liegen genau in dem Bereich, in dem die Zerstäubungsausbeute ihr Maximum erreicht. In dem Beispiel eines Kupfer-Targets sollten daher pro auftreffendem Argon-Ion etwa $Y \approx 3.5 \cdot Y_0 \approx 10$ Kupfer-Atome zerstäubt werden. Die Seitenwände des schmalen Grabens werden dagegen von Ionen nur unter streifenden Winkeln von etwa 84° getroffen. Ein Großteil dieser Ionen könnte daher in der Realität von den Seitenwänden reflektiert werden und ebenfalls den Grabenboden erreichen, wie von Ensinger *et al.* zur Erklärung ihrer experimentellen Meßdaten bereits argumentiert wurde [Ensinger *et al.*, 1999; Ensinger *et al.*, 2000].

Zu Beginn dieses Abschnitts wurde bereits bei der Diskussion der Ionen-Ablenkwinkel ϑ_x betont, daß die Ionen bei Eintritt in die Randschicht zunächst überwiegend in negative x-Richtung beschleunigt und erst in der Nähe des Targets aus ihrer zur x-Achse parallelen Bewegungsrichtung abgelenkt werden. Wegen ihrer Trägheit und der großen Geschwindigkeitskomponente in Richtung der negativen x-Achse bleibt ihre Bewegungsrichtung jedoch trotz des ablenkenden elektrischen Feldes weitestgehend erhalten. Das hat zur Folge, daß die Verteilung der Ionenstromdichte j_i auf der Targetoberfläche zumindest auf den einzelnen Segmentflächen nahezu konstant ist, wie Abbildung 9.9 zeigt. Die größte Variation tritt dabei auf den Stegaußenseiten auf, wo die Stromdichte von 2.2 A/m^2 an den konkaven Ecken unten auf einen Maximalwert von etwa 4.9 A/m^2 ansteigt, der in einer Entfernung von 1 mm von den konvexen Kanten oben auftritt. Im Mittel liegt der Strom auf diesen Flächen bei 3.69 A/m^2. Dieser Wert ist zusammen mit den mittleren Stromdichten auf den übrigen Segmentflächen des Targets, die nach Abbildung 9.9 jeweils näherungsweise konstant sind, in Tabelle 8.1 auf Seite 127 aufgeführt.

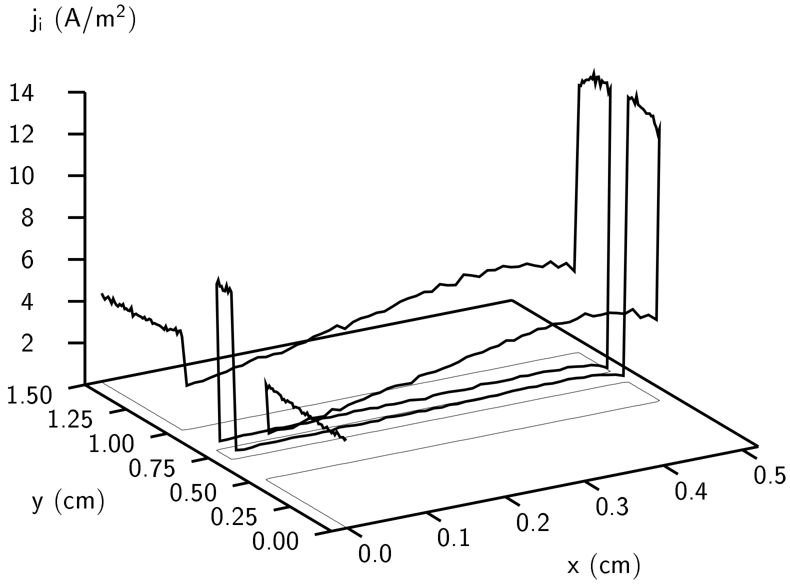

Abbildung 9.9: Verteilung der Ionenstromdichte j_i auf dem Target. Die dünne Linie symbolisiert den Verlauf der Targetoberfläche und dient der besseren Sichtbarkeit.

Unter der Annahme, daß das Target aus Kupfer besteht, lassen sich abschließend noch die mittlere Zerstäubungsraten

$$\langle Z \rangle = \frac{\langle j_\mathrm{i} \rangle \cdot Y}{e \cdot n_\mathrm{Cu}} \tag{9.1}$$

der einzelnen Targetsegmentflächen unter Verwendung der für Kupfer geltenden Zerstäubungsausbeuten Y sowie der simulierten mittleren Ionenstromdichten $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ berechnen. Dabei hat n_Cu die Bedeutung der Teilchendichte von festem Kupfer und beträgt $n_\mathrm{Cu} = 8.45 \cdot 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ [Kopitzki, 1989]. Tabelle 9.1 enthält die Zusammenfassung der nach Gleichung (9.1) berechneten mittleren Zerstäubungsraten $\langle Z \rangle$ auf den verschiedenen Segmentflächen des Targets. Die Seitenwände des schmalen Grabens sind wegen der geringen mittleren Stromdichte sowie des streifenden Einfalls der Ionen nicht in der Tabelle enthalten, weil beides zusammen zu einer vernachlässigbaren Zerstäubungsrate führt. Für die Stegstirnflächen sowie die Bodenflächen beider Gräben wird für die Zerstäubungsausbeute der Wert $Y = 3$ verwendet, der bei senkrechtem Beschuß mit 1 keV-Argon-Ionen auftritt. Für die Seitenflächen des breiten Grabens wird dagegen eine Zerstäubungsausbeute von $Y = 10$ zugrunde gelegt, die den simulierten Einfallswinkeln von etwa 65° entspricht. Obwohl die Seitenflächen des breiten Grabens von allen aufgeführten Targetsegmenten dem Ionenstrom mit der kleinsten Dichte ausgesetzt sind, ist die mittlere Zerstäubungsrate mit $\langle Z \rangle = 27.3\,\text{Å/s}$ dort beinahe genauso groß wie auf den Stegstirnflächen. Letztere werden zwar von den Ionen mit der größten Stromdichte getroffen, der senkrechte Beschuß führt dort jedoch nur zu der unwesentlich größeren mittleren Zerstäubungsrate von 29.8 Å/s. Ähnlich verhält es sich bei der Bodenfläche des schmalen Grabens, wo die mittlere Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ gegenüber den Seitenflächen des breiten Grabens zwar mehr als doppelt so groß ist, die Oberfläche wegen des senkrechten Ioneneinfalls jedoch nur mit der deutlich kleineren Rate von 17.7 Å/s zerstäubt wird.

Tabelle 9.1: Mittlere Zerstäubungsraten $\langle Z \rangle$ der verschiedenen Segmentflächen des Targets, berechnet nach Gleichung (9.1). Die verwendete Abkürzung ML in der Kopfzeile der letzten Spalte steht für die Dicke einer Monolage in festem Kupfer und soll nährungsweise $n_\mathrm{Cu}^{-1/3} = 2.28\,\text{Å}$ betragen:

Segmentflächen des Targets	Y	$\langle j_\mathrm{i} \rangle$ (A/m^2)	$\langle Z \rangle$ (Å/s)	$\langle Z \rangle$ (ML/s)
Stegstirnflächen	3	13.44	29.8	13.1
Seitenflächen breiter Graben	10	3.69	27.3	12.0
Bodenfläche breiter Graben	3	4.31	9.6	4.2
Bodenfläche schmaler Graben	3	7.99	17.7	7.8

9.6 Vergleich zwischen simulierter und berechneter Potentialverteilung

Auch hier ist es, ähnlich wie im Fall der zweidimensionalen Floatingpotential-Randschicht, interessant zu sehen, inwieweit die zweidimensionale Hochspannungsrandschicht an verschiedenen Stellen durch das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz nach Gleichung (3.18) beschrieben werden kann. Dazu wurden aus der simulierten Potentialverteilung nach Abbildung 9.4 wieder eindimensionale Verteilungen längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) extrahiert und darin jeweils die Stelle x^* gesucht, wo $\Phi(x^*) = -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ gilt. Anschließend wurden dort die x-Komponente der simulierten Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{x}(x^*)$, der Ionenstromdichte $j_\mathrm{x}(x^*)$ sowie des elektrischen Feldes $E_\mathrm{x}(x^*)$ abgelesen und als Parameter v_0, j_0 bzw. E_0 in das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz eingesetzt. Diese Werte sind in Tabelle 9.2 zusammengefaßt. Mit Hilfe der Gleichung (3.18) wurden daraus Potentialverteilungen berechnet, die zusammen mit den Verteilungen aus der Simulation in Abbildung 9.10 dargestellt sind. Wie man in der Abbildung sehen kann, ist das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz, im Gegensatz zu dem Fall der Floatingpotential-Randschicht, nun nicht mehr in der Lage, die simulierten Verteilungen auch nur qualitativ zu beschreiben. In Abbildung 9.10 a) steigt die berechnete Verteilung gegenüber der simulierten viel zu schnell an und erreicht bereits bei $x = 6.05\,\mathrm{mm}$ sein Maximum. Gleichzeitig besitzt letztere in weiten Teilen der Schicht eine positive Krümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} > 0$ in x-Richtung. In Abbildung 9.10 b) dagegen wächst die simulierte Potentialverteilung vom Target aus zunächst schneller an und krümmt sich dann auch stärker, als es dem modifizierten Child-Langmuir-Gesetz entspricht.

Die Ursache für diese Abweichungen liegt darin, daß die Ionenstromdichte in der simulierten Schicht nicht konstant ist, wie bei der Berechnung nach dem Child-Langmuir-Gesetz angenommen wurde. Vielmehr werden durch die Kantenfelder mehr Ionen auf die Stegstirnflächen fokussiert, was zu einer Zunahme der Ionenstromdichte bei Annäherung an die Stegstirnflächen führt. Ganz ähnlich kommt es zu einer Abnahme der Ionenstrom-

Tabelle 9.2: Zusammenfassung der x-Komponenten der simulierten Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{x}(x^*)$, der Ionenstromdichte $j_\mathrm{x}(x^*)$ sowie des elektrischen Feldes $E_\mathrm{x}(x^*)$ an der Stelle x^*, wo $\Phi(x^*) = -2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/e$ gilt. Die Daten wurden längs der Linien $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) aus den simulierten zweidimensionalen Verteilungen gewonnen und als Parameter v_0, j_0 bzw. E_0 in das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz eingesetzt.

y	x^*	$j_\mathrm{x}(x^*)$	$v_\mathrm{x}(x^*)$	$E_\mathrm{x}(x^*)$
0.0 cm	9.35 mm	9.34 A/m^2	−9023 m/s	−28285 V/m
0.6 cm	10.16 mm	10.24 A/m^2	−9074 m/s	−31395 V/m

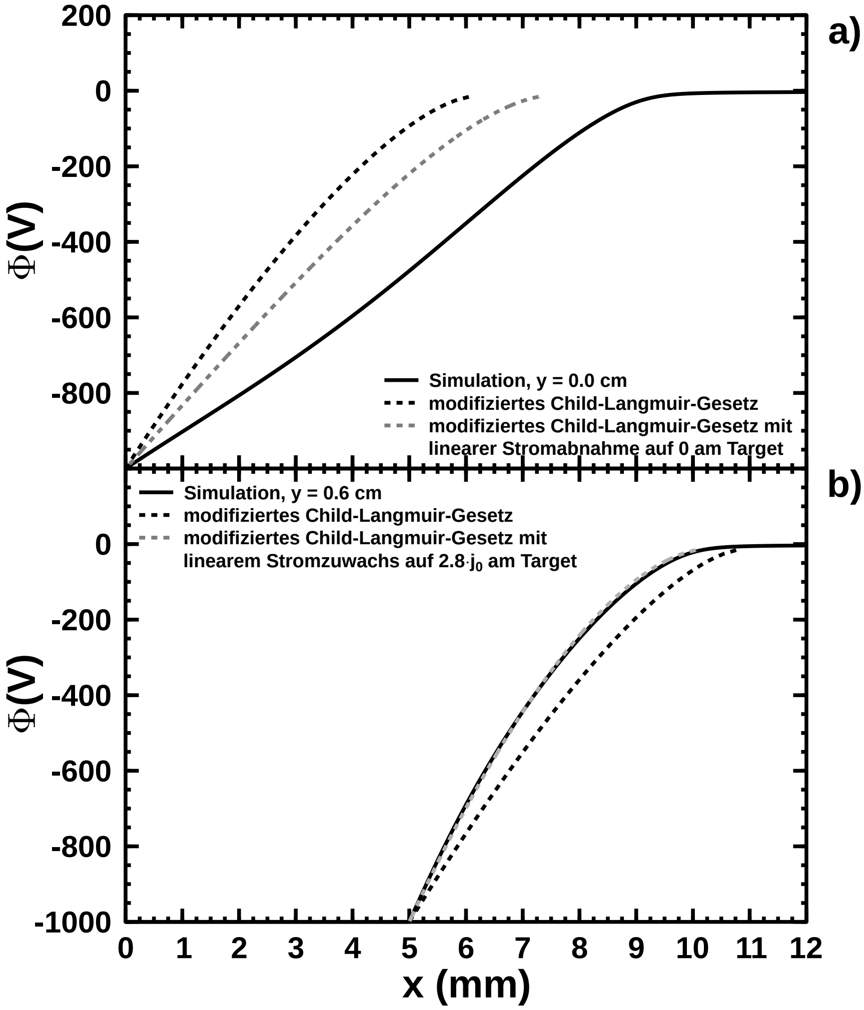

Abbildung 9.10: Vergleich der simulierten Potentialverteilung a) längs der Linie $y = 0.0\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse des breiten Grabens) und b) längs der Linie $y = 0.6\,\mathrm{cm}$ (Symmetrieachse eines Stegs) mit den nach dem modifizierten Child-Langmuir-Gesetz berechneten Verteilungen (gestrichelte schwarze Linien). Daneben sind noch Verteilungen eingezeichnet, die anhand des Modellansatzes (9.4) unter der Annahme einer linearen Änderung des Ionenstroms in der Schicht berechnet wurden (gestrichelte graue Linien). In Abbildung a) nimmt der Ionenstrom dabei in der Schicht von j_0 bei $x = 7.28\,\mathrm{mm}$ linear auf den Wert 0 am Target ab, in b) dagegen wächst der Strom in der Schicht von j_0 bei $x = 10.05\,\mathrm{mm}$ auf $2.8 \cdot j_0$ am Target an.

dichte mit zunehmender Tiefe im Graben, weil sich dort die Ionen auf mehrere Wände aufteilen müssen. Um den Einfluß der variablen Stromdichte wenigstens qualitativ erfassen zu können, wurde daher ein einfaches Modell entwickelt, bei dem die Ionenstromdichte und damit auch die Ionendichte in einer eindimensionalen Schicht einer linearen Änderung unterworfen ist. In diesem Modell wurde ein dem ursprünglichen Ausdruck aus Gleichung (3.6) ähnlicher Ansatz,

$$n_\mathrm{i}(x) = n_0 \cdot \left\{ 1 + \frac{2e}{m_\mathrm{i} {v_0}^2} [\Phi(D) - \Phi(x)] \right\}^{-1/2}, \tag{9.2}$$

der den Verlauf der Ionendichte in einer Schicht beschreibt, die sich jetzt im Bereich $d \leq x \leq D$ befindet, um einen linearen Korrekturfaktor $1 + \gamma \cdot (D - x)$ erweitert. Je nachdem, ob γ größer, kleiner oder gleich Null ist, nimmt dann der Strom zwischen $x = D$ und $x = d$ linear zu, ab oder er bleibt konstant. Der gesamte Ausdruck wurde dann in die eindimensionale Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{e n_\mathrm{i}(x)}{\epsilon_0} \cdot [1 + \gamma \cdot (D - x)] \tag{9.3}$$

$$= -\frac{e n_0}{\epsilon_0} \cdot [1 + \gamma \cdot (D - x)] \cdot \left\{ 1 + \frac{2e}{m_\mathrm{i} {v_0}^2} [\Phi(D) - \Phi(x)] \right\}^{-1/2} \tag{9.4}$$

eingesetzt und numerisch mittels der Methode der Finiten Differenzen integriert [Press *et al.*, 1992].

Die auf diese Weise berechneten Potentialverteilungen sind ebenfalls in Abbildung 9.10 dargestellt. Dabei wurde für die Verteilung in Abbildung 9.10 b), die sehr gut mit dem simulierten Verlauf übereinstimmt, die Zuwachsrate $\gamma = 350\,\mathrm{m}^{-1}$ verwendet. Zusammen mit $d = 5\,\mathrm{mm}$ und dem sich einstellenden Wert $D = 10.05\,\mathrm{mm}$ entspricht diese Rate einem Stromzuwachs von j_0 bei $x = 10.05\,\mathrm{mm}$ auf $2.8 \cdot j_0$ auf der Stegstirnfläche bei $x = 5\,\mathrm{mm}$. Zwar erreicht der Ionenstrom in der Simulation auf den Stegstirnflächen mit $13.44\,\mathrm{A/m}^2$ (siehe Tabelle 9.1) nur das 1.3-fache des Anfangswertes j_0, trotzdem ist die gute Übereinstimmung angesichts des sehr einfachen Modellansatzes überraschend und spricht für den vermuteten Einfluß der zunehmenden Stromdichte auf die Form der Potentialverteilung. Für den Bereich des Grabens wurde dagegen eine mit der Rate $\gamma = -137\,\mathrm{m}^{-1}$ abnehmende Stromdichte angesetzt und die sich daraus ergebende Verteilung in Abbildung 9.10 a) eingezeichnet. Mit $d = 0\,\mathrm{mm}$ und dem sich einstellenden Wert $D = 7.28\,\mathrm{mm}$ wird dadurch eine Abnahme der Stromdichte von j_0 bei $x = 7.28\,\mathrm{mm}$ auf den Wert Null auf dem Grabenboden bei $x = 0\,\mathrm{mm}$ modelliert. Wie man in der Abbildung sieht, ergibt sich dadurch wegen der zunehmenden Schichtausdehnung zwar eine qualitative Verbesserung der beschriebenen Potentialverteilung, trotzdem zeigt die simulierte Verteilung immer noch einen etwas anderen Verlauf mit einer noch größeren Ausdehnung der Schicht. Diese große Ausdehnung ist offenbar eine Folge der in weiten Teilen positiven Potentialkrümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} > 0$ in x-Richtung. Eine solche Krümmung kann durch ein eindimensionales Modell gar nicht beschrieben werden, weil das Potential in einer positiv geladenen Raumladungsschicht nach der eindimensionalen Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{e n_\mathrm{i}}{\epsilon_0} < 0 \tag{9.5}$$

nur negativ gekrümmt sein kann. Hier versagt das einfache Modell also prinzpiell. In einer zweidimensionalen positiven Raumladungsschicht ist dagegen eine positive Krümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} > 0$ möglich, wenn gleichzeitig in y-Richtung eine hinreichend starke negative Krümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} < 0$ vorhanden ist. Das geht aus der zweidimensionalen Poisson-Gleichung

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} = -\frac{en_{\mathrm{i}}}{\epsilon_0} < 0 \tag{9.6}$$

hervor.

9.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die Eigenschaften einer stationären Plasmarandschicht bei Anliegen des Hochspannungspotentials von $-1000\,\mathrm{V}$ an einem zweidimensionalen Target untersucht. Es hat sich gezeigt, daß die Randschicht in größerer Entfernung vom Target nahezu planar ist und die Schichtkante dort beinahe linear verläuft. Die aus dem Plasma kommenden Ionen werden dadurch beim Eintritt in die Randschicht zunächst nur in Richtung der negativen x-Achse beschleunigt und erst in unmittelbarer Nähe zur Targetoberfläche seitlich abgelenkt. Aufgrund ihrer Trägheit und ihrer großen Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung können die Ionen den Feldlinien in der Nähe des Targets aber kaum noch folgen. Das führt dazu, daß sich im Laufe der Zeit auf der Targetoberfläche eine Stromverteilung entwickelt, die auf den verschiedenen Segmenten der Oberfläche jeweils nur geringen Variationen unterliegt. Insgesamt ist die Stromverteilung auf dem Target aber sehr inhomogen. Die größte Stromdichte tritt dabei auf den Stegstirnflächen, gefolgt von der Stromdichte auf der Bodenfläche des schmalen Grabens, auf. Auf den Seitenwänden dieses Grabens ist die Ionenstromdichte dagegen am niedrigsten auf dem gesamten Target, weil sich die elektrischen Felder, die von diesen Seitenwänden ausgehen, durch die geringe Grabenbreite gegenseitig so stark schwächen, daß die Ionen nicht auf die Seitenwände gezogen werden. Auf den Wänden des breiten Grabens ist die Stromdichte dagegen im Mittel gleich. Infolge der Trägheit der Ionen treffen diese unter schiefen Winkeln von 65° und mehr auf die Seitenwände der beiden Gräben. Das hat zur Folge, daß die mittlere Zerstäubungsrate der Seitenwänden des breiten Grabens ähnlich groß ist wie die der Stegstirnflächen, obwohl die mittlere Ionenstromdichte auf den Seitenwänden nur etwa 27% des Wertes auf den Stegstirnflächen erreicht. Schließlich hat sich beim Vergleich der simulierten Potentialverteilung mit berechneten eindimensionalen Verteilungen auf der Grundlage des modifizierten Child-Langmuir-Gesetzes ergeben, daß die die Ionen fokussierende bzw. zerstreuende Wirkung des elektrischen Feldes auf den Stegstirnflächen bzw. den Wänden des breiten Grabens zu ganz neuen Formen der Potentialverteilung in der Randschicht führt.

Kapitel 10

Dynamik von Schicht und Vorschicht bei der zweidimensionalen PIII

10.1 Einleitung

Die Untersuchung der PIII an einem zweidimensionalen Target begann in Kapitel 7 mit der Diskussion der Eigenschaften der stationären Randschicht, die sich in der Nähe des Targets ausbildet, wenn dieses gegenüber dem Plasma auf dem Floatingpotential $\Phi_{\text{Target}} = -40.285\,\text{V}$ liegt. Anschließend wurde in Kapitel 8 untersucht, wie das Plasma reagiert, wenn das Target plötzlich auf das Potential $\Phi_{\text{Target}} = -1000\,\text{V}$ gelegt wird. Dabei lag der Schwerpunkt der Untersuchung auf der zeitlichen Abhängigkeit der Ionenstromdichte sowie der sich daraus ergebenden Dosis der implantierten Ionen auf der Targetoberfläche. Die Dynamik der expandierenden Schicht wurde nur kurz im Zusammenhang mit der Entwicklung der Ionendichte während der Matrixschicht-Implantationsphase angesprochen. Schließlich wurden in Kapitel 9 die Eigenschaften der stationären Hochspannungsrandschicht vorgestellt, die sich auf der Zeitskala von einigen $10\,\mu$s nach Anlegen der negativen Hochspannung einstellt. In diesem Kapitel soll nun detailliert auf die Dynamik der expandierenden Schicht und Vorschicht eingegangen werden, die sich zwischen dem stationären Anfangs- und Endzustand abspielt.

10.2 Detektion der Schicht- und Vorschichtdynamik

Bevor die Dynamik der Schicht und Vorschicht untersucht werden kann, muß zunächst ein geeigneter Detektor gefunden werden, mit dem es gelingt, die Schicht und Vorschicht zu erfassen. Bei der Untersuchung der Dynamik von Schicht und Vorschicht bei der planaren PIII wurde dazu in Kapitel 5 die Methode der Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit vorgestellt. Diese Methode beruht auf dem Bohmkriterium, wonach die Ionen in einer planaren Plasmarandschicht innerhalb der Vorschicht auf die Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}}$ beschleunigt werden, die sie an der Schichtkante erreichen. In der Vorschicht nimmt die Ionendriftgeschwindigkeit dagegen nur Beträge kleiner als die Bohmgeschwindigkeit, $v < v_\mathrm{B}$, an, wobei der Betrag der Geschwindigkeit mit zunehmendem Abstand von der Schichtkante immer mehr abnimmt. Daher konnte der Aufbau einer stationären planaren Vorschicht in Kapitel 5 durch Angabe der Orte, an denen die Ionendriftgeschwindigkeit bestimmte Beträge annimmt, charakterisiert werden. Durch zeitaufgelöste Messung dieser Orte konnte zusätzlich auch die Dynamik der Vorschicht während der Phase der Randschichtexpansion beschrieben werden. Die so gewonnenen Trajektorien stellen dabei Isotachen, also Isolinien der Ionendriftgeschwindigkeit, dar. Diese Methode soll nun im vorliegenden Kapitel auch zur Untersuchung der Dynamik von Schicht und Vorschicht bei der PIII an dem zweidimensionalen Target zur Anwendung kommen. Dazu wurden drei charakteristische Regionen des Targets ausgewählt, auf die sich die Untersuchung im folgenden beschränkt: die Mittelachse des breiten Grabens längs $y = 0.00\,\mathrm{cm}$, die Mittelachse eines Stegs längs $y = 0.60\,\mathrm{cm}$ sowie die Mittelachse des schmalen Grabens zwischen den Stegen längs $y = 0.75\,\mathrm{cm}$. Aufgrund der Symmetrie des Targets kann davon ausgegangen werden, daß sich die Dynamik von Schicht und Vorschicht sowie die Bewegung der Ionen in der unmittelbaren Umgebung dieser Linien ausschließlich in Richtung der x-Achse abspielt und damit eindimensional verläuft. Daher genügt es im folgenden, sich bei der Angabe von Ortskoordinaten und Geschwindigkeiten auf die jeweilige x-Komponente zu beschränken.

10.2.1 Stationäre Verteilungen der Ionendriftgeschwindigkeit

Als Ausgangspunkt der Betrachtung sind zunächst in Abbildung 10.1 die stationären Verteilungen der Ionendriftgeschwindigkeit in x-Richtung entlang der Linien $y = 0.00$, 0.60 und 0.75 cm dargestellt. Darin zeigt Abbildung 10.1 a) die Verteilungen in der Floatingpotential-Randschicht bei Anliegen des Potentials $\Phi_\mathrm{Target} = -40.285\,\mathrm{V}$ am Target, also vor Anlegen der negativen Hochspannung. Im Bereich der Vorschicht stimmen alle dargestellten Kurven zunächst bis $x \geq 0.9\,\mathrm{cm}$ überein. Dann jedoch nimmt die Geschwindigkeit der Ionen in der Plasmaschicht vor und zwischen den Stegen ($y = 0.60$ und 0.75 cm) schnell zu, wobei sich mit zunehmender Geschwindigkeit eine Aufspaltung der beiden Kurven erkennen läßt. Die Ionen, die mit der Geschwindigkeit αv_B ($\alpha = 0.7$) in die Vorschicht eingekoppelt werden, erreichen nach Durchlaufen des Potentialgefälles von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ direkt auf den Stegstirnflächen bei $x = 0.5\,\mathrm{cm}$ ihre maximale Geschwindigkeit von $\sqrt{2e\Delta\Phi/m_\mathrm{i} + (\alpha v_\mathrm{B})^2} \approx 14\,\mathrm{km/s}$. Im Inneren des schmalen Grabens driften die Ionen dagegen mit einer, bis auf statistische Schwankungen, fast konstanten Geschwindigkeit von etwa 13.5 km/s in Richtung auf den Grabenboden. Das unterstreicht die Tatsache, daß in diesem Graben nahezu kein elektrisches Feld vorhanden ist, das die Ionen noch weiter beschleunigen könnte. Im Gegensatz dazu nimmt die Ionengeschwindigkeit längs der Mittelachse $y = 0.00\,\mathrm{cm}$ des breiten Grabens zunächst nur langsam zu, um dann jedoch im Bereich $x \leq 0.2\,\mathrm{cm}$ der dortigen Plasmaschicht ebenfalls schnell

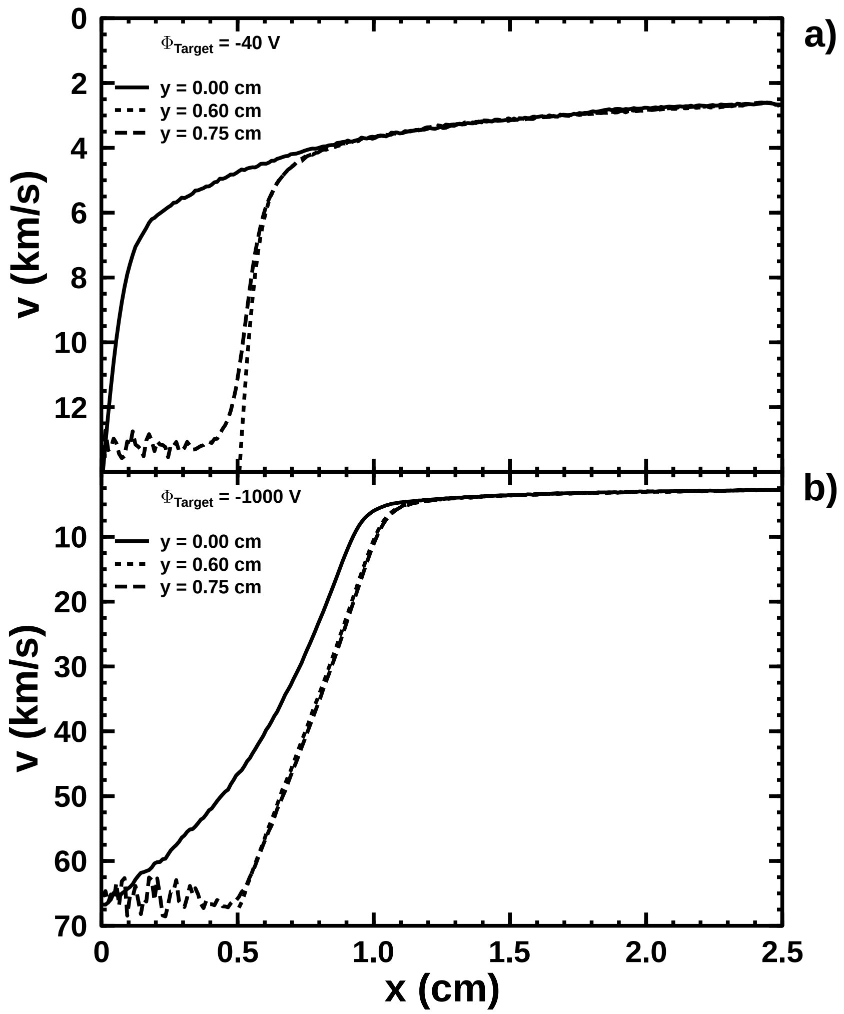

Abbildung 10.1: Verteilung des Betrags der Ionendriftgeschwindigkeit in x-Richtung längs der Linien $y = 0.00\,\mathrm{cm}$ (Mitte des breiten Grabens), $y = 0.60\,\mathrm{cm}$ (Mittelachse eines Stegs) und $y = 0.75\,\mathrm{cm}$ (Mitte des schmalen Grabens) im Falle a) der stationären Floatingpotential-Randschicht mit $\Phi_{\mathrm{Target}} = -40.285\,\mathrm{V}$ und b) der stationären Hochspannungsrandschicht mit $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$.

auf etwa 14 km/s am Target anzuwachsen. Die Geschwindigkeitsverteilungen in der stationären Hochspannungsrandschicht, die in Abbildung 10.1 b) dargestellt sind, zeigen ein ähnliches Verhalten. Für $x \geq 1.2\,\mathrm{cm}$ decken sich die Kurven zunächst, um dann in einen schnell abfallenden Ast, bestehend aus den beiden Kurven vor und zwischen den Stegen ($y = 0.60$ und $0.75\,\mathrm{cm}$) und einen langsamer abfallenden Ast im Bereich des breiten Grabens ($y = 0.00\,\mathrm{cm}$) aufzuspalten. Auf der Targetoberfläche erreichen die Ionen aufgrund des größeren Potentialgefälles von $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$ jetzt die Maximalgeschwindigkeit von etwa 69 km/s. Auch hier zeigt sich wieder an der fast konstanten Driftgeschwindigkeit der Ionen im Inneren des schmalen Grabens, daß dort kein nennenswertes elektrisches Feld vorhanden ist.

10.2.2 Isotachen der Ionendriftgeschwindigkeit und Dichtekriterium zur Bestimmung der Schichtkante

Während der PIII an dem zweidimensionalen Target kommt es nun in der Phase der expandierenden Randschicht zu einem Übergang von den Verteilungen der Ionendriftgeschwindigkeit aus Abbildung 10.1 a) zu den Verteilungen aus Abbildung 10.1 b). Um diesen Übergang und damit die Dynamik der Schicht und Vorschicht quantitativ erfassen zu können, läßt sich prinzipiell wieder die Methode der Isotachen einsetzen. Das soll anhand von Abbildung 10.2 verdeutlicht werden, wo die Ionendriftgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort x für die beiden stationären Plasmarandschichten bei Anliegen des Floatingpotentials $\Phi_{\text{Target}} = -40.285\,\text{V}$ bzw. der Hochspannung $\Phi_{\text{Target}} = -1000\,\text{V}$ am Target dargestellt ist. An den markierten Positionen erreicht die Ionendriftgeschwindigkeit die Beträge $v = 0.61\,v_{\text{B}}$, $0.68\,v_{\text{B}}$, $0.80\,v_{\text{B}}$ und v_{B}. Während der Expansion der Randschicht kommt es zur Bewegung dieser Markierungen, was durch die eingezeichneten Pfeile symbolisiert wird. Durch Aufzeichnen dieser Bewegungen erhält man sogenannte Isotachen, also Kurven, längs denen die Ionendriftgeschwindigkeit jeweils konstant ist. Der Verlauf der Isotachen charakterisiert dann die Dynamik der Schicht und Vorschicht während der Expansion. Im Gegensatz zur Anwendung dieser Methode auf planare Randschichten ergibt sich jedoch im Fall der zweidimensionalen Randschicht das Problem, daß die Position der Schichtkante nicht mehr einfach durch die Orte bestimmt werden kann, an denen die Ionen die Bohmgeschwindigkeit erreichen. Wie in Abschnitt 7.3.4 auf Seite 103 ausführlich diskutiert wurde, kann es nämlich im Bereich gekrümmter Randschichten durch konvergierende oder divergierende Ionenströme zu einer Verletzung des Bohmkriteriums kommen. Im Fall von divergierenden Strömen, wie sie im Bereich des breiten Grabens bei der Floatingpotential-Randschicht auftreten, kann die Mindestgeschwindigkeit der Ionen, ab der sich eine Plasmaschicht ausbildet, deutlich über der Bohmgeschwindigkeit liegen. Längs der Linie $y = 0.00\,\text{cm}$ in der Mitte des breiten Grabens betrug diese Mindestgeschwindigkeit etwa $6\,\text{km/s}$, was deutlich größer ist als die Bohmgeschwindigkeit von $v_{\text{B}} = 4.4\,\text{km/s}$. Das läßt sich auch gut anhand der Abbildung 10.1 a) nachvollziehen, wo die Ionendriftgeschwindigkeit im Bereich des breiten Grabens ($y = 0.00\,\text{cm}$) erst mit Überschreiten einer Mindestgeschwindigkeit von etwa $6\,\text{km/s}$ stark anzusteigen beginnt, weil sich dann erst eine Plasmarandschicht ausbildet.

Als Alternative zur Bestimmung der Schichtkante auf der Grundlage des Bohmkriteriums bietet sich eine direkte Bestimmung anhand des Dichteunterschieds zwischen Ionen und Elektronen an. Diese Methode wurde bereits in den Kapiteln 7 und 9 erfolgreich angewandt. Dort wurden die Orte bestimmt, an denen der relative Unterschied $(n_{\text{i}} - n_{\text{e}})/n_{\text{i}}$ zwischen Ionen- und Elektronendichte genau 5% beträgt, an denen die Elektronendichte also noch 95% der Ionendichte erreicht, $n_{\text{e}} = 0.95\,n_{\text{i}}$. Obwohl diese Orte strenggenommen bereits in der eigentlichen Schicht liegen, stellt dieses Kriterium eine gute Möglichkeit dar, die Position der Schichtkante unter Umgehung des Bohmkriteriums wenigstens annäherend zu bestimmen. Die genaue Position der Schichtkante, an der die Ionen und Elektronen ja noch die gleiche Dichte besitzen, muß sich gegenüber der so annäherend bestimmten Position noch etwas weiter vom Target entfernt befinden.

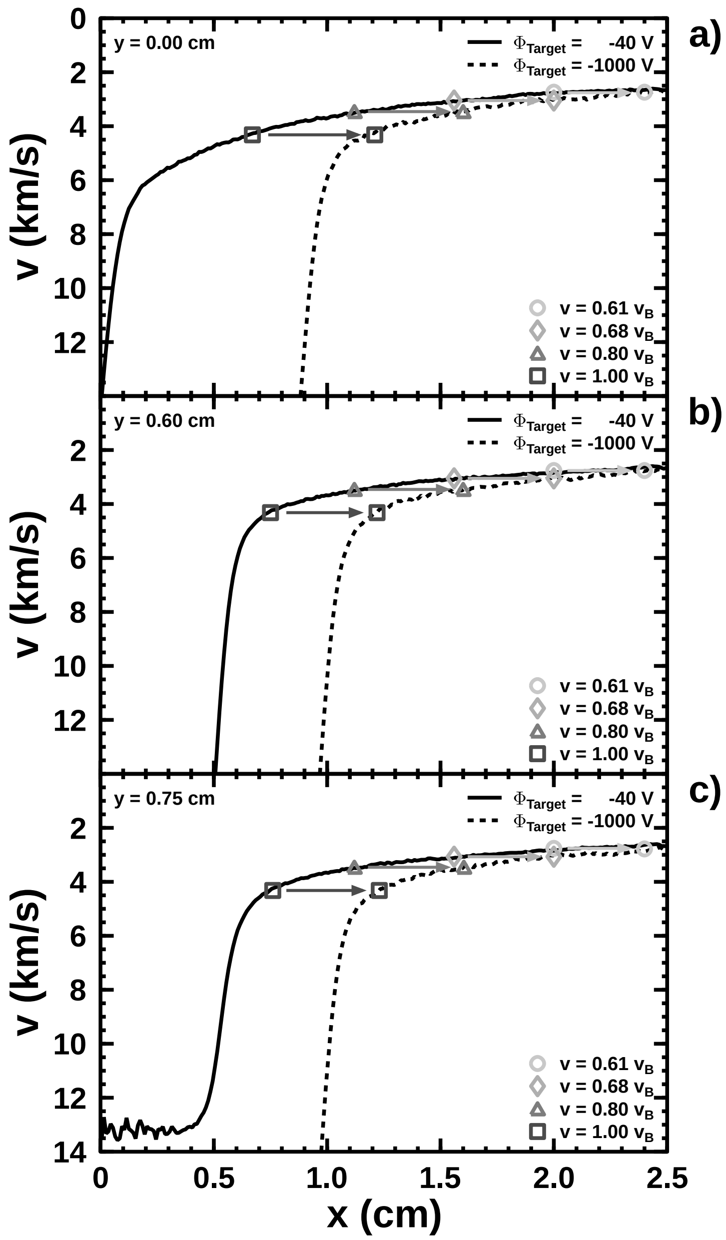

Abbildung 10.2: Darstellung der Beträge der Ionendriftgeschwindigkeit in Abhängigkeit vom Ort x für die beiden stationären Plasmarandschichten bei Anliegen des Floatingpotentials $\Phi_{\mathrm{Target}} = -40.285\,\mathrm{V}$ bzw. der Hochspannung $\Phi_{\mathrm{Target}} = -1000\,\mathrm{V}$ am Target. Abbildung a) zeigt die Verteilungen längs $y = 0.00\,\mathrm{cm}$, Abbildung b) längs $y = 0.60\,\mathrm{cm}$ und Abbildung c) entlang der Linie $y = 0.75\,\mathrm{cm}$. An den jeweils eingezeichneten Markierungen erreicht die Ionendriftgeschwindigkeit die Beträge $v = 0.61\,v_{\mathrm{B}}$, $0.68\,v_{\mathrm{B}}$, $0.80\,v_{\mathrm{B}}$ und v_{B}. Die eingezeichneten Pfeile symbolisieren die Bewegungen dieser Markierungen während der Expansion der Randschicht.

10.3 Dynamik der Schichtexpansion

Die Dynamik der Schichtexpansion bei der Simulation der PIII an dem zweidimensionalen Target wurde nun unter Anwendung der im vorigen Abschnitt beschriebenen Methode der Isotachen und des Dichtekriteriums zur Bestimmung der Schichtkante untersucht. Die auf diese Weise gewonnenen Isotachen der verschiedenen Ionendriftgeschwindigkeiten sowie die Bewegung der näherungsweise bestimmten Schichtkante sind in Abbildung 10.3 dargestellt.

Zunächst einmal fällt auf, daß der mittlere Verlauf der Kurven aus den Abbildungen 10.3 b) und c) nahezu identisch ist. Das zeigt, daß die Schicht- und Vorschichtdynamik in den Bereichen vor ($y = 0.60\,\mathrm{cm}$) und zwischen ($y = 0.75\,\mathrm{cm}$) den Stegen gleich verläuft. Zudem zeigen die Isotachen aus diesen beiden Bildern, bis auf eine hier auftretende Verschiebung um die Steghöhe 0.5 cm, einen sehr ähnlichen Verlauf wie die entsprechenden Isotachen in der planaren Randschicht, die in Abbildung 5.4 auf Seite 64 zu sehen sind. Die Bewegung der Isotachen der Bohmgeschwindigkeit v_B setzt sofort mit dem Umschalten der Targetspannung zum Zeitpunkt $t = 0$ ein und endet bereits nach etwa 6 μs. Dabei erfolgt deren Bewegung in der Phase des steilen Anstiegs während der ersten 0.2 μs mit Überschallgeschwindigkeit, also größer als v_B. Die Isotachen zu $v = 0.80\,v_\mathrm{B}$ zeigen ebenfalls eine verzögerungsfrei einsetzende Bewegung, die jedoch etwas langsamer abläuft und etwa 8 μs braucht, um in einen neuen Gleichgewichtszustand zu gelangen. Die Bewegung der noch weiter vom Target entfernten Isotachen, $v = 0.68\,v_\mathrm{B}$ und $0.61\,v_\mathrm{B}$, setzt dagegen mit sichtbaren Verzögerungen von etwa 2 μs bzw. 4 μs ein. Zudem brauchen die Isotachen mit abnehmender Ionendriftgeschwindigkeit immer länger, um wieder ins Gleichgewicht zu kommen. Die Ursache für dieses Verhalten ist genau wie im Fall der planaren dynamischen Randschicht eine Ionenschallwelle, die sich mit der Ionenschallgeschwindigkeit v_B ins Plasma hineinbewegt. Erst durch das Eintreffen dieser Welle werden die weiter vom Target entfernt liegenden Bereiche der Vorschicht darüber informiert, daß sich das Potential am Target verändert hat. Durch die verzögert einsetzende Bewegung der Vorschicht kommt es dabei kurzzeitig zu einer Vorschichtkompression, die das Plasma jedoch im Laufe der Zeit wieder auszugleichen versucht. Aus diesem Grund besitzen die Isotachen nach der Randschichtexpansion jeweils wieder die gleichen relativen Abstände voneinander, wie zuvor. Neben den Isotachen ist in den Abbildungen 10.3 b) und c) auch die zeitliche Bewegung der Positionen eingezeichnet, an denen $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ gilt. Da sich diese Positionen bereits in der eigentlichen Schicht befinden, haben sie einen geringeren Abstand vom Target als die Isotachen zu $v = v_\mathrm{B}$. Trotzdem weichen die Kurven mit $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ höchstens um 1.5 mm von den Isotachen der Bohmgeschwindigkeit ab und decken sich sogar während der ersten 2 bis 3 μs nach Einschalten der Hochspannung mit diesen. Insgesamt zeigt das, daß die Ionen in der Region vor und zwischen den Stegen an der Schichtkante tatsächlich die Bohmgeschwindigkeit erreichen. Dort gilt also das Bohmkriterium noch in seiner ursprünglichen Form.

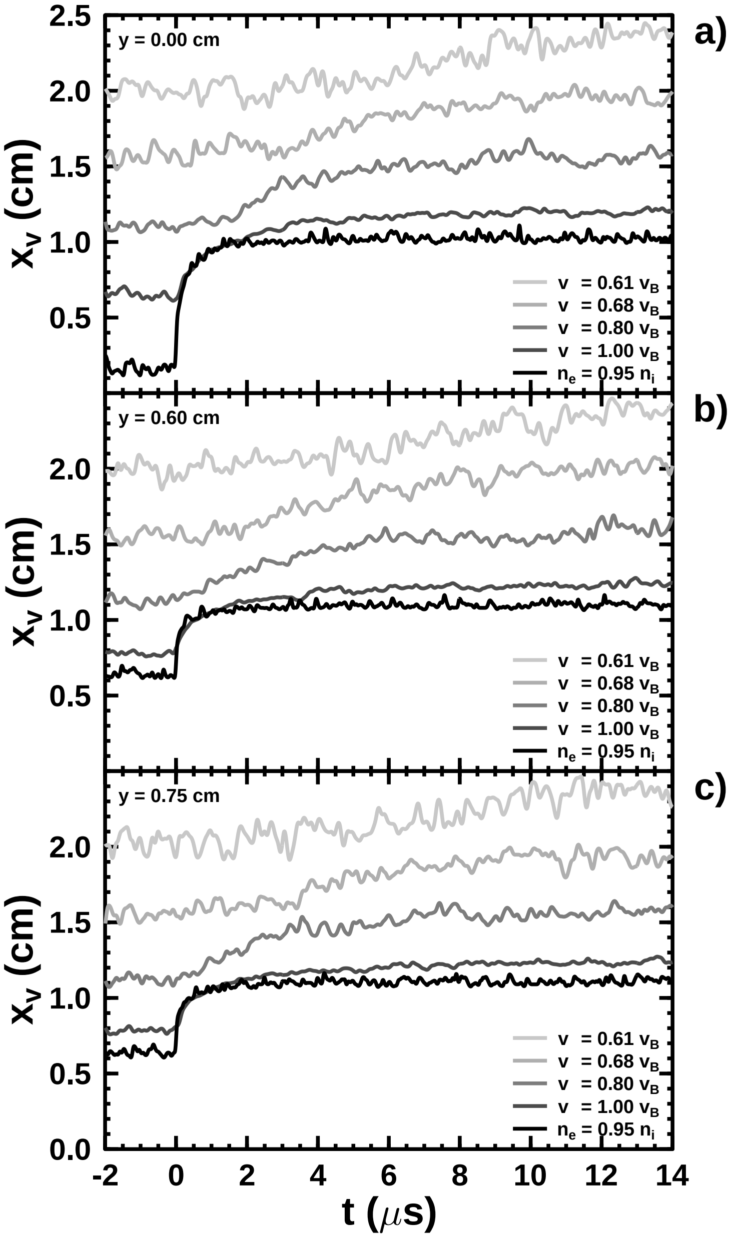

Abbildung 10.3: Simulierte Bewegung der Isotachen zu den Ionendriftgeschwindigkeiten $v = 0.61\,v_\mathrm{B}$, $0.68\,v_\mathrm{B}$, $0.80\,v_\mathrm{B}$ und v_B sowie der nach dem Kriterium $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ näherungsweise bestimmten Positionen der Schichtkante, wenn das Potential Φ_Target des Targets zum Zeitpunkt $t = 0$ von $-40.285\,\mathrm{V}$ auf $-1000\,\mathrm{V}$ umgeschaltet wird. Abbildung a) zeigt die Verteilungen längs $y = 0.00\,\mathrm{cm}$, Abbildung b) längs $y = 0.60\,\mathrm{cm}$ und Abbildung c) entlang der Linie $y = 0.75\,\mathrm{cm}$.

Die Kurven aus Abbildung 10.3 a) zeigen dagegen zum Teil andere Verläufe als jene aus den Abbildungen 10.3 b) und c). Während die weiter in der Vorschicht liegenden Isotachen mit $v = 0.61\,v_\mathrm{B}$ und $0.68\,v_\mathrm{B}$ in allen drei Teilbildern noch jeweils die gleiche zeitliche Abhängigkeit haben, zeigen die Isotachen mit $v = 0.80\,v_\mathrm{B}$ und v_B in Abbildung 10.3 a) andere Abhängigkeit als in den beiden anderen Diagrammen. Die Bewegung der Vorschicht, die durch die Kurve $v = 0.80\,v_\mathrm{B}$ beschrieben wird, setzt jetzt erstmals mit einer leichten Verzögerung von etwa $1.5\,\mu$s ein. Das ist darauf zurückzuführen, daß der Abstand zwischen diesem Teil der Vorschicht und dem Target jetzt um die Grabentiefe von 0.5 cm größer geworden ist. Daher braucht die Ionenschallwelle entsprechend länger, um bis in diese Vorschichtregion zu gelangen. Anhand der gegenüber den beiden anderen Abbildungen verschobenen anfänglichen Lage der Isotache $v = v_\mathrm{B}$ kann man die Krümmung der Schicht und wandnahen Vorschicht im Bereich des breiten Grabens erkennen, wenn am Target das Floatingpotential anliegt. Im Gegensatz zu den Abbildungen 10.3 b) und c) befindet sich diese Isotache zu den Zeiten $t < 0$ nämlich nicht bei $x \approx 0.8$ cm, sondern bei $x \approx 0.65$ cm. Noch besser läßt sich diese Krümmung allerdings an der Kurve $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ erkennen, die näherungsweise die Bewegung der Schichtkante darstellt. Im Fall der Floatingpotential-Randschicht ($t < 0$) befindet sich die Schichtkante in dem breiten Graben ungefähr an der Stelle $x \approx 0.15$ cm, während sie vor und zwischen den beiden Stegen bei $x \approx 0.65$ cm zu finden ist. Dies entspricht gerade einer Verschiebung um die Höhe der Stege. Auffällig ist, daß für $t < 0$ die Isotache mit $v = v_\mathrm{B}$ so stark von der ungefähren Lage der Schichtkante abweicht. Hier zeigt sich ganz offensichtlich die in Abschnitt 7.3.4 auf Seite 103 beschriebene Verletzung des Bohmkriteriums im Inneren des breiten Grabens, wo die Ionenströme aufgrund der gekrümmten Schicht und Vorschicht zum Target hin abnehmen und die Ionen daher auf deutlich größere Geschwindigkeiten beschleunigt werden müssen, bis sich eine Schicht ausbildet. Nach dem Einschalten der Hochspannung von -1000 V weicht die Kurve in Abbildung 10.3 a), die die ungefähre Position der Schichtkante beschreibt, nun so schnell vom Target zurück, daß sie augenblicklich mit der Isotache $v = v_\mathrm{B}$ zur Deckung kommt. Die Übereinstimmung beider Kurven, die sich für etwa $0.2\,\mu$s mit Überschallgeschwindigkeit bewegen, hält dabei etwa $2\,\mu$s an. Anschließend laufen die beiden Kurven wieder auseinander und nehmen nach der Expansionsphase Gleichgewichtslagen an, die gut mit jenen aus Abbildung 10.3 b) und c) übereinstimmen.

In dem sich einstellenden Gleichgewichtszustand am Ende der Schichtexpansion nehmen die Isotachen mit der jeweils gleichen Ionendriftgeschwindigkeit v überall die gleichen Endpositionen ein. Dies gilt in guter Näherung auch für die Kurven, die mit $n_\mathrm{e} = 0.95\,n_\mathrm{i}$ etwa die Position der Schichtkante beschreiben. Das zeigt, daß die Vorschicht einschließlich der Schichtkante in der stationären Hochspannungsrandschicht planar aufgebaut ist, wie auch schon in Kapitel 9 festgestellt wurde. Um das zu ermöglichen, kommt es in der Vorschicht vor dem breiten Graben zu einer Verkleinerung der Gleichgewichtsabstände zwischen der Isotache mit $v = v_\mathrm{B}$ und den übrigen Isotachen mit $v < v_\mathrm{B}$. Das ist in Abbildung 10.3 gut zu erkennen und wird zur Veranschaulichung nochmals in Abbildung 10.4 schematisch dargestellt. In der Simulation beträgt die Verringerung dieser Abstände etwa 1 mm. Vor und zwischen den Stegen schafft es das Plasma dagegen, wie im planaren Fall, die anfängliche Ausdehnung der Vorschicht nach deren vorübergehender Kompression wieder herzustellen. Auch das ist in Abbildung 10.4 dargestellt.

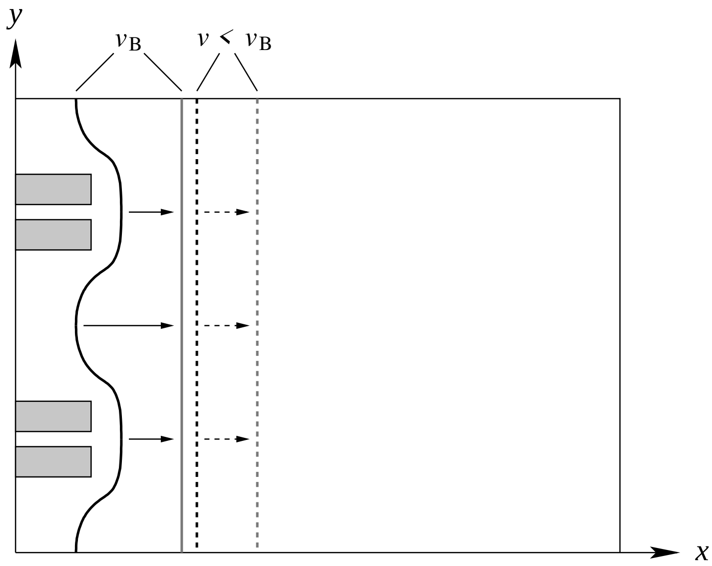

Abbildung 10.4: Schematische Darstellung des Übergangs von einer gekrümmten zu einer planaren Vorschicht während der Phase der Randschichtexpansion. Gezeigt ist ein Ausschnitt des periodischen Targets auf der linken Seite, der zwei Stegpaare umfaßt. Die durchgezogenen Linien verbinden die Orte, an denen die Ionen die Driftgeschwindigkeit $v = v_B$ erreichen, während auf den gestrichelten Linien ein beliebiger aber fester Wert $v < v_B$ gilt. Dabei kennzeichnen die schwarzen Linien jeweils den Zustand vor und die grauen Linien jeweils den Zustand nach der Randschichtexpansion, die durch die eingezeichneten Pfeile symbolisiert wird.

10.4 Modell der retardierten Vorschichtreaktion mit planarer Relaxation

Das Modell der retardierten Vorschichtreaktion, das in Abschnitt 5.4 entwickelt wurde, war sehr erfolgreich bei der Beschreibung der Reaktion der Vorschicht bei der PIII an einem planaren Target. Aufbauend auf diesem Modell soll in diesem Abschnitt ein erweitertes Modell vorgestellt werden, daß auf die Verhältnisse der PIII an dem hier benutzten zweidimensionalen Target zugeschnitten ist.

Dem ursprünglichen Modell lag die Annahme zugrunde, daß das Plasma versucht, den augenblicklichen Abstand $\Delta x_v(t) \stackrel{\text{def}}{=} x_v(t) - x_s(t)$ zwischen einer Vorschichtisotache mit der Geschwindigkeit v und der Schichtkante am Ort $x_s(t)$ am Ende der Schichtexpansion wieder auf den anfänglichen Gleichgewichtsabstand $\Delta x_0 \stackrel{\text{def}}{=} \Delta x_v(0)$ zu relaxieren. Bei der Simulation der Vorschichtdynamik an dem zweidimensionalen Target hat sich jedoch gerade vor dem breiten Graben gezeigt, daß der Gleichgewichtsabstand $\Delta x_\infty \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t\to\infty} \Delta x_v(t)$ am Ende der Expansionsphase nicht mit dem Gleichgewichtsabstand vor der Expansion übereinstimmen muß. Das war eine Folge des Übergangs von einer gekrümmten zu einer planaren Vorschicht. Dieses Verhalten soll jetzt mit in das Modell aufgenommen werden, indem der Gleichgewichtsabstand, den das Plasma herstellen will, von dem konstanten Wert Δx_0 auf einen zeitabhängigen Wert gemäß dem Ansatz

$$\Delta x(t) \stackrel{\text{def}}{=} \Delta x_\infty + (\Delta x_0 - \Delta x_\infty) \cdot e^{-t/\theta} \tag{10.1}$$

geändert wird. Dieser Ansatz stellt sicher, daß $\Delta x(t)$ die gewünschten Eigenschaften $\Delta x(0) = \Delta x_0$ und $\lim_{t\to\infty} \Delta x(t) = \Delta x_\infty$ hat. Die Zeitkonstante θ in Gleichung (10.1) soll dabei wie die übrigen Zeitkonstanten T und τ, die in dem ursprünglichen Modell auftreten, in der Größenordnung von $\Delta x_0/v_\mathrm{B}$ liegen. Damit kann man nun den ursprünglichen Ansatz der Differentialgleichung (5.2), die die Vorschichtdynamik beschreiben soll, in ihre neue Form bringen:

$$\frac{dx_\mathrm{v}(t)}{dt} = -\frac{\Delta x_\mathrm{v}(t) - \Delta x(t)}{\tau}. \tag{10.2}$$

Diese Differentialgleichung läßt sich nach einfacher Umformung in die übliche Form einer inhomogenen linearen Differentialgleichung erster Ordnung,

$$\frac{dx_\mathrm{v}(t)}{dt} + \frac{x_\mathrm{v}(t)}{\tau} = \frac{x_\mathrm{s}(t) + \Delta x_\infty}{\tau} + \frac{\Delta x_0 - \Delta x_\infty}{\tau} \cdot e^{-t/\theta}, \tag{10.3}$$

überführen, die große Ähnlichkeit hat mit der Differentialgleichung (5.3) des ursprünglichen Modells. Lediglich der letzte Term auf der rechten Seite von Gleichung (10.3) ist neu hinzugekommen und enthält die neue Physik. Diese Differentialgleichung besitzt zusammen mit der Anfangsbedingung $x_\mathrm{v}(0) \stackrel{!}{=} x_\mathrm{s}(0) + \Delta x_0$ die folgende eindeutige Lösung [Walcher, 1990]:

$$x_\mathrm{v}(t) = \begin{cases} \Delta x_0 + x_\mathrm{s}(0) \cdot e^{-t/\tau} + \dfrac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot \displaystyle\int_0^t e^{\tilde{t}/\tau} x_\mathrm{s}(\tilde{t})\, d\tilde{t} & \\ \quad + (\Delta x_0 - \Delta x_\infty) \left[\dfrac{\theta}{\theta - \tau} \cdot e^{-t/\theta} - \dfrac{\tau}{\theta - \tau} \cdot e^{-t/\tau} - 1 \right], & \text{für } \theta \neq \tau, \\ \Delta x_0 + x_\mathrm{s}(0) \cdot e^{-t/\tau} + \dfrac{1}{\tau} e^{-t/\tau} \cdot \displaystyle\int_0^t e^{\tilde{t}/\tau} x_\mathrm{s}(\tilde{t})\, d\tilde{t} & \\ \quad + (\Delta x_0 - \Delta x_\infty) \left[\left(1 + \dfrac{t}{\tau}\right) \cdot e^{-t/\tau} - 1 \right], & \text{für } \theta = \tau. \end{cases} \tag{10.4}$$

Diese Lösung hat allerdings noch die Schwäche, daß die Vorschicht instantan auf die Bewegung der Schichtkante reagiert. Wie im Fall des Modells für die planare Vorschichreaktion läßt sich diese Schwäche beheben, indem zunächst eine Verzögerungszeit $T \stackrel{\text{def}}{=} \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ eingeführt wird, die der Laufzeit einer Ionenschallwelle zur Überbrückung der Distanz Δx_0 entspricht. Anschließend wird abschnittsweise eine neue retardierte Lösung $x_\mathrm{v}^\mathrm{ret}(t)$ definiert. Diese soll für Zeiten $t \leq T$, solange die Ionenschallwelle noch nicht am Ort des betrachteten Vorschichtbereichs eingetroffen ist, durch den stationären Zustand zu Beginn gegeben sein:

$$x_\mathrm{v}^\mathrm{ret}(t)\Big|_{t\leq T} \stackrel{\text{def}}{=} x_\mathrm{v}(0). \tag{10.5}$$

Für Zeiten $t > T$ soll sie dagegen mit der um die Zeitspanne T verschobenen Lösung aus Gleichung (10.4) übereinstimmen:

$$x_{\mathrm{v}}^{\mathrm{ret}}(t)\Big|_{t>T} \stackrel{\mathrm{def}}{=} x_{\mathrm{v}}(t-T)$$
$$= \begin{cases} \Delta x_0 + x_{\mathrm{s}}(0) \cdot e^{-(t-T)/\tau} + \dfrac{1}{\tau} e^{-(t-T)/\tau} \cdot \int\limits_0^{t-T} e^{\tilde{t}/\tau} x_{\mathrm{s}}(\tilde{t})\, d\tilde{t} \\ \quad + (\Delta x_0 - \Delta x_\infty) \left[\dfrac{\theta}{\theta - \tau} \cdot e^{-(t-T)/\theta} - \dfrac{\tau}{\theta - \tau} \cdot e^{-(t-T)/\tau} - 1 \right], & \text{für } \theta \neq \tau, \\ \Delta x_0 + x_{\mathrm{s}}(0) \cdot e^{-(t-T)/\tau} + \dfrac{1}{\tau} e^{-(t-T)/\tau} \cdot \int\limits_0^{t-T} e^{\tilde{t}/\tau} x_{\mathrm{s}}(\tilde{t})\, d\tilde{t} \\ \quad + (\Delta x_0 - \Delta x_\infty) \left[\left(1 + \dfrac{t-T}{\tau} \right) \cdot e^{-(t-T)/\tau} - 1 \right], & \text{für } \theta = \tau. \end{cases} \tag{10.6}$$

10.5 Vergleich zwischen Simulation und Modell

Das im vorigen Abschnitt beschriebene Modell der retardierten Vorschichtdynamik wird nun mit den Ergebnissen aus der Simulation verglichen. Obwohl die Isotache mit der Bohmgeschwindigkeit v_{B} wegen der Verletzung des Bohmkriteriums im Bereich des breiten Grabens ($y = 0.00\,\mathrm{cm}$) nicht überall die Bewegung der Schichtkante $x_{\mathrm{s}}(t)$ wiedergibt, kann und soll diese trotzdem im folgenden in allen drei untersuchten Bereichen verwendet werden, um mittels Gleichung (10.6) die Dynamik der Vorschicht zu berechnen. Das ist deshalb möglich, weil es zur Berechnung der Dynamik der weiter vom Target entfernt liegenden Vorschicht auch genügt, von einem Teil der Vorschicht, der näher am Target liegt, auszugehen, statt die wirklichen Schichtkante zu benutzen.

Für jede der drei verschiedenen Regionen $y = 0.00$, 0.60 und $0.75\,\mathrm{cm}$ wurde nun jeweils die Isotache mit der Bohmgeschwindigkeit v_{B} zur Darstellung von $x_{\mathrm{s}}(t)$ verwendet und unter geeigneter Wahl der noch freien Parameter τ, θ und T des Modells eine bestmögliche Anpassung an die simulierten Vorschichtisotachen ($v < v_{\mathrm{B}}$) durchgeführt. Die dabei gewählten Modellparameter sind in Tabelle 10.1 zu finden. Bei der Diskussion der simulierten Vorschichtdynamik anhand von Abbildung 10.3 wurde festgestellt, daß vor ($y = 0.60\,\mathrm{cm}$) und zwischen ($y = 0.75\,\mathrm{cm}$) den Stegen die Abstände der verschiedenen Isotachen untereinander in den Gleichgewichtszuständen jeweils übereinstimmen. Dies entspricht der Beobachtung an einer dynamischen planaren Randschicht in Kapitel 5. Aus diesem Grund wurden bei der Berechnung dieser Isotachen für Δx_0 und Δx_∞ jeweils die gleichen Werte benutzt, wie Tabelle 10.1 zu entnehmen ist. Das hat zur Folge, daß in diesem Fall auf der rechten Seite von Gleichung (10.6) der Term in der jeweils zweiten Zeile verschwindet und die Gleichung daher in Gleichung (5.6) übergeht. Da der Parameter θ dann jedoch keine Rolle mehr spielt, wurde in diesen Fällen auf die Angabe spezieller Werte für θ in Tabelle 10.1 verzichtet. Die Wahl der übrigen Parameter τ und T fiel ähnlich

Tabelle 10.1: Angepaßte Modellparameter τ, θ und T für die betrachteten Vorschicht-isotachen in den verschiedenen Regionen $y = 0.00$, 0.60 und 0.75 cm der dynamischen zweidimensionalen Plasmarandschicht. Bei $y = 0.60$ und 0.75 cm spielt der Parameter θ wegen $\Delta x_0 = \Delta x_\infty$ keine Rolle, weshalb dort auf die Angabe dieses Wertes verzichtet wurde.

y (cm)	$\frac{v}{v_\mathrm{B}}$	$x_\mathrm{v}(0)$ (cm)	Δx_0 (cm)	Δx_∞ (cm)	$\frac{\tau}{\Delta x_0/v_\mathrm{B}}$	$\frac{\theta}{\Delta x_0/v_\mathrm{B}}$	$\frac{T}{\Delta x_0/v_\mathrm{B}}$
0.00	0.61	2.00	1.34	1.22	1.5	2.0	1.0
	0.68	1.55	0.90	0.78	1.5	2.0	1.0
	0.80	1.11	0.46	0.34	1.0	2.0	1.0
0.60	0.61	2.00	1.22	1.22	1.5	–	1.0
	0.68	1.55	0.78	0.78	1.5	–	1.0
	0.80	1.12	0.34	0.34	2.0	–	0.0
0.75	0.61	2.00	1.22	1.22	1.5	–	1.0
	0.68	1.55	0.78	0.78	1.5	–	1.0
	0.80	1.12	0.34	0.34	2.0	–	0.0

aus wie früher im Zusammenhang mit der Dynamik der planaren Randschicht: Für die weiter entfernt liegenden Isotachen mit $v = 0.61\, v_\mathrm{B}$ und $0.68\, v_\mathrm{B}$ erwiesen sich die Parameter $\tau = 1.5\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ (früher: $\tau = 2.0\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$) und $T = \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ als die beste Wahl. Für die schichtnahe Isotache mit $v = 0.80\, v_\mathrm{B}$ war dagegen die Verwendung von $\tau = 2.0\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ (früher: $\tau = 2.5\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$) bei instantener Reaktion, $T = 0$, am besten. Etwas anders wurden dagegen die Parameter zur Beschreibung der Isotachen vor dem breiten Graben ($y = 0.00$ cm) gewählt: Hier wurden wegen des Übergangs von der gekrümmten zu der planaren Vorschicht für Δx_0 und Δx_∞ verschiedene Werte benutzt, wie Tabelle 10.1 zeigt. Dadurch bleiben jetzt auch alle Terme in Gleichung (10.6) erhalten und der Parameter θ bekommt eine Bedeutung. Für diesen wurde bei allen drei berechneten Isotachen der gleiche Wert $\theta = 2.0\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ benutzt. Die Werte für Δx_∞ stimmen mit jenen aus den Bereichen $y = 0.60$ und 0.75 cm überein, was den Übergang zu der planaren Vorschicht ausdrückt. Außerdem reagiert die Isotache mit $v = 0.80\, v_\mathrm{B}$ jetzt ebenfalls verzögert auf die Schichtausbreitung, weshalb bei deren Berechnung der Parameter $T = \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ eingesetzt wurde. Um die beste Übereinstimmung mit der Simulation herbeizuführen, mußte schließlich bei dieser Isotache für τ der ungewöhnliche Wert $1.0\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ eingesetzt werden. Bei $y = 0.60$ und 0.75 cm wurde dagegen für diese Isotache jeweils noch der Wert $\tau = 2.0\, \Delta x_0/v_\mathrm{B}$ benutzt. Dieser Unterschied ist wahrscheinlich ebenfalls eine Folge des Übergangs von einer gekrümmten zu einer planaren Vorschicht vor dem breiten Graben.

Die mit diesen Parametern nach Gleichung (10.6) berechneten Isotachen sind nun den simulierten Isotachen in Abbildung 10.5 vergleichsweise gegenübergestellt. Wie man erkennen kann, ist das beschriebene Modell in allen untersuchten Regionen sehr gut in der Lage, die simulierten Isotachen der Vorschicht zu beschreiben. Insbesondere die verzögerte Reaktion der Isotachen in der Vorschicht als auch der Übergang von der gekrümmten zur planaren Vorschicht wird gut dargestellt.

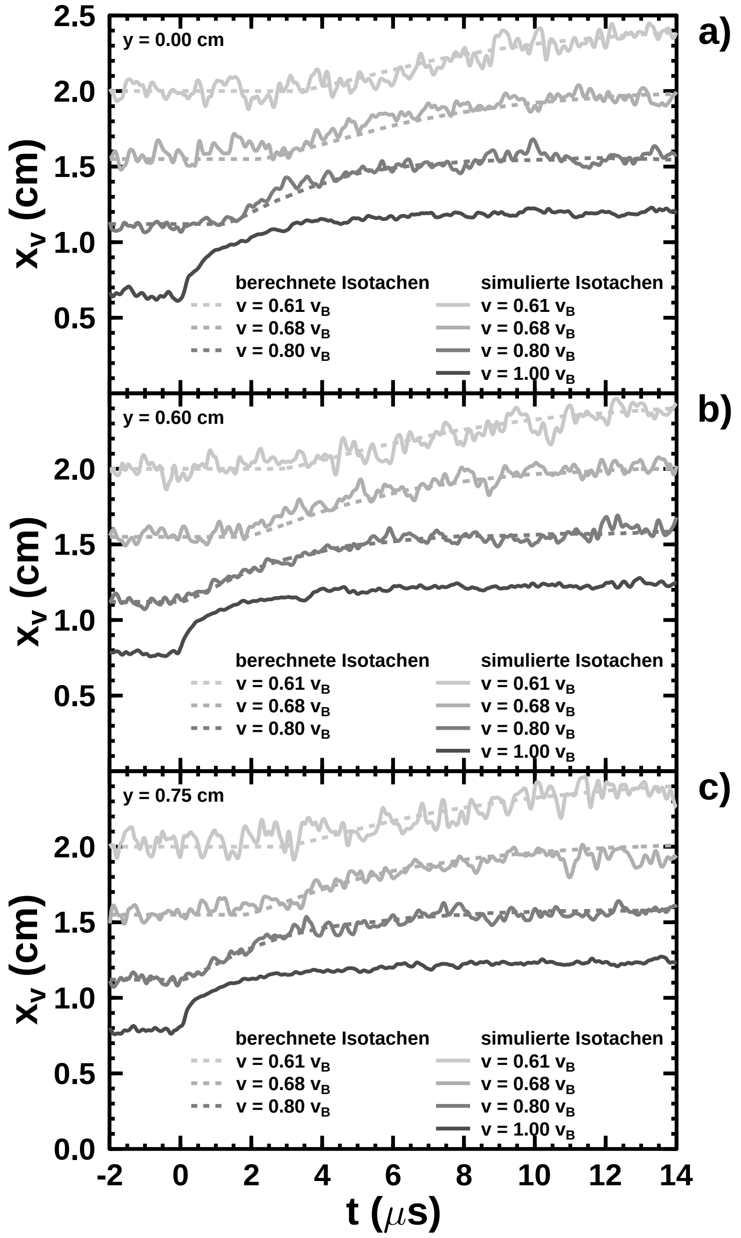

Abbildung 10.5: Vergleich zwischen simulierten Isotachen (durchgezogene Linien) und nach dem Modell der retardierten Vorschichtreaktion mit planarer Relaxation berechneten Isotachen (gestrichelte Linien). Abbildung a) zeigt die Isotachen längs $y = 0.00\,\mathrm{cm}$, Abbildung b) längs $y = 0.60\,\mathrm{cm}$ und Abbildung c) entlang der Linie $y = 0.75\,\mathrm{cm}$.

10.6 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde die Dynamik von Schicht und Vorschicht untersucht, wenn an das zweidimensionale Target plötzlich eine negative Hochspannung angelegt wird. Dabei hat sich in Analogie zur Dynamik einer eindimensionalen planaren Plasmarandschicht gezeigt, daß zuerst die wandnahen Bereiche der Plasmaschicht reagieren und sich anfangs mit Überschallgeschwindigkeit in die Vorschicht hineinbewegen. Nach kurzer Zeit endet diese Überschallbewegung, woraufhin sich eine Ionenschallwelle von der Schichtkante ablöst und sich mit der Bohmgeschwindigkeit v_B in die weiter vom Target entfernt liegenden Vorschichtbereiche hineinbewegt. Diese Welle trifft erst nach einer Verzögerungszeit von $\Delta x_0/v_\mathrm{B}$ in dem Teil der Vorschicht ein, der sich anfangs in der Entfernung Δx_0 von der Schichtkante befindet. Erst durch das Eintreffen dieser Welle wird die Vorschicht über die geänderten Spannungsverhältnisse des Targets informiert und beginnt ihrerseits mit einer Bewegung in Richtung des Plasmainneren. Diese Reaktion nimmt dabei mit zunehmendem Abstand Δx_0 ab und spielt sich auf einer Zeitskala in der Größenordnung von $\Delta x_0/v_\mathrm{B}$ ab. Neu gegenüber der Dynamik einer eindimensionalen planaren Plasmarandschicht ist der beobachtete Übergang von einer stellenweise gekrümmten Vorschicht zu einer überall planaren Vorschicht. Dieser Übergang, in dessen Verlauf die Ausdehnung der Vorschicht an manchen Stellen abnimmt, läßt sich durch eine exponentiell abklingende Relaxation mit einer Abklingzeit von der Größenordnung $\Delta x_0/v_\mathrm{B}$ beschreiben. Auf der Grundlage der verzögerten Vorschichtreaktion sowie des Übergangs von einer gekrümmten zu einer planaren Vorschicht wurde ein Modell entwickelt, das die simulierte Vorschichtdynamik sehr gut wiedergeben kann.

Kapitel 11

Untersuchungen zur plasmaunterstützten Schichtabscheidung an zweidimensionalen Targets

11.1 Einleitung

Der Einsatz von Plasmen beschränkt sich nicht nur auf die Materialbearbeitung mittels Ionenimplantation, vielmehr werden Plasmen bereits seit langer Zeit auch bei der Abscheidung von dünnen Schichten auf der Oberfläche eines Substrats eingesetzt [Lieberman und Lichtenberg, 1994a]. Gerade die immer weiter fortschreitende Miniaturisierung mikroelektronischer Bauelemente erfordert dabei eine immer geringere thermisch Belastung des Substrats, auf dem die Schichten aufgebracht werden soll. Dabei darf weder die Temperatur des Substrats noch die der Atome und Moleküle des aufzutragende Schichtmaterials zu hoch sein, um diese Belastung in vertretbaren Grenzen zu halten. Daher liegt die Substrattemperatur meist deutlich unter der Schmelztemperatur des Schichtmaterials. Als Folge davon nimmt jedoch die Beweglichkeit der bereits auf der Oberfläche abgeschiedenen Atome des Schichtmaterials stark ab und es wachsen keine homogenen Schichten mehr. Vielmehr weist die entstehende Schicht häufig eine dentritische oder kolumnare Struktur mit vielen Leerstellen auf, wie das Zonenmodell von Thornton erklärt [Thornton, 1986]. Zur Verbesserung der Schichteigenschaften wird das Substrat nun häufig mit niederenergetischen Edelgas-Ionen beschossen, um durch die zusätzliche in der Oberfläche deponierte Energie die Beweglichkeit der Schichtatome zu erhöhen und dadurch bessere Schichten wachsen zu lassen [Anders, 2000]. Die dabei verwendete Energie der Ionen liegt typischerweise im Bereich von einigen 10 eV. In Molekular-Dynamik-Simulationen konnte nachgewiesen werden, daß die Beimischung von 50 eV-Argon-Ionen bereits zu einer deutlichen Verbesserung einer epitaktisch aufwachsenden Nickel-Schicht führt [Müller, 1987]. Die Verwendung von Edelgasatomen für den Beschuß hat den Vorteil, daß diese in der Schicht keine Bindungen eingehen und daher meist wieder aus der Oberfläche verschwinden können. Diese Methode ist unter dem Begriff *IBAD* (Ion Beam Assisted Deposition) bekannt. Die Ionen können dabei sowohl aus einem Ionenstrahl als auch aus einem Plasma, das das Substrat umgibt, stammen. Der letztere Fall entspricht der Verwendung eines Edelgas-Plasmas, in dem das Substrat gegenüber dem Plasma beispielsweise auf dem Floatingpotential liegt. Dabei ist es für die Erzeugung möglichst homogener Schichteigenschaften wichtig, daß die während des Schichtwachstums pro Zeit- und Flächeneinheit durch die Plasmaionen auf dem Substrat deponierte Energie überall gleich ist. Bezeichnet man die mittlere Energie eines Plasmaions beim Auftreffen auf die Substratoberfläche mit E_i, dann hängt die pro Zeit- und Flächeneinheit dort deponierte Energie mit der lokalen Ionenstromdichte auf der Substratoberfläche gemäß der Beziehung $E_\mathrm{i} \cdot j_\mathrm{i}/e$ zusammen. Das zeigt, daß eine möglichst homogene Verteilung der Ionenstromdichte wünschenswert wäre. Daneben ist es wichtig, unter welchen Winkeln die Ionen auf die Oberfläche treffen und in die Schicht eindringen, weil dadurch die Tiefe der Energiedeposition entscheidend mitbestimmt wird. In diesem Kapitel sollen diese Eigenschaften nun exemplarisch anhand von drei einfachen Targetstrukturen untersucht werden.

11.2 Geometrie des Targets und Parameter der Simulation

Für die genannten Untersuchungen wurden verschiedene Simulationen unter Verwendung des hybriden PIC/MC-Verfahrens durchgeführt, das in Anhang D beschrieben wird. Dabei wurde ein Argon-Plasma mit den üblichen Parametern benutzt, die in allen im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen verwendet wurden: Plasmadichte $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$, Elektronentemperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ und Ionentemperatur $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$. Das Potential im Inneren des Plasmas wurde auf $\Phi = 0\,\mathrm{V}$ fixiert, während das Target jeweils auf dem Floatingpotential $\Phi = -40.285\,\mathrm{V}$ lag. Die verwendeten Targets, deren Geometrie prinzipiell in Abbildung 11.1 zu sehen ist, bestanden aus einer periodischen Anordnung von einfachen Stegen mit dazwischenliegenden Gräben. Der Unterschied zwischen den verwendeten Targets liegt lediglich in der Breite der Stege. Je nach Target liegt das Aspektverhältnis h/b der simulierten Gräben zwischen 1.25 (bei der Stegbreite $b_\mathrm{s} = 1\,\mathrm{mm}$) und 5 (bei $b_\mathrm{s} = 4\,\mathrm{mm}$). Auf der rechten Seite des Simulationsgebiets, dessen Länge L_x nach dem in Abschnitt D.6 beschriebenen Kriterium bestimmt wurde, wurden die aus dem Plasmabulk in die Vorschicht strömenden Ionen und Elektronen wieder mit den Stromdichten $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ bzw. $j_\mathrm{e} = 1516\,\mathrm{A/m^2}$ eingekoppelt. Schließlich konnten die Ionen wieder elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße mit den neutralen Atomen des Hintergrundgases der Dichte $n_0 = 2.57 \cdot 10^{19}\,\mathrm{m}^{-3}$ durchführen. Die Querschnitte für diese Prozesse betragen bei der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}} = 4400\,\mathrm{m/s}$ etwa $36\,\mathrm{\AA}^2$ bzw. $40\,\mathrm{\AA}^2$ [Cramer, 1959], die zugehörigen mittleren freien Weglängen liegen damit bei 11 cm bzw. 10 cm. Die Ortsraumzellen hatten in x- und y-Richtung jeweils die gleiche Ausdehnung $\Delta x = \Delta y = 0.1\,\mathrm{mm}$, die Länge eines Zeitschritts wurde mit $\Delta t = 1\,\mathrm{ns}$ vorgegeben.

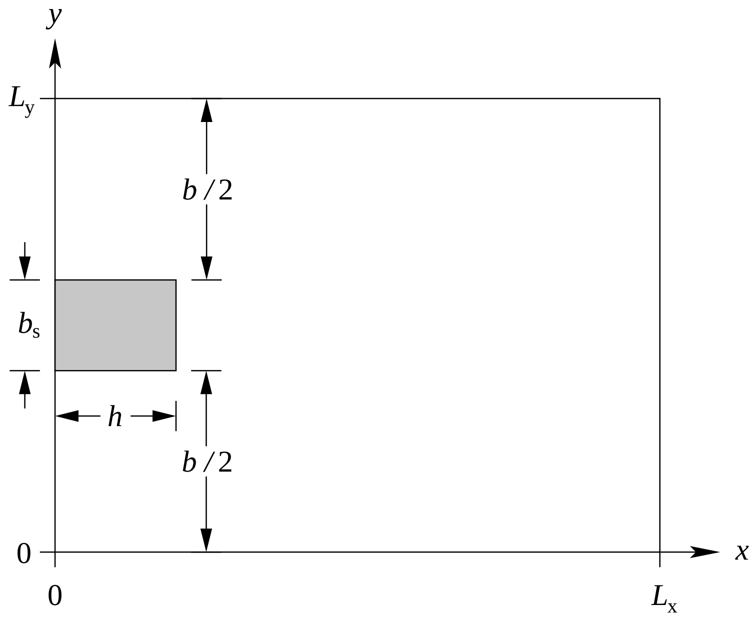

Abbildung 11.1: Skizzenhafte Darstellung der Geometrie der Targets, die für die Untersuchungen verwendet wurden. Auf der linken Seite befindet sich eine ebene Wand der Breite $L_y = 5\,\mathrm{mm}$, auf der ein Steg der Höhe $h = 5\,\mathrm{mm}$ plaziert ist. Die Stegbreite b_s variierte je nach Simulation zwischen 1 mm und 4 mm. Die Targets setzen sich insgesamt aus einer periodischen Wiederholung des abgebildeten Bereichs längs der y-Achse zusammen und waren in Richtung der z-Achse unendlich ausgedehnt. Dadurch entsteht eine periodische Folge von Stegen, zwischen denen jeweils ein Graben mit der Breite $b = L_y - b_s$ liegt. Das Simulationsgebiet stimmt mit dem dargestellten Gebiet der Fläche $L_x \cdot L_y$ überein und hatte je nach Simulation eine Ausdehnung L_x in x-Richtung zwischen 2.6 cm und 2.9 cm.

11.3 Struktur der Plasmarandschicht

Zunächst soll in diesem Abschnitt untersucht werden, wie die Plasmarandschicht in der Nähe der verwendeten Targets aussieht. Wie aus den bisher in dieser Arbeit vorgestellten ein- und zweidimensionalen Floatingpotential-Randschichten bekannt ist, beträgt die Schichtdicke in dem verwendeten Plasma bei Anliegen des Floatingpotentials am Target etwa 2 bis 3 mm. Da die Gräben bei den hier simulierten Targets nur Breiten zwischen 1 mm und höchstens 4 mm besitzen, sollte das Plasma bei keinem dieser Strukturen in der Lage sein, in den jeweiligen Graben einzudringen. Diese und andere Verhaltensweisen sollen im folgenden diskutiert werden.

11.3.1 Target mit Stegen der Breite 1 mm

Einen Überblick über die Struktur der Plasmarandschicht vor dem Target mit der Stegbreite 1 mm gibt Abbildung 11.2. Die Dichteverteilung der Ionen zeigt in größerer Entfernung von dem Target eine rein planare Struktur. Erst in der unmittelbaren Nähe des Stegs treten auch Dichtegradienten in y-Richtung auf, wie die Isolinien in Abbildung 11.2 a) zeigen. Trotzdem scheint der Graben mit einer Breite von 4 mm bereits zu schmal zu sein, um dem Plasma ein Eindringen und damit die Ausbildung einer dem Target konformen Struktur der Randschicht zu ermöglichen. Aus diesem Grund besitzt die Ionendichte im Inneren des Grabens auch fast keinen Gradienten in y-Richtung und verläuft dort sehr flach. Vor dem Steg ähnelt der Dichteverlauf dagegen sehr dem vor einer planaren Wand.

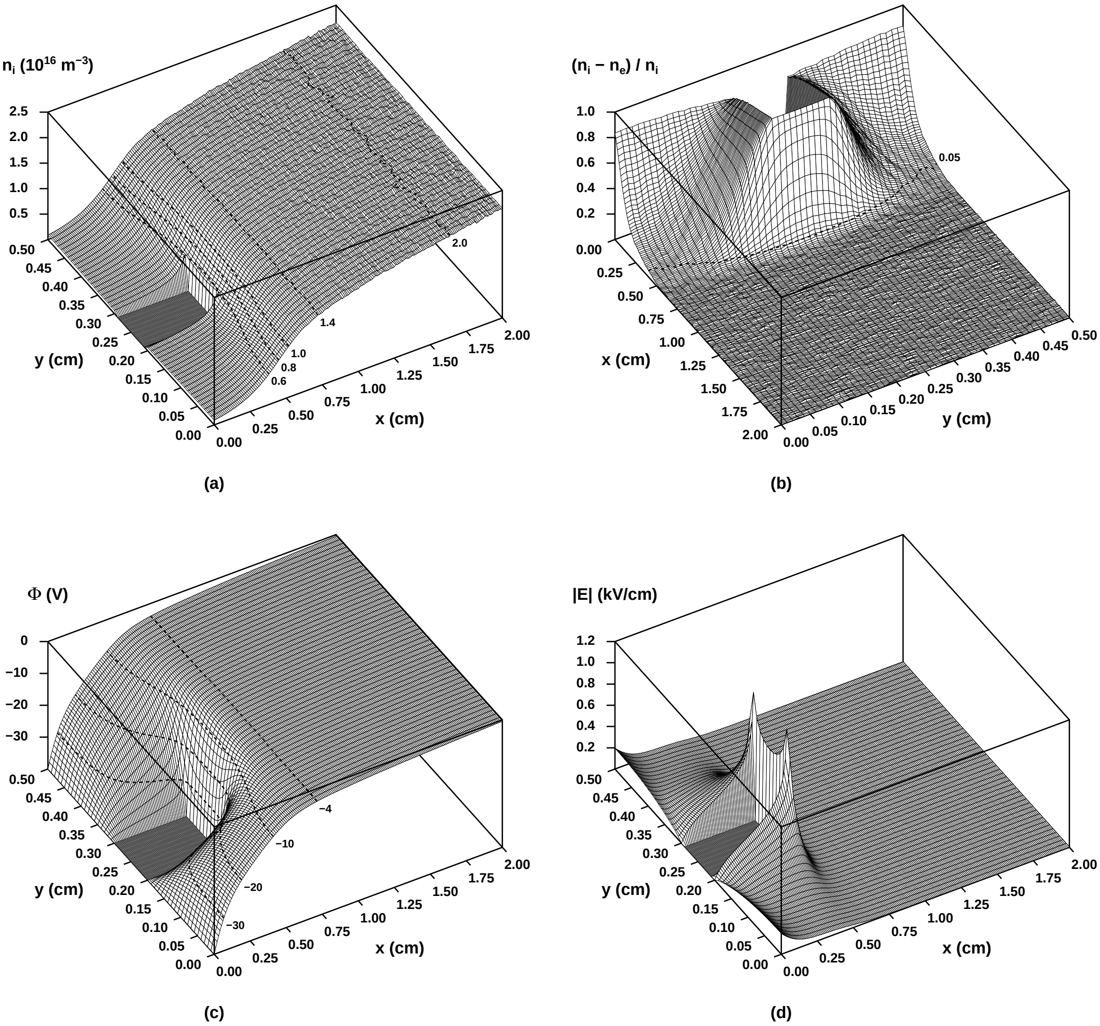

Abbildung 11.2: Darstellung der Verteilung a) der Ionendichte n_i, b) der relativen Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ (gedreht um 90°), c) des elektrischen Potentials Φ und d) des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ für das Target mit der Stegbreite 1 mm.

Die fehlende Konformität läßt sich auch sehr gut am Verlauf der Schichtkante beobachten, der anhand des folgenden Kriteriums bestimmt wurde: In der Vorschicht ist das Plasma quasineutral und die Ionen und Elektronen besitzen überall die gleiche Teilchendichte. Diese Quasineutralität endet an der Schichtkante, wo die Elektronendichte gegenüber der Ionendichte mit zunehmender Tiefe in der sich anschließenden Schicht immer kleiner wird. Die Schichtkante läßt sich daher näherungsweise dadurch bestimmen, daß die Orte gesucht werden, an denen die Elektronendichte um 5% unter die dortige Ionendichte abgesunken ist, wo also $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i} = 0.05$ gilt. Wie man in Abbildung 11.2 b) erkennen kann, befindet sich diese Linie in dem dort eingezeichneten Profil von $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ direkt vor dem Steg etwa 1.1 mm von der Targetoberfläche entfernt, während ihr Abstand vom Grabenboden in der Mitte des Grabens mindestens 4 mm beträgt. Es sei noch bemerkt, daß die eigentliche Schichtkante, an der Ionen und Elektronen gerade noch die gleiche Dichte haben, überall noch einmal mindestens 1 mm weiter vom Target entfernt liegt. Wie die Abbildung weiterhin zeigt, nimmt die Elektronendichte gegenüber der Ionendichte in der eigentlichen Plasmaschicht schnell ab, weshalb das Verhältnis $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ dort bis auf Werte zwischen 0.77 und 0.97 anwächst.

Die Verteilung des elektrischen Potentials Φ in Abbildung 11.2 c) zeigt in größeren Entfernungen vom Target ebenfalls eine planare Struktur. Diese reicht etwa bis zu der fast linear verlaufenden Potential-Isoline $\Phi = -k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$ bei $x = 7.1\,\mathrm{mm}$, an der nach dem Bohmkriterium die Schichtkante zu finden sein sollte. Der große Unterschied im Verlauf dieser Isolinie zu der Linie aus Abbildung 11.2 b), an der $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i} = 0.05$ gilt, offenbart wieder die bereits in Abschnitt 7.3.4 angesprochene Verletzung des Bohmkriteriums. Diese rührt daher, daß es im Inneren des Grabens zu einer Aufteilung des Ionenstroms auf die Bodenfläche und die Seitenflächen des Grabens kommt, wodurch eine Divergenz $\frac{\partial j_\mathrm{i}}{\partial x} > 0$ der Ionenstromdichte entsteht. Während das Potentialgefälle vor dem Steg wieder ähnlich verläuft wie vor einer planaren Wand, erstreckt sich das Gefälle im Graben aufgrund des flachen Ionendichteprofils dort über eine deutlich größere Strecke.

Schließlich ist in Abbildung 11.2 d) die Verteilung des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ dargestellt. Dort erkennt man an den Kanten der Stegstirnfläche das aus der Elektrostatik bekannte divergierende Verhalten des elektrischen Feldes gemäß $|E| \propto r^{-1/3}$, wobei r den Abstand von der betrachteten Kante darstellt [Jackson, 1982]. In größerer Entfernung von der Kante fällt das elektrische Feld in Abbildung 11.2 d) jedoch proportional zu $r^{-1/3} \cdot e^{-r/\lambda_\mathrm{D}}$ und damit deutlich schneller als mit $r^{-1/3}$ ab, weil sich dort bereits die kollektiv abschirmende Eigenschaft der Elektronen bemerkbar macht. Dabei stellt $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}\epsilon_0/n_\mathrm{p}e^2}$ die Debye-Länge des Plasmas dar, die etwa 0.15 mm beträgt. Wie sich später zeigen wird, haben diese starken Kantenfelder einen großen Einfluß auf die Verteilungen der Stromdichte und des Aufschlagwinkels der Ionen auf der Targetoberfläche. In den konkaven Ecken am Boden des Grabens verschwindet das elektrische Feld dagegen vollständig, was ebenfalls aus der Elektrostatik bekannt ist. Diese besagt, daß sich das Feld in der Nähe einer 90°-Ecke wie $|E| \propto r$ verhält [Jackson, 1982].

11.3.2 Target mit Stegen der Breite 2.5 mm

Eine Verbreiterung des Stegs auf 2.5 mm und die damit einhergehende Verkleinerung des Grabens auf die gleiche Breite führt nun dazu, daß das Plasma noch weiter aus dem Graben gedrängt wird, als im Fall der Stegbreite von 1 mm. Die dazugehörigen Verteilungen sind in Abbildung 11.3 dargestellt. Die Dichteverteilung der Ionen zeigt nun überall eine planare Struktur, die sich bis in den Graben hinein fortsetzt. Zudem ist die Ionendichte im Grabeninneren jetzt bereits deutlich kleiner als in Abbildung 11.2 a). Das zeigt sich auch in Abbildung 11.2 b), wo wieder der relative Unterschied der Teilchendichten $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$

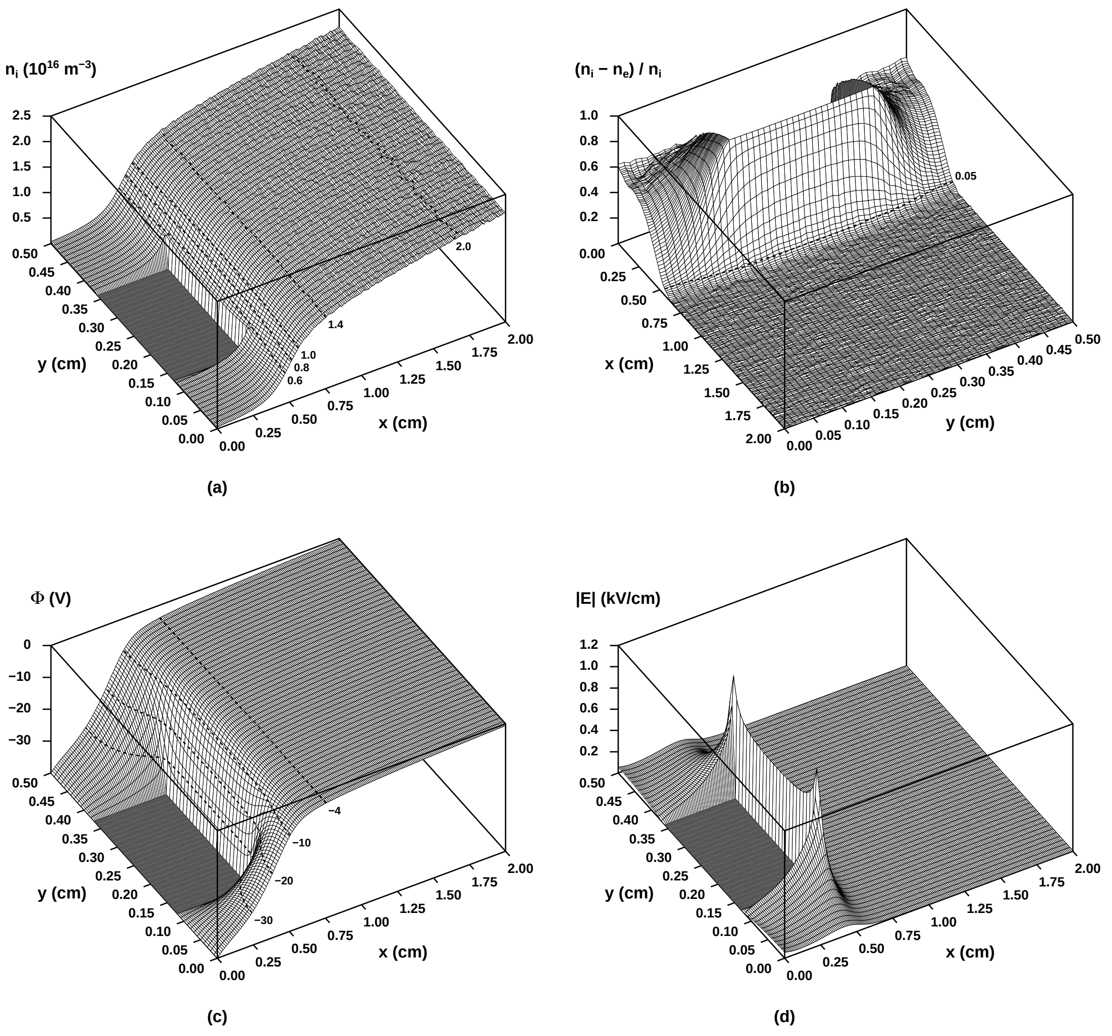

Abbildung 11.3: Darstellung der Verteilung a) der Ionendichte n_i, b) der relativen Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ (gedreht um 90°), c) des elektrischen Potentials Φ und d) des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ für das Target mit der Stegbreite 2.5 mm.

zu sehen ist. Am Grabenboden beträgt der relative Dichteunterschied zwischen Ionen und Elektronen jetzt nur noch 0.6, während auf der Stirnfläche des Stegs wieder wie zuvor 0.97 erreicht werden. Die nach dem Kriterium $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i} = 0.05$ näherungsweise bestimmte Schichtkante verläuft jetzt nur noch leicht gekrümmt zwischen $x = 5.6\,\mathrm{mm}$ vor der Grabenmitte und $x = 6.2\,\mathrm{mm}$ vor dem Steg. Die tatsächliche Schichtkante liegt demgegenüber wieder nochmals mindestens 1 mm weiter vom Target entfernt.

Die Verteilung des elektrischen Potentials Φ in Abbildung 11.3 c) zeigt jetzt kaum noch eine Konformität zur Targetoberfläche. Insbesondere die Isolinien zu $\Phi = -20\,\mathrm{V}$ und $-30\,\mathrm{V}$ sind im Bereich des Grabens weiter in Richtung Grabenausgang gedrängt worden. Zudem weist das Potential in der Grabenmitte jetzt eine positive Krümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} > 0$ in x-Richtung auf. Dies ist eine Folge der hier jetzt auftretenden starken Potentialkrümmung in y-Richtung, $\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} < 0$, die durch die nahe zusammengerückten Seitenwände des Grabens verursacht wird. In einer eindimensionalen Randschicht kann die beobachtete Krümmung in x-Richtung gar nicht auftreten, weil das Potential in der positiv geladenen Raumladungsschicht nur negativ gekrümmt sein kann:

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{en_\mathrm{i}}{\epsilon_0} < 0 \tag{11.1}$$

Das erlaubt nur die zweidimensionale Poisson-Gleichung,

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} = -\frac{en_\mathrm{i}}{\epsilon_0} < 0, \tag{11.2}$$

wenn die Krümmung in y-Richtung hinreichend stark negativ ist. Die Isolinie $\Phi = -k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e = -4\,\mathrm{V}$, die wie zuvor bei $x = 7.1\,\mathrm{mm}$ verläuft, zeigt jetzt eine deutlich bessere Übereinstimmung mit dem Verlauf der Schichtkante. Das zeigt, daß in diesem Fall, in dem die Verteilungen mehr und mehr planar geworden sind, das Bohmkriterium wieder annäherend seine Gültigkeit gewonnen hat. Schließlich zeigt Abbildung 11.3 d) noch die Verteilung des elektrischen Feldbetrags. An den Kanten und in der Mitte der Stegstirnfläche ist das Feld gegenüber Abbildung 11.2 d) geringfügig kleiner geworden. Die am besten sichtbare Veränderung betrifft aber das Feld im Graben. Dieses ist am Grabenboden aufgrund der kleineren Ionenraumladungsdichte kleiner geworden und weist in der Nähe des Grabeneingangs jetzt sogar einen Sattelpunkt auf. Dieser wird verursacht durch die weit ausgreifenden Kantenfelder an der Stirn benachbarter Stege, die sich hier zu überlappen beginnen und sich dadurch sogar etwas abschwächen.

11.3.3 Target mit Stegen der Breite 4 mm

Das Verhalten des Plasmas bei einer Stegbreite von 4 mm und einer Grabenbreite von nur noch 1 mm wird schließlich in Abbildung 11.4 dargestellt. Die eingezeichneten Verteilungen zeigen jetzt vor dem breiten Steg, der effektiv einer planaren Wand mit einem schmalen Graben darin entspricht, ausschließlich planare Strukturen. Die Ionendichte im

Inneren des Grabens hat gegenüber der Simulation mit der Grabenbreite von 2.5 mm nochmals etwas abgenommen und erreicht jetzt am Grabenboden nur noch $2.5 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$ statt wie zuvor $3.6 \cdot 10^{14}\,\mathrm{m}^{-3}$. Dadurch nimmt der relative Unterschied zwischen Ionen und Elektronen am Grabenboden jetzt auf 0.4 ab. Die Isolinie $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i} = 0.05$, die wieder annäherend die Position der Schichtkante markiert, befindet sich nun überall, auch vor dem Grabeneingang, an der Position $x = 6.2\,\mathrm{mm}$. Die eigentliche Schichtkante selbst ist dagegen etwa bei $x = 7.2\,\mathrm{mm}$ zu finden. Die Potentialverteilung zeigt nur noch eine leichte Auswölbung des Potentials in den Graben hinein, die jedoch gegenüber Abbildung 11.3 c)

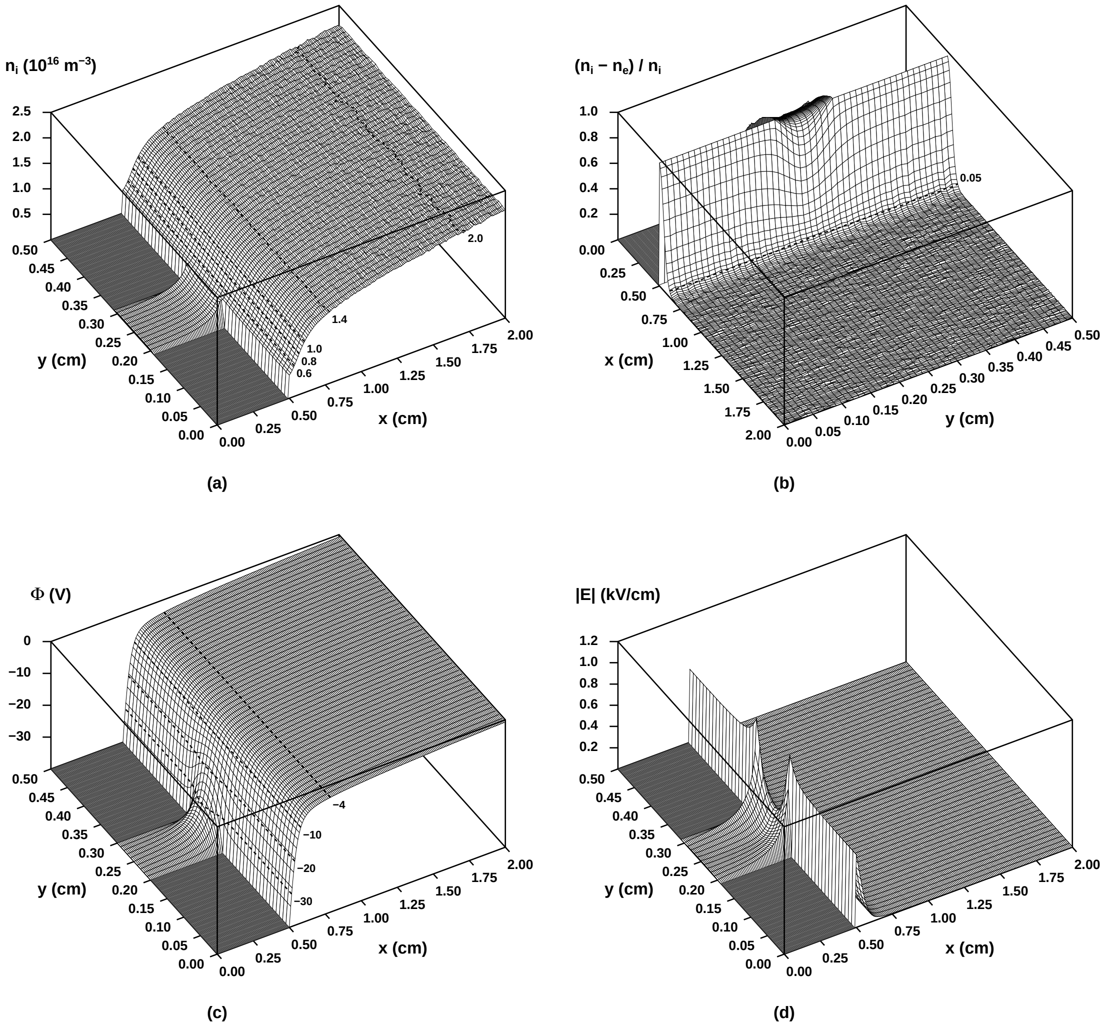

Abbildung 11.4: Darstellung der Verteilung a) der Ionendichte n_i, b) der relativen Abweichung zwischen Ionen- und Elektronendichte $(n_\mathrm{i} - n_\mathrm{e})/n_\mathrm{i}$ (gedreht um 90°), c) des elektrischen Potentials Φ und d) des Betrags des elektrischen Feldes $|E|$ für das Target mit der Stegbreite 4 mm. Gegenüber den Abbildungen 11.2 und 11.3 befindet sich der Graben jetzt in der Mitte des dargestellten Simulationsvolumens.

eine noch stärkere positive Krümmung $\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} > 0$ in x-Richtung besitzt. Diese rührt wieder daher, daß das Potential in der dazu senkrechten y-Richtung jetzt noch mehr positiv gekrümmt ist. Die dicht beieinander liegenden Seitenwände des Grabens erlauben es dem Potential Φ nur noch über einen kleinen Bereich zu variieren. So beträgt das Potential in der Mitte des Grabens an der Stelle $x = 4\,\mathrm{mm}$ jetzt gerade mal $-37\,\mathrm{V}$, während bei einer Grabenbreite von $2.5\,\mathrm{mm}$ dort schon $-19\,\mathrm{V}$ und bei $4\,\mathrm{mm}$ Grabenbreite sogar beinahe $-10\,\mathrm{V}$ erreicht werden. Dementsprechend hat das elektrische Feld im Graben ebenfalls abgenommen. Interessant ist auch hier der auftretende Sattelpunkt des elektrischen Feldbetrags am Eingang des Grabens. Dieser hat wieder seine Ursache in den überlappenden Feldern, die von den eng beieinander liegenden Kanten verursacht werden.

11.4 Vergleich zu einer planaren Randschicht

Die in Abschnitt 11.3 diskutierten Plasmarandschichten in der Nähe der zweidimensionalen Targets sollen nun im Hinblick auf ihre Übereinstimmung mit einer rein planaren Randschicht untersucht werden. Die Daten zu der planaren Plasmarandschicht stammen aus einer eindimensionalen hybriden PIC/MC-Simulation, bei der sich die planare Wand an der Stelle $x = 5\,\mathrm{mm}$ befindet. Diese Wahl wurde deshalb getroffen, weil sich bei der Diskussion der zweidimensionalen Plasmarandschichten in Abschnitt 11.3 gezeigt hat, daß diese gerade vor den Stegen, deren Stirnflächen bei $x = 5\,\mathrm{mm}$ liegen, einen annäherend planaren Aufbau besitzen.

Abbildung 11.5 zeigt nun zunächst einen Vergleich der Verteilungen der Teilchendichten und des Potentials, die aus den zweidimensionalen Simulationsdaten längs der Mittelachse der Stege gewonnen wurden, mit den entsprechenden Verteilungen vor der planaren Wand. Die dargestellten Kurven zeigen für alle Stegbreiten gute Übereinstimmungen mit den Kurven aus der planaren Randschicht. Da die Stege die am weitesten in das Plasma hineinragenden Strukturen der Targets sind, bedeutet dies verallgemeinert, daß die Plasmarandschicht vor der Targetfläche, die am tiefsten in das Plasma reicht, den gleichen Aufbau wie vor einer planaren Wand hat. Dies gilt jedoch keineswegs für die Verteilungen längs der Mittelachse der Gräben, wie Abbildung 11.6 zeigt. In dieser Abbildung ist sehr schön zu sehen, wie das Plasma mit abnehmender Breite des Grabens immer mehr aus diesem herausgedrängt wird. Bei einer Breite von $1\,\mathrm{mm}$ haben die Elektronen schon fast eine Verteilung wie vor einer planaren Wand angenommen, während immer noch eine nicht vernachlässigbare Zahl von Ionen in den Graben hineinströmt. Zusammen mit der Raumladungsdichte der Ionen bleibt dabei auch stets ein Anstieg des Potentials im Grabeninneren übrig.

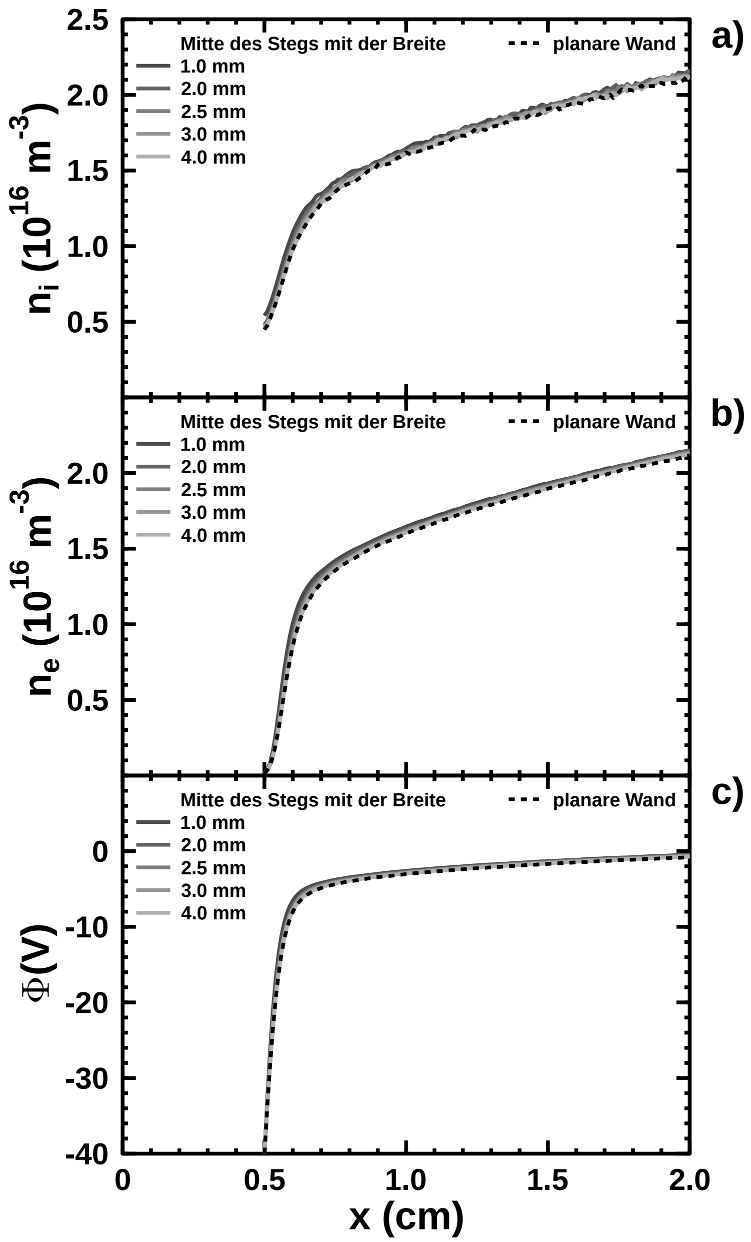

Abbildung 11.5: Vergleich zwischen den Verteilungen a) der Ionendichte n_i, b) der Elektronendichte n_e und c) des elektrischen Potentials Φ aus den zweidimensionalen Simulationen mit den Verteilungen aus der eindimensionalen Simulation einer Plasmarandschicht vor einer planaren Wand bei $x = 5\,\mathrm{mm}$. Die dargestellten Kurven aus den zweidimensionalen Simulationen stellen die Verteilungen längs der Mittelachse der Stege mit den angegebenen Breiten dar.

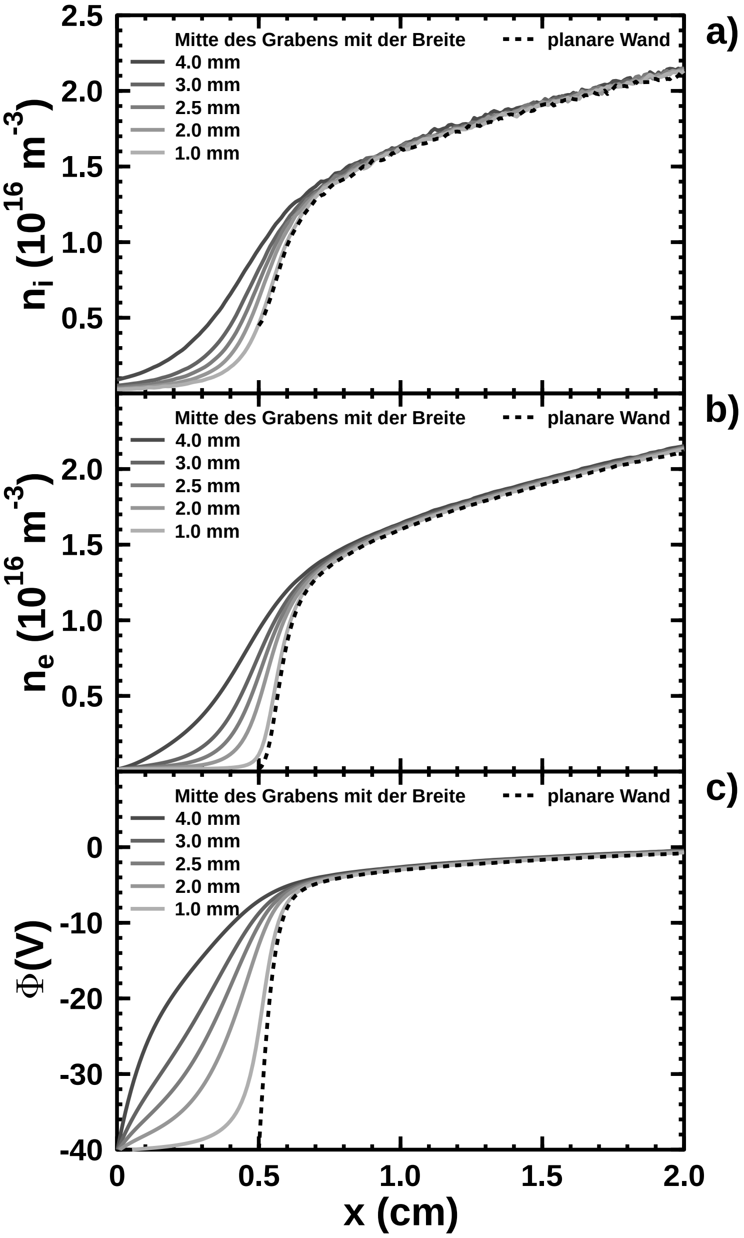

Abbildung 11.6: Vergleich zwischen den Verteilungen a) der Ionendichte n_i, b) der Elektronendichte n_e und c) des elektrischen Potentials Φ aus den zweidimensionalen Simulationen mit den Verteilungen aus der eindimensionalen Simulation einer Plasmarandschicht vor einer planaren Wand bei $x = 5\,\mathrm{mm}$. Die dargestellten Kurven aus den zweidimensionalen Simulationen stellen die Verteilungen längs der Mittelachse der Gräben mit den angegebenen Breiten dar.

11.5 Strom- und Winkelverteilung der Ionen auf der Targetoberfläche

Die für die Herstellung von Schichten und deren Qualität mittels der IBAD-Methode relevanten Verteilungen der Stromdichte und der Aufschlagwinkel der Ionen auf der Targetoberfläche werden weitestgehend durch das elektrische Feld in der Nähe des Targets bestimmt. Diese Verteilungen sollen im vorliegenden Abschnitt genauer untersucht werden.

11.5.1 Target mit Stegen der Breite 1 mm

Die detaillierte Strom- und Winkelverteilung der Argon-Ionen, die mit einer Energie von etwas mehr als 40 eV auf die Targetoberfläche auftreffen, ist in Abbildung 11.7 für den Fall des Targets mit der Stegbreite 1 mm dargestellt. Die Verteilungen zeigen charakteristische Ähnlichkeiten mit jenen Verteilungen, die bei der Simulation der Floatingpotential-Randschicht an dem Doppelsteg-Target aufgetreten sind, das für die Durchführung der zweidimensionalen PIII-Simulation verwendet wurde (siehe Abschnitt 7.4). Dort wurde bereits gezeigt, daß die Stromdichteverteilung qualitativ mit dem Verlauf des elektrischen Feldbetrages auf der Targetoberfläche übereinstimmt. Dies läßt sich auch hier bestätigen, wie ein Vergleich zwischen den Abbildungen 11.7 a) und 11.2 d) zeigt. Die Ionen werden durch das starke elektrische Feld an den beiden Kanten des Stegs in Richtung auf dessen Stirnfläche fokussiert und führen damit zu den beiden Strommaxima von 13.0 A/m^2 an den Rändern der Stegoberseite. Auch die Mitte der Stegoberseite profitiert von diesem Fokussierungseffekt, wo mit 11.8 A/m^2 immer noch etwa 20% mehr Ionen auftreffen, als angesichts der in die Vorschicht eingekoppelten Stromdichte von 9.86 A/m^2 erwartet wird. Ein Teil der in Richtung der Kanten beschleunigten Ionen fliegt jedoch an der Stirnfläche des Stegs vorbei und trifft die Seitenflächen aufgrund der Trägheit der Ionen in einiger Entfernung von der Kante. Dadurch werden die beidseitig sichtbaren lokalen Maxima auf den Seitenwänden verursacht, die etwa 0.2 mm von den Kanten entfernt liegen. Wie bereits in Kapitel 7 erläutert wurde, ist die leichte Abwärtsverschiebung der Strommaxima auf den Seitenwänden eng verwandt mit dem aus der Sondentheorie bekannten Effekt der Orbitalbewegung geladener Plasmateilchen um eine kugelförmige Sonde herum [Huddlestone und Leonard, 1965; Lochte-Holtgreven, 1968]. Danach kann ein Teilchen, das in das Zentralfeld der geladenen Sonde hinein gelangt, aufgrund seiner Drehimpulserhaltung nicht einfach den Feldlinien folgen und wird daher bei hinreichend großem Drehimpuls an der Sonde vorbeifliegen. Im vorliegenden Fall kommt dem Coulomb-Feld um die Kante herum die Bedeutung dieses Zentralfeldes zu. Bei weiterer Annäherung an die konkaven Ecken des Grabens nimmt die Ionenstromdichte auf den Seitenflächen des Stegs ab und erreicht direkt an den Ecken ihr Minimum auf der gesamten Targetoberfläche. Auch dieses Verhalten ist eine Folge des elektrischen Feldes, das zur Ecke hin verschwindet, wodurch immer weniger Ionen auf die Seitenwände gelenkt werden. Auf dem Grabenboden zeigt

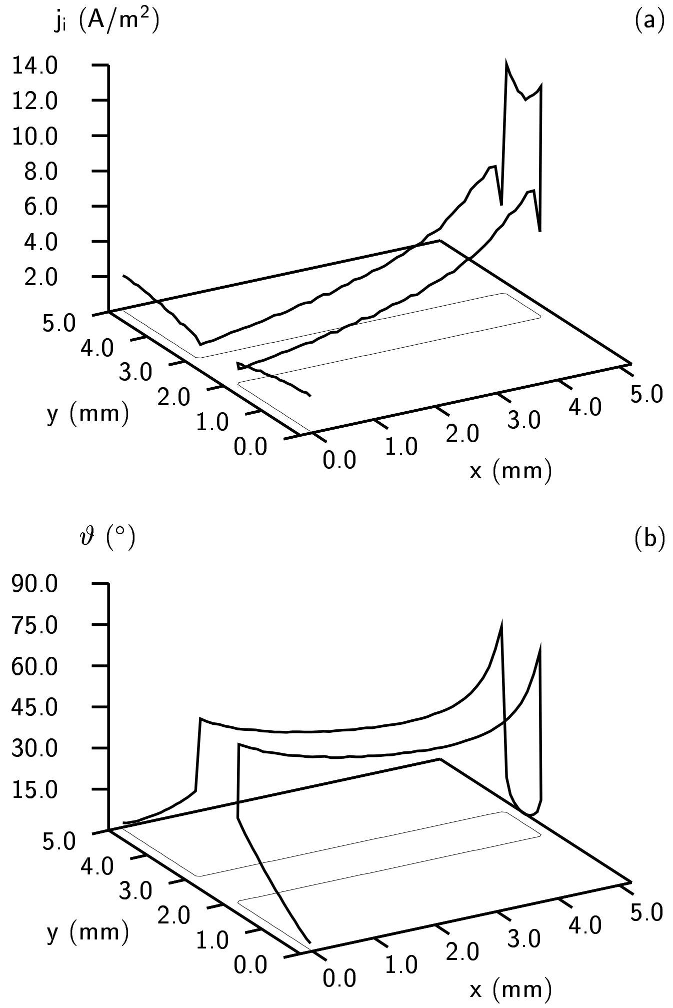

Abbildung 11.7: Verteilung a) der Ionenstromdichte j_i und b) des auf die lokale Flächennormale bezogenen Aufschlagwinkels ϑ der Ionen auf der Targetoberfläche bei einer Stegbreite von 1 mm. Die dünn eingezeichnete Linie stellt jeweils den Verlauf der Targetoberfläche dar.

die Stromdichte schließlich nur noch eine schwache Abhängigkeit vom Ort. Das lokale Maximum in der Mitte ist jedoch auch hier wieder auf das dortige lokale Feldmaximum zurückzuführen. Insgesamt betrachtet ist die Ionenstromdichte auf der Targetoberfläche stark inhomogen. Für die Anwendung in einer Ionenstrahl-unterstützten Abscheidemethode bedeutet das, daß auf dem Target sehr unterschiedlich, auf dem Grabenboden am wenigsten und auf der Stirnfläche des Stegs am meisten, Energie in der aufwachsenden Schicht deponiert wird. Die entstehende Schicht hätte danach lokal sehr unterschiedliche Qualitäten. Auf der Vorderseite des Stegs bekäme die aufwachsende Schicht am meisten Energie zugeführt, wodurch die Mobilität der Schichtteilchen dort am größten wäre. Als Folge davon könnten entstandene Leerstellen und Hohlräume aufgefüllt werden und die

Schicht wäre sehr dicht gepackt und glatt. Auf dem Grabenboden sollte dagegen wegen der geringen Energiezufuhr durch die Plasmaionen eine sehr offene, rauhe Schicht mit vielen Löchern und Rissen entstehen.

Die Verteilung der lokal zur jeweiligen Flächennormale gemessenen Winkel, mit denen die Ionen auf die Targetoberfläche auftreten, weist ebenfalls eine starke Variation auf, wie Abbildung 11.7 b) zeigt. Die im Zusammenhang mit der Stromdichte besprochene Fokussierung und Ablenkung der Ionen auf die Targetoberfläche kommt darin gut zum Ausdruck. In der Mitte der Stirnfläche des Stegs und der Mitte des Grabenbodens treffen die Ionen nahezu senkrecht auf die Oberfläche auf. Während die Winkelzunahme zu den Rändern der Stirnfläche auf die fokussierenden Kantenfelder zurückzuführen ist, kommen die zu den Ecken hin zunehmenden Winkel auf der Grabenbodenfläche dadurch zustande, daß die an dem Steg vorbeifliegenden Ionen durch das in y-Richtung verlaufende elektrische Feld der Seitenwände abgelenkt werden. Auf dem Grabenboden ist diese Ablenkung dabei umso größer, je näher die Ionen an einer der beiden Seitenwände entlang nach unten fliegen. Die Seitenflächen werden von den Ionen unter schiefen Winkeln zwischen 40° und 67° getroffen. Das Winkelminimum von $\vartheta = 40°$ bei $x = 3.3\,\mathrm{mm}$ ist dabei darauf zurückzuführen, daß dort solche Ionen auftreffen, die nahe genug an der Seitenwand mit ihrem transversalen Feld (einschließlich dem starken Kantenfeld an der Stirnfläche) entlang geflogen sind und dabei beim Eintritt in den Graben gleichzeitig hinreichend weit entfernt waren, um durch die zunehmende Ablenkung ihrer Trajektorien nicht zu früh und damit unter einem flachen Winkel auf die Wand zu treffen. Dieses Schicksal erfahren die Ionen, die zu nahe an der Stirnseite vorbeifliegen und dann unter dem Einfluß der starken Kantenfelder sofort auf die Wand treffen. Längs der Bahnen solcher Ionen, die dagegen weit entfernt von der Seitenwand in den Graben eindringen, ist das transversale Feld bereits so schwach, das die Ionen nur noch schwach abgelenkt werden und daher ebenfalls wieder flacher auf die Seitenwände treffen. Zudem nimmt das Feld zu den konkaven Ecken hin ab, wodurch die Ablenkung ebenfalls ab- und damit der lokale Auftreffwinkel ϑ zunimmt.

11.5.2 Target mit Stegen der Breite 2.5 mm

Abbildung 11.8 zeigt die lokale Strom- und Winkelverteilung der Ionen auf der Oberfläche des Targets mit 2.5 mm Stegbreite. Diese Verteilungen besitzen die gleichen Charakteristiken wie die Verteilungen in Abbildung 11.7. Durch die Verbreiterung des Stegs bildet sich in der Stromdichteverteilung in Abbildung 11.8 a) auf der Stirnseite des Stegs jetzt aber ein Plateau aus, in dessen Mitte der Strom nur noch eine Dichte von $j_\mathrm{i} = 10.2\,\mathrm{A/m^2}$ erreicht. Gleichzeitig hat die Stromdichte an den äußeren Kanten jetzt auf $12.0\,\mathrm{A/m^2}$ abgenommen. Entsprechend der Beobachtung in Abschnitt 11.3, wonach die Ionendichte in den Gräben mit abnehmender Grabenbreite immer kleiner wird, hat auch die Stromdichte der Ionen auf allen Wänden des Grabens gegenüber Abbildung 11.7 a) abgenommen. Durch die Enge des Grabens schwächen sich die von den gegenüberliegenden Seitenwänden ausgehenden transversalen Felder etwas ab. Dadurch nimmt die Ablenkung der Ionentrajektorien im Graben ab und die Ionen treffen flacher auf die Seitenwände und steiler auf

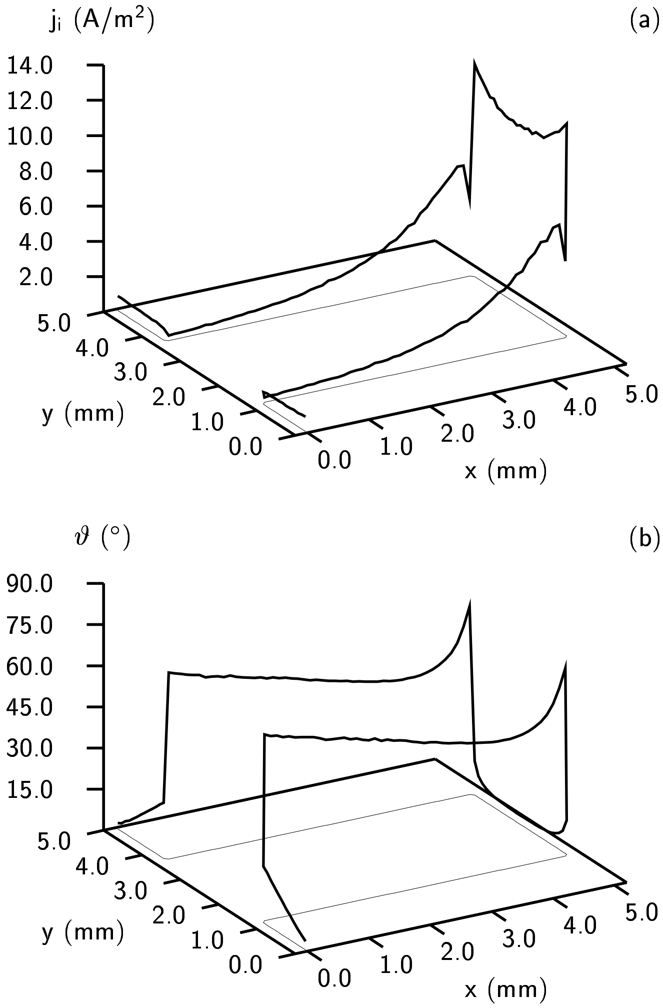

Abbildung 11.8: Verteilung a) der Ionenstromdichte j_i und b) des auf die lokale Flächennormale bezogenen Aufschlagwinkels ϑ der Ionen auf der Targetoberfläche bei einer Stegbreite von 2.5 mm. Die dünn eingezeichnete Linie stellt jeweils den Verlauf der Targetoberfläche dar.

die Bodenfläche des Grabens auf, wie Abbildung 11.8 b) zeigt. Auf den Seitenwänden bewegt sich der zur lokalen Flächennormale gemessene Winkel jetzt nur noch zwischen 47.1° bei $x = 4.0\,\mathrm{mm}$ und 68.6° an den vorderen Kanten.

11.5.3 Target mit Stegen der Breite 4 mm

Bei diesem Target liegen die Seitenwände benachbarter Stege so dicht beisammen, daß sich sowohl die transversalen Felder als auch die Kantenfelder, die von den Seitenwänden der Stege ausgehen, gegenseitig stark abschwächen. Infolge der dadurch abnehmenden fokussierenden Wirkung der Kantenfelder wird die Ionenstromdichte auf der Stirnseite der Stege nahezu konstant und beträgt jetzt in der Mitte nur noch 9.86 A/m^2. Dies entspricht genau der in die Vorschicht eingekoppelten Stromdichte der Ionen. An den Rändern der Stirnfläche erreicht der Ionenstrom gerade noch 10.6 A/m^2. Diese Beobachtungen können anhand der Abbildung 11.9 a) gut nachvollzogen werden. Aufgrund der geringen Grabenbreite von nur noch 1 mm und der dadurch abermals gesunkenen Dichte der Ionen im Grabeninneren nimmt auch die Stromdichte auf allen Wänden des Grabens noch weiter ab, als es bei dem Graben mit der Breite 2.5 mm schon geschehen ist. Gleichzeitig kommt

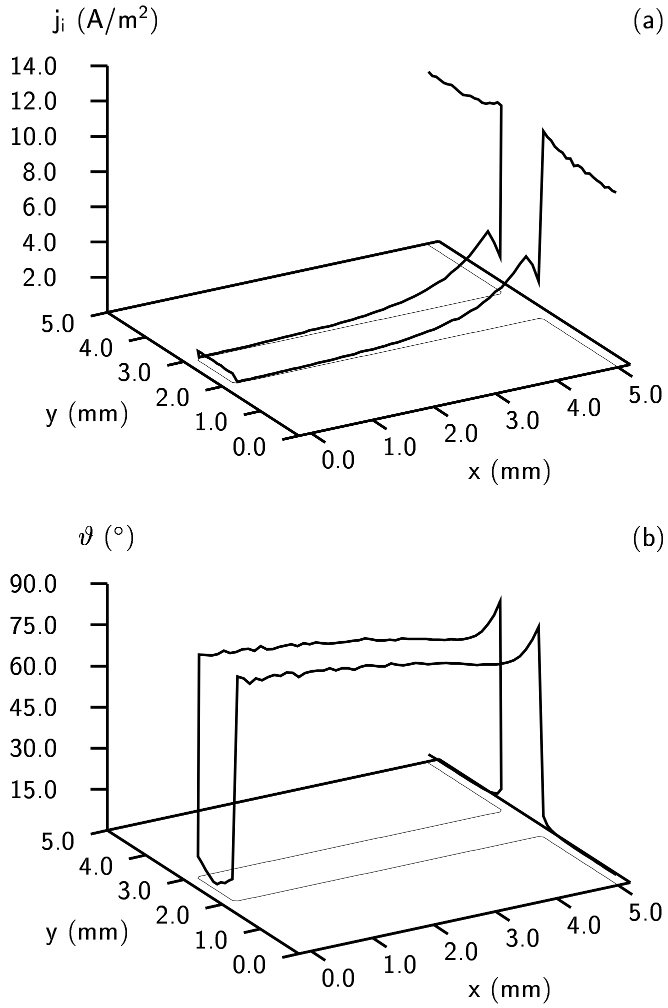

Abbildung 11.9: Verteilung a) der Ionenstromdichte j_i und b) des auf die lokale Flächennormale bezogenen Aufschlagwinkels ϑ der Ionen auf der Targetoberfläche bei einer Stegbreite von 4 mm. Die dünn eingezeichnete Linie stellt jeweils den Verlauf der Targetoberfläche dar. Gegenüber den Abbildungen 11.7 und 11.8 befindet sich der Graben jetzt in der Mitte des dargestellten Simulationsvolumens.

es durch die geringere Feldstärke in Inneren des Grabens zu einem streifenderen Einfall der Ionen auf die Seitenwände des Grabens, wie Abbildung 11.9 b) zeigt. Die zur lokalen Flächennormale gemessenen Winkel ϑ liegen jetzt nur noch in dem sehr schmalen Bereich zwischen $65.9°$ bei $x = 4.4\,\mathrm{mm}$ und $81.4°$ nahe des Grabenbodens.

11.6 Ionenstromverteilung auf den verschiedenen Flächensegmenten

Neben der detaillierten Ionenstromdichte auf der Targetoberfläche kann auch die über die verschiedenen planaren Abschnitte des Targets, wie Stegstirnfläche, Seitenwände und Grabenboden, gemittelte Ionenstromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ interessant sein. Entgegen der detaillierten Verteilung läßt die sich räumlich gemittelte Stromdichteverteilung nämlich approximativ durch ein einfaches Modell beschreiben, das jedoch die fokussierenden und ablenkenden Effekte des elektrischen Feldes vernachlässigt. Dieses Modell, das bereits in den Abschnitten 7.4.1 und 8.4 zur Anwendung kam, beruht auf der Annahme, daß der aus dem Plasmabulk kommende Ionenstrom der Dichte $j_0 = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ innerhalb des Grabens gleichmäßig auf die Seiten- und Bodenflächen verteilt wird. Die zugehörige Stromdichte, die im folgenden als j_G bezeichnet wird, muß dabei durch die Aufteilung auf mehrere Flächen zwar abnehmen, soll jedoch auf allen Flächen des Grabens gleich groß sein:

$$j_\mathrm{G} = j_0 \cdot \frac{b}{b + 2h}. \tag{11.3}$$

In dieser Gleichung hat h die Bedeutung der Grabentiefe oder Steghöhe und b stellt die Grabenbreite dar. Diese Bezeichnungen stimmen mit den in Abbildung 11.1 verwendeten überein. Auf der Stegstirnfläche sollte die Stromdichte dagegen stets $\langle j_\mathrm{i} \rangle = j_0$ betragen, da sich dort die Ionen nicht auf mehrere Flächen aufteilen müssen. Eine skizzenhafte Darstellung des eben beschriebenen Modells ist in Abbildung 11.10 zu finden.

Die simulierte mittlere Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ ist nun in Abbildung 11.11 a) zusammen mit der nach diesem Modell berechneten Stromdichte für die verschiedenen planaren Abschnitten der Targetoberfläche in Abhängigkeit von der Grabenbreite bzw. der Stegbreite dargestellt. Darin ist gut zu erkennen, daß das Modell in der Lage ist, die simulierten Stromdichten zunächst einmal in der richtigen Größenordnung wiederzugeben. Bei kleinen Stegbreiten, bei denen die stärksten Kantenfelder und damit die größten Fokussierungseffekte auftreten, werden jedoch deutlich mehr Ionen auf die Stegstirnfläche fokussiert, als das Modell zu beschreiben vermag. Diese Ionen fehlen offensichtlich auf dem Grabenboden, der gegenüber dem Modell von zu wenigen Ionen getroffen wird, während die modellierte und die simulierte Stromdichte auf den Seitenwänden eine sehr gute Übereinstimmung bei allen Steg- bzw. Grabenbreiten zeigen. Mit zunehmender Steg- bzw. abnehmender Grabenbreite werden die fokussierenden Kantenfelder immer schwächer und es kommt zu einer immer besseren Übereinstimmung zwischen dem Modell und der Simulation.

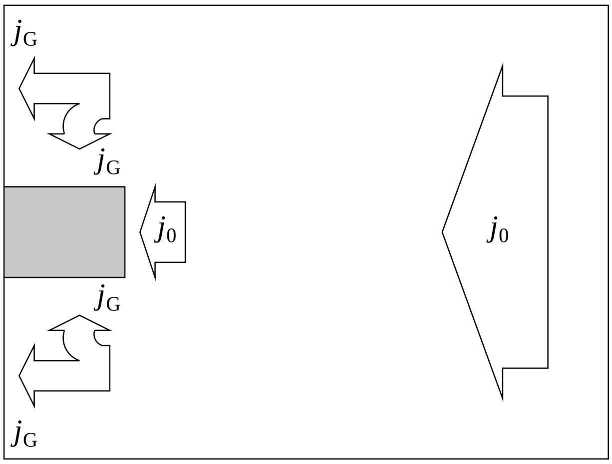

Abbildung 11.10: Darstellung der Aufteilung des eingekoppelten Ionenstroms der Dichte j_0 in einen Strom der Dichte j_0 auf die Stegstirnfläche sowie Ströme auf die Wände des Grabens, die die Dichte j_G haben.

Bezeichnet man mit $I_i \stackrel{\text{def}}{=} \langle j_i \rangle \cdot A_i$ den Ionenstrom auf ein Targetsegment der Fläche A_i, auf dem der mittlere Ionenstrom $\langle j_i \rangle$ beträgt, dann beträgt der Anteil am eingekoppelten Gesamtstrom I_0 der Ionen auf dieser Segmentfläche I_i/I_0. Zu welchen Anteilen sich der gesamte Ionenstrom I_0 auf die verschiedenen Targetsegmente aufteilt und wie die Übereinstimmung mit den Modellvorhersagen ist, wird jetzt in Abbildung 11.11 b) gezeigt. Gerade auf der Stegstirnfläche scheint die Modellvorhersage nach der Gewichtung der dortigen mittleren Stromdichte $\langle j_i \rangle$ mit der Querschnittsfläche A_i der Stirnfläche nicht mehr so schlecht zu sein, wie es noch in Abbildung 11.11 a) erscheint. Das kommt daher, daß mit abnehmender Stegbreite, wo die größten Abweichungen zwischen der berechneten und der simulierten Stromdichte $\langle j_i \rangle$ auftreten, gleichzeitig auch die Querschnittsfläche A_i abnimmt und damit der Überhöhung der simulierten Stromdichte $\langle j_i \rangle$ auf der Stirnfläche etwas die Schärfe genommen wird.

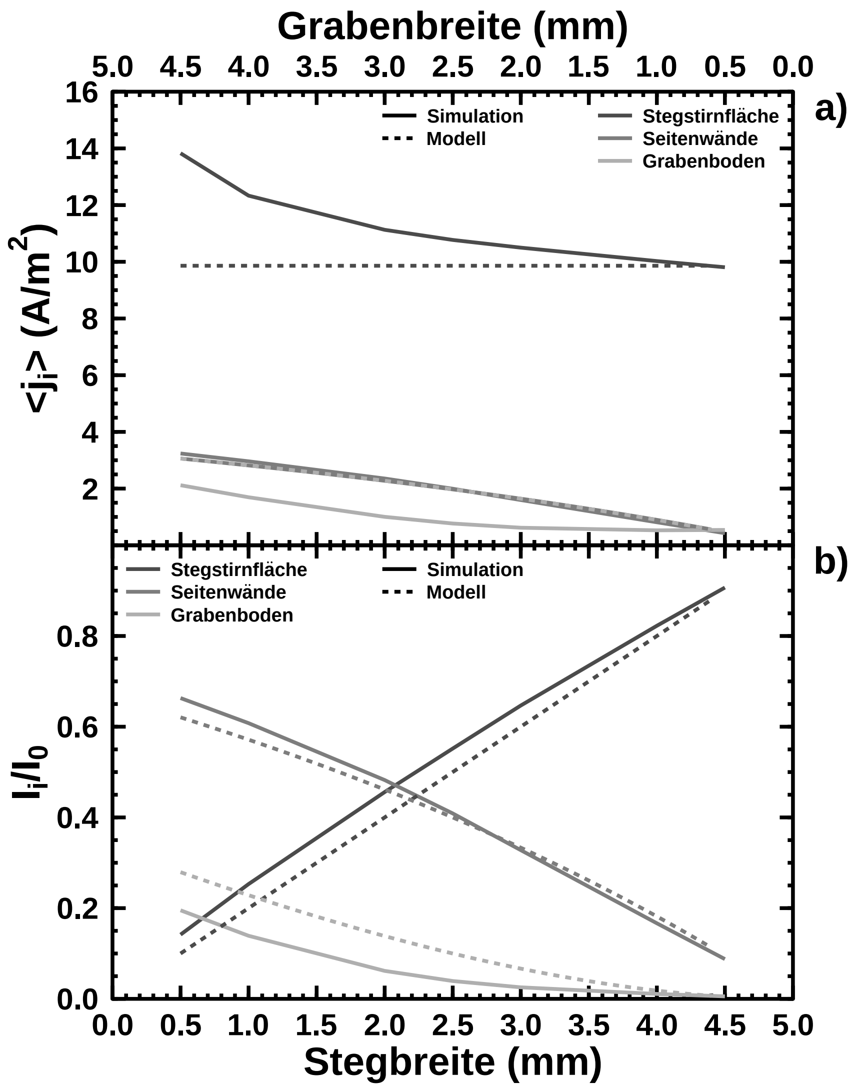

Abbildung 11.11: Abhängigkeit a) der mittleren Stromdichte $\langle j_\mathrm{i} \rangle$ und b) des Gesamtstromanteils I_i/I_0 auf den verschiedenen planaren Abschnitten der Targetoberfläche (Stegstirnfläche, Seitenwände und Grabenboden) von der Grabenbreite bzw. der Stegbreite.

11.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurden die Eigenschaften von zweidimensionalen Floatingpotential-Randschichten exemplarisch anhand von periodischen Targetstrukturen untersucht, die aus einer abwechselnden Folge von Stegen und Gräben aufgebaut sind. Aufgrund der gewählten Grabenbreite war das Plasma bei diesen Targets, im Gegensatz zu dem Target aus Kapitel 7, nur teilweise oder gar nicht in der Lage, in den Graben einzudringen. Trotzdem konnte gezeigt werden, daß die Ionen und Elektronen mit abnehmender Grabenbreite immer weiter aus dem Graben herausgedrängt werden und sich dabei immer mehr eine planare Randschicht vor dem Target entwickelt. Dabei hatte die Randschicht direkt vor dem Steg, also vor dem am tiefsten in das Plasma ragenden Teil des Targets, jeweils die gleiche Struktur wie eine Randschicht vor einer ebenen Wand. Die Verteilung der Stromdichte und des Aufschlagwinkels der Ionen auf der Targetoberfläche zeigt bei allen verwendeten Targetabmessungen starke Inhomogenitäten. Diese werden einerseits durch die starken Kantenfelder an der Stirnseite der Stege verursacht, die eine fokussierende Wirkung auf die Ionen haben und dazu führen, daß gerade bei schmalen Stegen mehr Ionen auf die Stegstirnseite beschleunigt werden. Mit zunehmender Stegbreite und damit abnehmender Grabenbreite kommt es durch die teilweise gegenseitige Schwächung der Kantenfelder zu einer Abnahme dieses Effekts. Andererseits kommen die Inhomogenitäten in der Stromdichte auch aus einer Auffächerung des Ionentrajektorien im Bereich des Grabens und einer damit einhergehenden Abnahme der Stromdichte. Diese konnte durch ein einfaches geometrisches Modell annäherend beschrieben werden. Das lokale Strommaximum auf den Grabenseitenwänden in der Nähe des Grabeneingangs konnte erfolgreich als Folge einer aus der Sondentheorie bekannten Orbitalbewegung der Ionen interpretiert werden. Die untersuchten Stromdichte- und Winkelverteilungen der Ionen sind gerade im Hinblick auf eine plasmagestützte Variante der IBAD-Methode von Interesse, weil dort die Eigenschaften einer gleichzeitig mit dem Ionenbeschuß aufwachsenden Schicht sehr davon abhängen, in welchem Maße durch die Ionen Energie zugeführt wird. Inhomogenitäten in der Ionenstromdichte führen dabei auch zu Inhomogenitäten in den Schichteigenschaften, die meistens unerwünscht sind.

Kapitel 12

Zusammenfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Untersuchung der Prozesse, die sich bei der Plasmaimmersions-Ionenimplantation (PIII) im Plasma nahe eines Targets abspielen. Dazu wurde das Particle-In-Cell/Monte Carlo-Verfahren (PIC/MC) eingesetzt, mit dem es möglich ist, Plasmen selbstkonsistent zu simulieren. Da das Augenmerk dieser Arbeit eindeutig auf der Schicht und Vorschicht des Plasmas lag, wurde in einem ersten Schritt ein Verfahren entwickelt, das die Simulation einer planaren Plasmarandschicht unter Ausklammerung des gesamten Plasmabulks erlaubt (Anhang B). Dadurch wurde eine starke Verkürzung der Rechenzeiten in den Simulationen möglich. Bei diesem Verfahren mußte jedoch der Wahl geeigneter Randbedingungen auf der Plasmaseite große Aufmerksamkeit geschenkt werden, um sowohl die Simulation einer statischen Floatingpotential-Randschicht als auch einer dynamischen Randschicht, wie sie bei der PIII auftritt, zu ermöglichen. Durch den Vergleich mit Ergebnissen aus einer Gesamtplasmasimulation konnte die Güte des entwickelten Verfahrens unter Beweis gestellt werden (Kapitel 2). Die Methode wurde zuerst zur Untersuchung planarer statischer Randschichten bei Anliegen des Floatingpotentials sowie einer negativen Hochspannung an dem Target eingesetzt. Dabei konnte nachgewiesen werden, daß das Child-Langmuir-Gesetz, das in der Plasmaphysik häufig verwendet wird, nur eine unbefriedigende Beschreibung der Potentialverteilung in der Plasmaschicht liefert. Durch eine Modifikation der Anfangswerte bei der Integration der Child-Langmuir-Gleichung konnte in dem wandnahen Bereich der Schicht, in dem die Elektronen stark unterdrückt sind, eine hervorragende Übereinstimmung zwischen dem modifizierten Gesetz und den simulierten Ergebnissen erzielt werden (Kapitel 3). Die Tatsache, daß sich bei der PIII in der Nähe eines Targets zunächst eine Floatingpotential-Randschicht entwickelt, in der die Ionen eine Driftgeschwindigkeit und ein Dichtegefälle aufweisen, wurde in den Simulationen dieser Arbeit erstmals berücksichtigt. Durch Vergleich mit ebenfalls durchgeführten Simulationen unter Anwendung der üblichen Startbedingung, daß das Plasma zu Beginn homogen und driftfrei sei, konnte gezeigt werden, daß bei der PIII der sehr wichtige Verlauf der Ionenstromdichte sowie die Schichtdynamik durch Benutzung der homogenen Startbedingung nicht richtig beschrieben werden können (Kapitel 4). Die Dynamik von Schicht und Vorschicht konnte durch die Simulation der Bewegung von Orten konstanter Ionendriftgeschwindigkeit analysiert werden. Dabei wurde beobachtet, daß die Vorschicht bei der PIII mit einer zeitlichen Verzögerung auf das Anlegen einer negativen Hochspannung an das Target reagiert, die auf die Ausbreitung und das Eintreffen einer Ionenschallwelle zurückzuführen ist. Auf der Grundlage dieser Beobachtungen konnte ein einfaches analytisches Modell entwickelt werden, das die Reaktion der Vorschicht auf die Bewegung der Schichtkante erfolgreich beschreiben kann (Kapitel 5). In einem weiteren Schritt der Arbeit wurde ein hybrides PIC/MC-Verfahren entwickelt, bei dem die lokale Dichte der isothermen Elektronen über einen Boltzmann-Ansatz nur noch vom elektrischen Potential abhängt (Anhang C). Die dadurch erreichte Beschleunigung des Verfahrens machte es erst möglich, mit einer Vielzahl von Simulationen das Verhalten des Plasmas bei periodisch angelegten Hochspannungspulsen mit verschiedenen Pulsparametern zu untersuchen. Dabei konnte gezeigt werden, daß der Erholung des Plasmas zwischen den Pulsen und der Ionensättigungsstromdichte, die in bisherigen Arbeiten unbeachtet blieb, eine große Bedeutung für die PIII zukommen (Kapitel 6).

Der zweite Teil der Arbeit befaßte sich mit Plasmarandschichten in der Nähe von zweidimensional strukturierten Targets. Als Simulationsverfahren kam eine zweidimensionale Version des entwickelten hybriden PIC/MC-Verfahrens zur Anwendung (Anhang D), bei dem zusätzlich den Randbedingungen auf der Targetseite große Beachtung geschenkt wurde (Anhang E). An einem Target, bestehend aus Doppelstegen mit dazwischen liegenden Gräben, wurde erstmals eine Plasmarandschicht bei Anliegen des Floatingpotentials an dem Target simuliert (Kapitel 7). Dabei zeigte sich eine Verletzung des Bohmkriteriums, bei der die Ionen an der Schichtkante in einem Graben die Bohmgeschwindigkeit bereits weit überschritten hatten. Als Ursache für dieses Verhalten konnte die Auffächerung der Ionentrajektorien im Grabeninneren und die dadurch verursachte Divergenz des Ionenstroms identifiziert werden. Weiterhin konnte nachgewiesen werden, daß das elektrische Feld in der Nähe des Targets räumlich stark variiert, was seine Ursache in der Divergenz des Feldes an den Kanten und dem Verschwinden in den Ecken hat. Die fokussierende Wirkung der Kantenfelder und die Auffächerung der Ionentrajektorien in den Gräben verursachten starke Inhomogenitäten in der Stromdichteverteilung. Der lokale Aufschlagwinkel der Ionen auf dem Target zeigte sich ebenfalls sehr inhomogen verteilt. Während in allen bisher durchgeführten zweidimensionalen PIII-Simulationen immer homogene driftfreie Plasmaverteilungen benutzt wurden, wurde in dieser Arbeit erstmals eine PIII-Simulation ausgehend von einer Floatingpotential-Randschicht durchgeführt (Kapitel 8). Dabei zeigten sich im Vergleich zu einer ebenfalls durchgeführten Simulation mit einer homogenen Startkonfiguration große Unterschiede in der Implantationsstromdichte. Die simulierte Dosisverteilung der implantierten Ionen war auf dem Target infolge der Fokussierungs- und Zerstreuungseffekte des elektrischen Feldes wieder sehr inhomogen verteilt. Die Dynamik der Schicht und Vorschicht, die einen Übergang von einer zylindrischen Matrixschicht zu einer planaren Hochspannungsschicht zeigt, wurde wieder erfolgreich durch ein analytisches Modell beschrieben (Kapitel 10). Die Potentialverteilung in der sich einstellenden stationären Hochspannungsschicht konnte durch die Hinzunahme einer Stromdivergenz oder -konzentration in das modifizierte Child-Langmuir-Gesetz verstanden werden (Kapitel 9). Schließlich wurden in mehreren Simulationen an verschiedenen zweidimensionalen Targets, die auf Floatingpotential lagen, die Eigenschaften des Plasmas hinsichtlich einer technischen Nutzung zur plasmaunterstützten Schichtabscheidung studiert (Kapitel 11).

Anhang A

Das PIC/MC-Simulationsverfahren

A.1 Einleitung

Alle in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen wurden mit Hilfe des Particle-In-Cell/Monte Carlo-Computersimulationsverfahrens (PIC/MC) durchgeführt. Man kann sich dieses Verfahren aus zwei Teilen bestehend vorstellen: Bei PIC handelt sich um eine teilchenbasierte Methode, mit der die Bewegung geladener Teilchen unter dem Einfluß ihres eigenen sowie eines äußeren elektrischen Feldes berechnet werden kann [Birdsall und Fuss, 1969; Birdsall und Langdon, 1995; Lawson, 1989; Hockney und Eastwood, 1994]. Dieses Verfahren eignet sich daher ideal dazu, ein vollständig ionisiertes Plasmas, das sich nur aus Ionen und Elektronen zusammensetzt, zu simulieren. Der PIC-Algorithmus wird in seiner eindimensionalen Form in Abschnitt A.2 behandelt. In einem Niedertemperatur-Plasma, wie es überlicherweise bei der Plasmaimmersions-Ionenimplantation (PIII) verwendet wird [Anders, 2000], sind die weitaus meisten der vorhandenen Teilchen jedoch neutrale Atome, die mit den geladenen Teilchen durch Stöße wechselwirken. Diese Stöße sind jedoch im reinen PIC-Verfahren noch nicht enthalten, da dort nur die Coulomb-Wechselwirkungen zwischen geladenen Teilchen berücksichtigt wird. Um diese Lücke zu schließen, wird der PIC-Algorithmus um ein Monte Carlo-Verfahren (MC) erweitert, mit dem die Stöße zwischen den geladenen und den neutralen Teilchen durchgeführt werden [Vahedi und Surendra, 1995]. Auf das MC-Verfahren wird in Abschnitt A.3 näher eingegangen. Die Kombination von PIC- und MC-Algorithmus bezeichnet man als PIC/MC-Methode [Birdsall, 1991].

A.2 Das eindimensionale PIC-Verfahren

In Folgenden wird davon ausgegangen, daß das betrachtete System von geladenen Teilchen in y- und in z-Richtung unendlich ausgedehnt ist, weshalb es genügt, in diesen Richtungen einen endlichen Ausschnitt mit der Fläche A zu betrachten. In x-Richtung soll das System dagegen zwischen den Punkten $x = 0$ und $x = L$ eingeschlossen sein. Wie in Abbildung A.1 dargestellt ist, wird der Ortsraum nun diskretisiert, indem ein System von $N + 1$ äquidistanten Gitterpunkten $x_j \stackrel{\text{def}}{=} j \cdot \Delta x$, $j = 0, \ldots, N$, eingeführt wird, die im Abstand $\Delta x \stackrel{\text{def}}{=} L/N$ voneinander entlang der x-Achse liegen. Die Punkte x_j mit $j = 1, \ldots, N - 1$ bilden dabei jeweils den Mittelpunkt einer Zelle der Breite Δx. Den Randpunkten x_0 und x_N wird dagegen je eine Zelle mit der Breite $\Delta x/2$ zugeordnet.

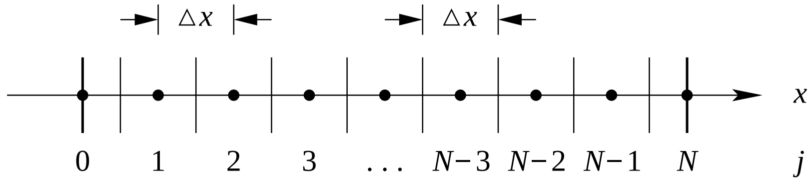

Abbildung A.1: Schematische Darstellung des Ortsraumgitters mit der Gitterbreite Δx. Die Gitterpunkte sind von 0 bis N durchnumeriert. Die inneren Punkte x_j mit $j = 1, \ldots, N - 1$ bilden jeweils den Mittelpunkt einer Zelle der Breite Δx, während den Randpunkten x_0 und x_N je eine Zelle der Breite $\Delta x/2$ zugeordnet ist.

Der Gitterabstand Δx soll dabei hinreichend klein sein, um die Prozesse auf der interessierenden und für das Systems relevanten Längenskala auflösen zu können. Handelt es sich bei dem System um ein Plasma, dann stellt die Debye-Länge, die die Rolle einer Abschirmlänge spielt, die obere Grenze für die Gitterbreite dar. Schließlich wird die Zeit in Schritte der Länge Δt zerlegt. Auch hier muß darauf geachtet werden, daß die wichtigen Prozesse innerhalb des Systems zeitlich aufgelöst werden können. Im Falle eines Plasmas zählen dazu die Elektronen- und Ionenplasmaschwingungen sowie die Stoßprozesse zwischen den geladenen Teilchen. Schließlich muß aus Gründen der numerischen Stabilität des PIC-Algorithmus noch das Courant-Kriterium erfüllt sein, wonach selbst die schnellsten Teilchen mit der Geschwindigkeit $v_{\max}$ innerhalb eines Zeitschrittes Δt höchstens die Strecke Δx zurücklegen dürfen [Birdsall und Langdon, 1995; Press *et al.*, 1992]:

$$v_{\max} \stackrel{!}{\leq} \frac{\Delta x}{\Delta t}. \tag{A.1}$$

A.2.1 Simulationsteilchen

In den Raum mit dem Volumen $A \cdot L$ werden nun Simulationsteilchen hineingesetzt, die jeweils das mittlere Verhalten von N_{real} realen geladenen Teilchen einer bestimmten Sorte (Ionen, Elektronen) repräsentieren. Die Zahl der Simulationsteilchen von einer Sorte richtet sich dabei nach der vorgegebenen Dichte n der realen Teilchen dieser Sorte und beträgt $n \cdot A \cdot L/N_{\text{real}}$. Auf diese Art wird es möglich, die Zahl der zu simulierenden Teilchen um den Faktor N_{real} zu reduzieren, wodurch das Vielteilchensystem erst berechenbar wird. In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen betrug die Teilchendichte etwa $n = 2 \cdot 10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}$, während N_{real} typischerweise in der Größenordnung $10^6 - 10^7$ lag. Zusammen mit der gewählten Querschnittsfläche $A = 1\,\mathrm{cm}^2$ und der Länge $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ führte das zu einer Simulationsteilchenzahl, die in den eindimensionalen Simulationen bei 10^4 lag. In den zweidimensionalen Simulationen betrug die Simulationsteilchenzahl dagegen etwa 10^6. Die Orts- und Geschwindigkeitskoordinaten x und $\vec{v}$ der Simulationsteilchen entsprechen den vorgegebenen Anfangsverteilungen. Dabei reicht es aufgrund der Symmetrie des Systems aus, nur die x-Koordinate der Teilchen zu betrachten, wohingegen alle Komponenten des Geschwindigkeitsvektors benötigt werden, um die Coulomb-Stöße zwischen den Teilchen richtig beschreiben zu können.

A.2.2 Raumladungsverteilung auf dem Gitter

Zur Berechnung der Coulomb-Kräfte, die auf die einzelnen Teilchen wirken, ist es erforderlich, die Potentialverteilung $\Phi(x)$ mittels der eindimensionalen Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_0} \tag{A.2}$$

zu berechnen. Dazu muß jedoch zunächst die Raumladungsverteilung $\rho(x)$ bestimmt werden. Im PIC-Verfahren stellt man sich dazu jedes Simulationsteilchen als eine Wolke mit der Ausdehnung Δx in x-Richtung und mit der Querschnittfläche A vor. In dem Volumen $A\Delta x$ dieser Wolke ist nun die gesamte Ladung $Q \stackrel{\mathrm{def}}{=} qN_{\mathrm{real}}$ der N_{real} dargestellten Realteilchen, die jeweils die Ladung q und die Masse m besitzen, gleichmäßig verteilt. In einer solchen Wolke beträgt die Raumladungsdichte daher überall $\rho_{\mathrm{sim}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} Q/A\Delta x$. Befindet sich der Mittelpunkt dieser Wolke nun zwischen den benachbarten Gitterpunkten x_j und x_{j+1}, dann wird ihre Raumladung anteilig auf die Gitterpunkte x_j und x_{j+1} verteilt. Diese Verteilung geschieht auf Basis der Wolkenanteile, die sich in den Zellen befinden, die zu diesen Gitterpunkten gehören. Zur Verdeutlichung ist in Abbildung A.2 die eben beschriebene gewichtete Aufteilung der Raumladung auf die Gitterpunkte skizzenhaft dargestellt. Bezeichnet man mit ρ_j und ρ_{j+1} die auf diese Weise auf die Punkte x_j und x_{j+1} entfallenden Raumladungsdichten, dann läßt sich die Aufteilung wie folgt beschreiben:

$$\rho_j = \rho_{\mathrm{sim}} \cdot \frac{x_{j+1} - x_{\mathrm{c}}}{\Delta x} \quad \text{und} \quad \rho_{j+1} = \rho_{\mathrm{sim}} \cdot \frac{x_{\mathrm{c}} - x_j}{\Delta x}. \tag{A.3}$$

Diese gewichtete Ladungsaufteilung, die einer linearen Interpolation zwischen den Gitterpunkten x_j und x_{j+1} entspricht, wird für alle Simulationsteilchen durchgeführt und die Raumladungen auf den Gitterpunkten jeweils akkumuliert. Auf diese Weise erhält man schließlich die auf die Gitterpunkte bezogene Raumladungsverteilung ρ_j, mit $j = 0, \ldots, N$, des gesamten Systems von geladenen Teilchen.

A.2.3 Lösung der Poisson-Gleichung

Damit ist man nun in der Lage, die Poisson-Gleichung (A.2) auf dem Gitter zu lösen und somit die elektrische Potentialverteilung zu bestimmen. Bezeichnet man das elektrische

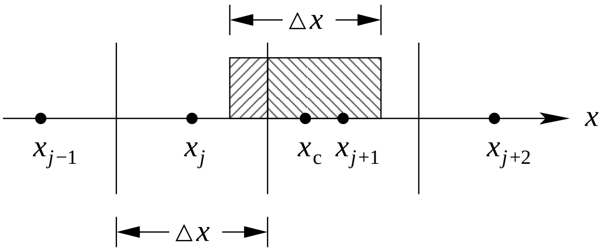

Abbildung A.2: Skizzenhafte Darstellung der gewichteten Aufteilung der Raumladung ρ_{sim} eines Simulationsteilchen auf die benachbarten Gitterpunkte. Der Mittelpunkt der Ladungswolke des Simulationsteilchen befindet sich an der Stelle x_{c} zwischen den Gitterpunkten x_j und x_{j+1}. Wie durch die Schraffur angedeutet ist, wird die Raumladung nun entsprechend den Anteilen der Wolke, die in den zu den Gitterpunkten gehörenden Zellen liegt, auf die beiden Punkte x_j und x_{j+1} aufgeteilt.

Potential an einem Gitterpunkt x_j mit $\Phi_j \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Phi(x_j)$, $j = 0, \ldots, N$, und ersetzt man an den inneren Gitterpunkten ($j = 1, \ldots, N-1$) die zweite Ableitung in der Poisson-Gleichung durch die Finite Differenz der Genauigkeit $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ [Press *et al.*, 1992],

$$\left.\frac{d^2\Phi}{dx^2}\right|_{x_j} \longrightarrow \frac{\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}}{(\Delta x)^2}, \quad j = 1, \ldots, N-1, \tag{A.4}$$

dann erhält man die Poisson-Gleichung in ihrer diskretisierten Form:

$$\frac{\Phi_{j+1} - 2\Phi_j + \Phi_{j-1}}{(\Delta x)^2} = -\frac{\rho_j}{\epsilon_0}, \quad j = 1, \ldots, N-1. \tag{A.5}$$

Unter Vorgabe des elektrischen Potentials Φ_0 und Φ_N an den Randpunkten x_0 und x_N nehmen die Gleichungen (A.5) die Form eines tridiagonalen Gleichungssystems an,

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \vdots \\ \Phi_{N-3} \\ \Phi_{N-2} \\ \Phi_{N-1} \end{pmatrix} = -\frac{(\Delta x)^2}{\epsilon_0} \cdot \begin{pmatrix} \rho_1 + \epsilon_0 \Phi_0/(\Delta x)^2 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{N-3} \\ \rho_{N-2} \\ \rho_{N-1} + \epsilon_0 \Phi_N/(\Delta x)^2 \end{pmatrix}, \tag{A.6}$$

das sich sehr effektiv lösen läßt [Press *et al.*, 1992]. Wenn das Gleichungssystem gelöst ist und damit das elektrische Potential Φ_j an allen Gitterpunkten bekannt ist, kann das elektrische Feld

$$E_j \stackrel{\mathrm{def}}{=} E(x_j) = -\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_{x_j} \tag{A.7}$$

an den Gitterpunkten bestimmt werden. Dazu benutzt man auch für den Gradienten des Potentials an den inneren Gitterpunkten den Ausdruck einer Finiten Differenz mit der Genauigkeit $\mathcal{O}(\Delta x^2)$:

$$E_j = -\frac{\Phi_{j+1} - \Phi_{j-1}}{2\Delta x}, \quad j = 1, \ldots, N-1. \tag{A.8}$$

Dieses Verfahren versagt jedoch an den Randpunkten x_0 und x_N. Man findet jedoch einen einfachen Zugang zu den Randfeldern, wenn man die eindimensionale Poisson-Gleichung über die Länge einer Randzelle integriert. Das soll hier für den Fall der ersten Zelle, die sich von $x = 0$ bis $x = \Delta x/2$ erstreckt, gezeigt werden. Ausgehend von Gleichung (A.2) liefert eine Integration zwischen den Grenzen $x = 0$ bis $x = \Delta x/2$ zunächst:

$$\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_{\Delta x/2} - \left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_0 = -\frac{1}{\epsilon_0} \int\limits_0^{\Delta x/2} \rho(\tilde{x})\, d\tilde{x}. \tag{A.9}$$

Darin läßt sich das Differential $-\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_0$ als das elektrische Feld E_0 am Punkt x_0 identifizieren, während man den Ausdruck $\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_{\Delta x/2}$ durch die Finite Differenz

$$\left.\frac{d\Phi}{dx}\right|_{\Delta x/2} \longrightarrow \frac{\Phi_1 - \Phi_0}{\Delta x} \tag{A.10}$$

mit der Genauigkeit $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ approximieren kann. Schließlich bleibt noch festzustellen, daß die Raumladungsdichte $\rho(x)$ im Rahmen der PIC-Methode innerhalb der Randzelle als konstant anzusehen ist und den Wert ρ_0 besitzt. Dadurch läßt sich das Integral auf der rechten Seite von Gleichung (A.9) durch den Ausdruck $\rho_0 \Delta x/2$ ersetzen. Faßt man dies alles zusammen und löst die resultierende Gleichung nach E_0 auf, dann erhält man für das elektrische Feld am Gitterpunkt x_0 folgende Beziehung:

$$E_0 = -\frac{\Phi_1 - \Phi_0}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{\rho_0}{\epsilon_0}. \tag{A.11}$$

Eine ganz analoge Rechnung liefert für das elektrische Feld am äußerst rechten Gitterpunkt x_N die Gleichung

$$E_N = -\frac{\Phi_N - \Phi_{N-1}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\rho_N}{\epsilon_0}. \tag{A.12}$$

Diese Ausdrücke stimmen mit denen überein, die Lawson auf der Grundlage einer Energiebetrachtung hergeleitet hat [Lawson, 1989].

A.2.4 Bewegung der Teilchen unter dem Einfluß der elektrischen Kräfte

Die Simulationsteilchen werden nun unter dem Einfluß des soeben berechneten elektrischen Feldes während der Dauer eines Zeitintervalls Δt bewegt. Dies geschieht durch

Anwendung der sogenannten Leap-Frog-Methode auf die zu lösende Newton'sche Bewegungsgleichung. Ausgehend von der Gleichung für die Bewegung eines Simulationsteilchens der Masse $M \stackrel{\text{def}}{=} N_{\text{real}} \cdot m$ und der Ladung Q in x-Richtung,

$$M\frac{dv}{dt} = Q \cdot E \quad \text{mit} \quad \frac{dx}{dt} = v, \tag{A.13}$$

lauten die Integrationsgleichungen damit:

$$M\frac{v_{t+\Delta t/2} - v_{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = Q \cdot E(x_t) \quad \text{und} \tag{A.14}$$

$$\frac{x_{t+\Delta t} - x_t}{\Delta t} = v_{t+\Delta t/2}. \tag{A.15}$$

Darin bezeichnen $v_{t-\Delta t/2}$ und $v_{t+\Delta t/2}$ die x-Komponenten der Geschwindigkeit des Teilchens zu den Zeitpunkten $t-\Delta t/2$ bzw. $t+\Delta t/2$, während x_t und $x_{t+\Delta t}$ dessen Position zu den Zeiten t bzw. $t+\Delta t$ darstellen. Für das elektrische Feld $E(x_t)$ wird der Wert am Ort des Teilchens x_t zum Zeitpunkt t verwendet. Befindet sich das Teilchen dabei zwischen zwei Gitterpunkten x_j und x_{j+1}, dann wird der Wert $E(x_t)$ durch lineare Interpolation zwischen den Werten des Feldes E_j und E_{j+1} an diesen Punkten gewonnen:

$$E(x_t) = E_j \cdot \frac{x_{j+1} - x_t}{\Delta x} + E_{j+1} \cdot \frac{x_t - x_j}{\Delta x}. \tag{A.16}$$

Der Nachteil der Leap-Frog-Methode liegt darin, daß die Geschwindigkeiten und Positionen der Teilchen nie gleichzeitig bekannt sind, sondern immer nur mit einer zeitlichen Verschiebung von $\Delta t/2$. Der Vorteil dagegen ist die erreichte Genauigkeit von $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ bei der Integration von Gleichung (A.13). Abbildung A.3 zeigt zur Verdeutlichung eine schematische Darstellung des Leap-Frog-Verfahrens, das für jedes Simulationsteilchen durchgeführt werden muß. Es sei noch angemerkt, daß jedes Simulationsteilchen die gleiche spezifische Ladung Q/M besitzt wie die von ihm repräsentierten realen Teilchen (q/m). Aus diesem Grund spiegelt die Bewegung jedes Simulationsteilchens unter dem Einfluß des elektrischen Feldes auch tatsächlich die mittlere Bewegung der von ihm dargestellten Realteilchen wider.

A.2.5 Der vollständige PIC-Zyklus

Die in den Abschnitten A.2.2 bis A.2.4 beschriebenen Berechnungsvorschriften stellen genau einen Zeitschritt der Länge Δt dar. Um die zeitliche Entwicklung eines gegebenen Systems geladener Teilchen über einen längeren Zeitraum verfolgen zu können, müssen daher alle Berechnungen, die in diesen Abschnitten beschrieben wurden, immer wieder in genau der angegebenen Reihenfolge durchgeführt werden, solange, bis der gewünschte Zeitraum simuliert worden ist. Dabei muß auch beachtet werden, daß Teilchen, die während ihrer Bewegung eventuell auf eine der berandenden Flächen bei $x = 0$ oder $x = L$ treffen, detektiert und aus dem Algorithmus entfernt werden. Gleichzeitig müssen in jedem Zeitschritt genügend Teilchen, die durch diese Flächen in den Simulationsraum eintreten sollen, mit in das Rechenschema integriert werden.

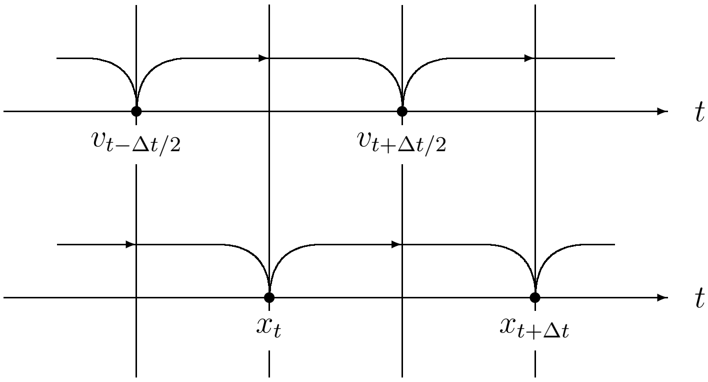

Abbildung A.3: Schematische Darstellung des Leap-Frog-Verfahrens zur Intergration der Bewegungsgleichung eines Teilchens: Zuerst wird das Teilchen aufgrund der elektrostatischen Kraft $Q \cdot E(x_t)$ am Ort x_t auf die Geschwindigkeit $v_{t+\Delta t/2}$ beschleunigt. Anschließend wird das Teilchen mit dieser Geschwindigkeit zu seinem neuen Ort $x_{t+\Delta t}$ bewegt.

A.3 Das MC-Stoßverfahren

Das bisher beschriebene PIC-Verfahren ist nur in der Lage, die Bewegung geladener Teilchen aufgrund deren gegenseitiger Coulomb-Wechselwirkung zu beschreiben. Wie in der Einleitung dieses Kapitels jedoch bereits erwähnt wurde, sind in einem Niedertemperatur-Plasma, wie es normalerweise bei der PIII verwendet wird, die meisten der vorhandenen Teilchen neutrale Atome oder Moleküle. Mit einem typischen Ionisationsgrad von 10^{-3}, der den Anteil der Ionen an allen im Plasma vorhandenen Atomen beschreibt, ist die Zahl der neutralen Atome um etwa drei Größenordnungen höher als die der Ionen und Elektronen. Da die neutralen Atome weiterhin keine Kräfte durch das elektrische Feld erfahren, können sie insgesamt als eine Art ruhendes homogenes Hintergrundgas mit überall und stets gleichen Eigenschaften angesehen werden. Aufgrund ihrer großen Anzahl müssen die Neutralteilchen jedoch als häufig auftretende Stoßpartner der geladenen Teilchen angesehen werden. Diese Stöße sind aber im bisher beschriebenen PIC-Verfahren noch nicht enthalten und müssen daher zusätzlich implementiert werden. Dazu wird in der Regel ein Monte Carlo-Verfahren verwendet, das in diesem Abschnitt kurz angedeutet werden soll. Für eine sehr ausführliche Beschreibung des MC-Stoßverfahrens sei auf den Artikel von Vahedi und Surendra verwiesen, in dem alle wichtigen Stoßprozesse vor dem Hintergrund der Anwendung auf Argon- und Sauerstoff-Plasmen behandelt werden [Vahedi und Surendra, 1995].

A.3.1 Grundlagen des MC-Verfahrens

Angenommen, es existieren n_k Kanäle für die Stöße und Reaktionsprozesse, die ein geladenes Teilchen mit einem neutralen Atom aus dem Hintergrundgas der Dichte n_0 und der

Temperatur T_0 durchführen kann. Dann läßt sich jedem dieser unterschiedlichen Kanäle ein Streu- oder Reaktionsquerschnitt $\sigma_i(v_\mathrm{r})$, $i = 1, \ldots, n_\mathrm{k}$, zuordnen, der nur abhängt von der Relativgeschwindigkeit v_r zwischen dem geladenen Teilchen und dem Stoßpartner aus dem ruhenden Hintergrundgas. Der totale Streu- und Reaktionsquerschnitt beträgt dann $\sigma_\mathrm{T}(v_\mathrm{r}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1}^{n_\mathrm{k}} \sigma_i(v_\mathrm{r})$. Die Wahrscheinlichkeit $P_\mathrm{T}(v_\mathrm{r})$, daß das geladene Teilchen innerhalb der Zeit Δt nun einen Stoß oder eine Reaktion mit diesem Stoßpartner ausführt, beträgt damit

$$P_\mathrm{T}(v_\mathrm{r}) = 1 - \exp(-n_0 \sigma_\mathrm{T}(v_\mathrm{r}) v_\mathrm{r} \Delta t). \tag{A.17}$$

Dieses Verfahren läßt sich durch Anwendung der sogenannten Null-Collision-Methode noch erheblich beschleunigen. Dazu führt man bei jeder Geschwindigkeit v_r noch einen hypothetischen Querschnitt $\sigma_0(v_\mathrm{r})$ so ein, daß das Produkt $[\sigma_\mathrm{T}(v_\mathrm{r}) + \sigma_0(v_\mathrm{r})] \cdot v_\mathrm{r}$ konstant und damit unabhängig von der Relativgeschwindigkeit v_r wird. Mit diesem hypothetischen Querschnitt ist allerdings kein echter Streu- oder Reaktionsprozeß verbunden, was den Namen der Methode erklärt. Dadurch wird es möglich, die Stoßwahrscheinlichkeit, die nach Gleichung (A.17) noch für jedes geladene Teilchen einzeln berechnet werden muß, für alle Teilchen gleichzeitig zu berechnen. Dazu definiert zunächst man unter Einbeziehung des hypothetischen Querschnitts $\sigma_0(v_\mathrm{r})$ einen neuen totalen Querschnitt $\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sigma_\mathrm{T}(v_\mathrm{r}) + \sigma_0(v_\mathrm{r})$, der nun die Beziehung $\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) \cdot v_\mathrm{r} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \Sigma = \mathrm{const}$ erfüllt. Berechnet man jetzt damit analog zu Gleichung (A.17) die Wahrscheinlichkeit für einen Stoß- oder Reaktionsprozeß innerhalb Δt,

$$P_\mathrm{N} = 1 - \exp(-n_0 \sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) v_\mathrm{r} \Delta t) = 1 - \exp(-n_0 \Sigma \Delta t), \tag{A.18}$$

dann ist diese unabhängig von der Relativgeschwindigkeit v_r des gerade betrachteten Teilchens und gilt damit gleichzeitig für alle Teilchen dieser Sorte. Durch Multiplikation dieser Wahrscheinlichkeit P_N mit der Zahl der vorhandenen Teilchen der betrachteten Sorte läßt sich dann sehr schnell ermitteln, wieviele Teilchen davon innerhalb des aktuellen Zeitschritts Δt einen Stoß durchführen sollen. Welche Teilchen dann tatsächlich stoßen, wird dabei zufällig bestimmt. Wenn nun ein Teilchen herausgesucht wurde, das einen Stoß machen soll, dann wird durch eine gleichverteilte Zufallszahl $R \in [0, 1]$ ausgewürfelt, welche Art von Stoß oder Reaktion das Teilchen durchführen wird. Dazu kommt folgendes Schema zur Anwendung:

$$\begin{array}{rcccl@{\quad}c@{\quad}l}
0 & \leq & R & < & \sigma_1(v_\mathrm{r})/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \Longrightarrow & \text{Stoßprozeß 1} \\
\sigma_1(v_\mathrm{r})/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \leq & R & < & [\sigma_1(v_\mathrm{r}) + \sigma_2(v_\mathrm{r})]/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \Longrightarrow & \text{Stoßprozeß 2} \\
 & & \vdots & & & & \vdots \\
\sum\limits_{i=1}^{n_\mathrm{k}-1} \sigma_i(v_\mathrm{r})/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \leq & R & < & \sum\limits_{i=1}^{n_\mathrm{k}} \sigma_i(v_\mathrm{r})/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \Longrightarrow & \text{Stoßprozeß } n_\mathrm{k} \\
\sum\limits_{i=1}^{n_\mathrm{k}} \sigma_i(v_\mathrm{r})/\sigma_\mathrm{N}(v_\mathrm{r}) & \leq & R & \leq & 1 & \Longrightarrow & \text{kein Stoß}
\end{array} \tag{A.19}$$

Damit ist das grundlegende Prinzip des MC-Verfahrens dargelegt, wie es zur Erweiterung des PIC-Verfahrens verwendet wird. Welche Stöße im Fall des in dieser Arbeit benutzten Argon-Plasma nun tatsächlich relevant sind und wie diese prinzipiell berechnet werden, wird in den folgenden Abschnitten näher beschrieben.

A.3.2 Stöße zwischen Ar-Ionen und neutralen Ar-Atomen

Als mögliche Stöße zwischen den Ar-Ionen und den neutralen Ar-Atomen des Hintergrundgases wurden elastische Stöße und Ladungsaustauschstöße zugelassen. Abbildung A.4 zeigt experimentell gemessene totale Querschnitte für diese Stöße in Abhängigkeit von der Energie [Cramer, 1959]. Gleichzeitig sind Fit-Kurven an diese Meßdaten dargestellt, die den Querschnitten entsprechen, die in den Simulationen verwendet wurden. Für die angepassten Funktionen ergaben sich folgende Energieabhängigkeiten:

$$\sigma_{\mathrm{exch}}(E) = 5.2012 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{m}^2 \cdot (E/1\,\mathrm{eV})^{-0.1513} \quad \text{und} \tag{A.20}$$

$$\sigma_{\mathrm{elast}}(E) = 4.2011 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{m}^2 \cdot (E/1\,\mathrm{eV})^{-0.1378} \tag{A.21}$$

Dabei stellt $\sigma_{\mathrm{exch}}(E)$ den Ladungsaustausch-Querschnitt dar, während $\sigma_{\mathrm{elast}}(E)$ den elastischen Streuquerschnitt meint.

Elastische Stöße wurden in den Simulationen als Stöße zwischen harten Kugeln modelliert, wobei die Streuwinkel der Ionen im Schwerpunktsystem isotrop verteilt waren. Bei Ladungsaustauschstößen wurde dagegen angenommen, daß ein Elektron von dem neutralen Ar-Atom aus dem Hintergrundgas der Temperatur T_0 auf das stoßende Ion übertragen wird. Dadurch ensteht ein neutrales Atom mit der Geschwindigkeit des Ions vor dem Stoß

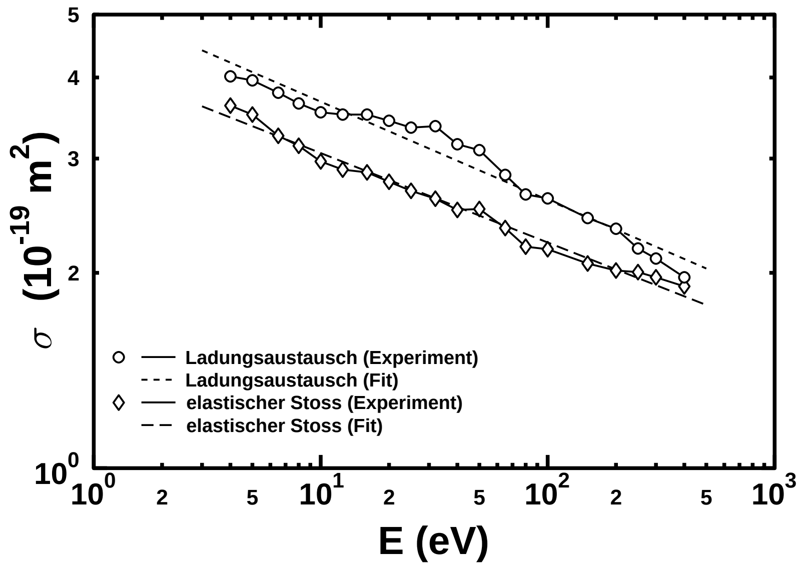

Abbildung A.4: Doppellogarithmische Darstellung der experimentell gemessenen totalen Querschnitte für elastische Stöße und für Ladungsaustauschstöße zwischen Ar-Ionen und neutralen Ar-Atomen in Abhängigkeit von der Energie (durchgezogene Linien). Daneben sind die an diese Daten angepassten Fit-Kurven (gestrichelte Linien) dargestellt, wie sie in den Simulationen verwendet wurden.

und ein thermisches Ion. Die so entstehenden Ionen wurden in den Simulationen mit Geschwindigkeiten entsprechend einer Maxwell-Verteilung bei der Temperatur T_0 erzeugt, deren Richtungen im Laborsystem isotrop verteilt waren.

A.3.3 Stöße zwischen Elektronen und neutralen Ar-Atomen

Als Stöße zwischen den Elektronen des Plasmas und den neutralen Ar-Atomen wurden zunächst elastische Stöße, Anregungsstöße und Ionisationsstöße in Betracht gezogen. Die zu diesen Stößen gehörenden experimentell gemessenen totalen Streuquerschnitte sind in Abbildung A.5 zu sehen. Die Daten sind einer Zusammenstellung von Streu- und Reaktionsquerschnitten entnommen, wie sie vom Joint Institute for Laboratory Astrophysics (JILA) in Boulder/Colorado (USA) verwendet werden [Phelps, 1997]. Unterhalb der niedrigsten Schwelle von 11.5 eV für die Anregung eines Ar-Atoms sind ausschließlich elastische Stöße möglich. Ausgehend von der in den Simulationen stets verwendeten Elektronentemperatur von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ kann man ausrechnen, daß 76% aller Elektronen eine Energie kleiner als die Anregungsschwelle eines Ar-Atoms haben und für diese daher nur elastische Stöße in Frage kommen. Bei weiterer Erhöhung der Energie nimmt der Anregungsquerschnitt nun bis zum Einsetzen der Ionisation des Ar-Atoms bei 15.8 eV auf etwa $3.7 \cdot 10^{-21}\,\mathrm{m}^2$ zu, während der elastische Streuquerschnitt leicht auf $1.26 \cdot 10^{-19}\,\mathrm{m}^2$ abfällt. Der elastische Streuquerschnitt ist damit immer noch gut zwei Ordnungen größer, weshalb die elastische Streuung auch in diesem Energiebereich, in den etwa weitere 10% der Elektronen fallen, der dominante Prozeß sein sollte. Schließlich entfallen mehr als 99.9% aller

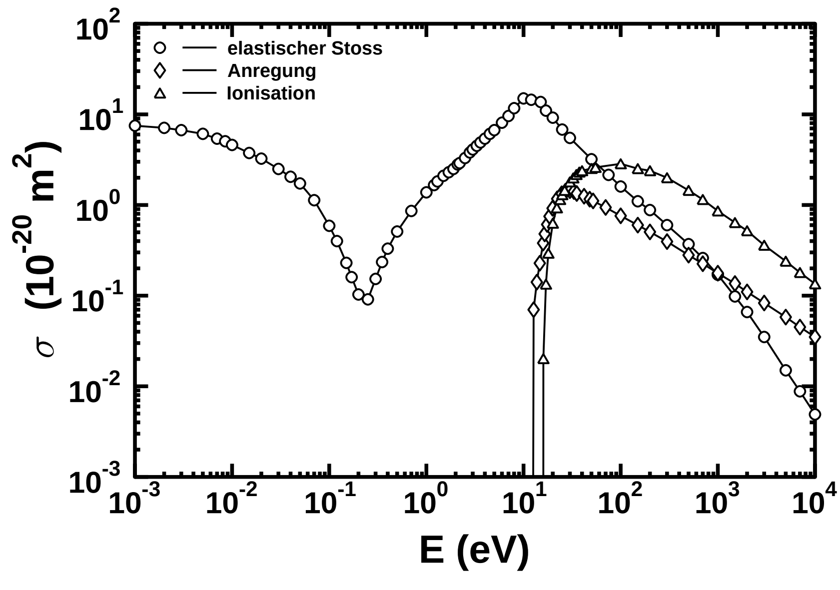

Abbildung A.5: Doppellogarithmische Darstellung der experimentell gemessenen totalen Querschnitte für elastische Stöße, Anregungsstöße und Ionisationsstöße zwischen Elektronen und neutralen Ar-Atomen.

Elektronen auf den Energiebereich unterhalb von etwa 60 eV, wo der Anregungs- und Ionisationsquerschnitt zusammen erst die Größe des elastischen Streuquerschnitts erreichen. Diese Zahlen verdeutlichen, daß in den Simulationen von den drei genannten Prozessen einzig die elastischen Stöße zwischen Elektronen und neutralen Ar-Atomen eine Rolle spielen, während die inelastischen Prozesse (Anregung und Ionisation) vernachlässigt werden können.

Aufgrund des großen Massenunterschieds von $m_\mathrm{i}/m_\mathrm{e} = 72820$ zwischen einem Ar-Atom und einem Elektron liegt der Energieübertragungs-Koeffizient bei einem elastischen Stoß zwischen den beiden Spezies bei $4m_\mathrm{i}m_\mathrm{e}/(m_\mathrm{i}+m_\mathrm{e})^2 = 5.5\cdot10^{-5}$ [McDaniel, 1964]. Das bedeutet, daß die Elektronen bei diesen Stößen an den massiven Ar-Atomen nur eine Impulsablenkung erfahren, während in sehr guter Näherung kein Energieübertrag stattfindet. Die Streuwinkel χ, unter denen die Elektronen aus ihrer Bahn gelenkt werden, wurden dabei in den Simulationen auf der Grundlage des analytischen Ausdrucks für den winkeldifferentiellen Streuquerschnitts

$$\sigma(E,\chi) = \sigma(E)\cdot\frac{E}{4\pi\left[1+E\sin^2(\chi/2)\right]\ln(1+E)},\quad \text{mit } E \text{ in eV}, \tag{A.22}$$

ausgewürfelt [Surendra *et al.*, 1990; Vahedi und Surendra, 1995].

A.4 Zusammenfassung

Eine Kombination des in Abschnitt A.2 beschriebenen PIC-Algorithmus mit der MC-Methode, wie sie in Abschnitt A.3 vorgestellt wurde, ergibt schließlich das vollständige PIC/MC-Verfahren. Dieses Verfahren wurde in den Simulationen, die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführt wurden, eingesetzt. Abbildung A.6 zeigt in schematischer Weise eine zusammenfassende Darstellung des Algorithmus. Dabei wurde der Einfachheit halber auf die Annahme einer speziellen Symmetrie des Systems verzichtet, sodaß mit Ausnahme der Raumladungsdichte alle verwendeten Größen Vektoren sind.

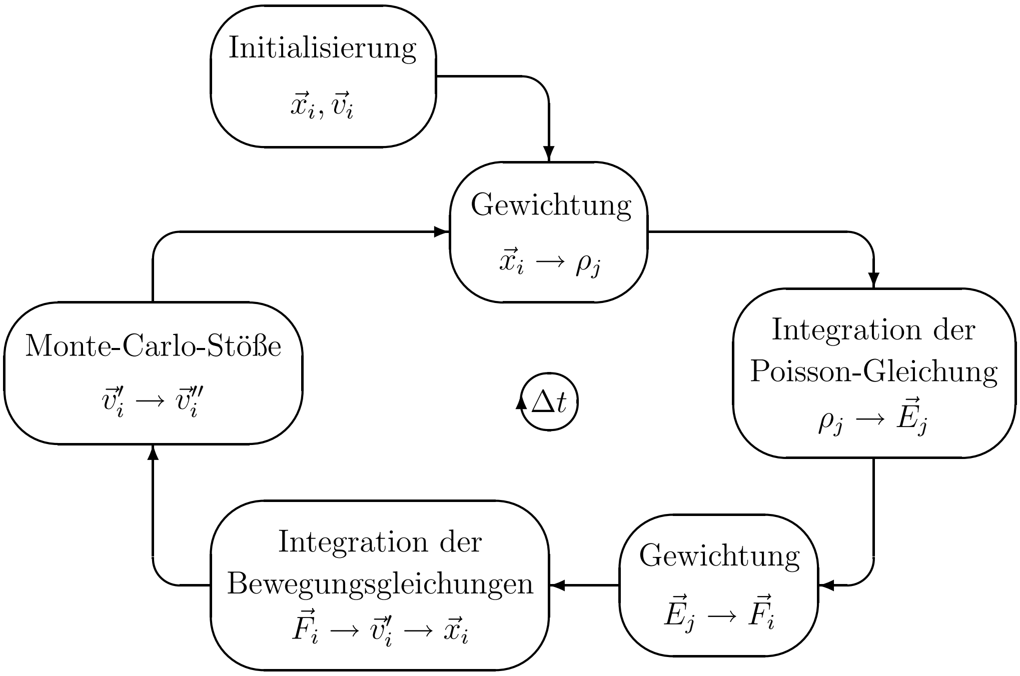

Abbildung A.6: Schematische Darstellung des PIC/MC-Algorithmus: Zu Beginn wird das Simulationsvolumen während der Initialisierung mit Simulationsteilchen gefüllt, deren Positionen $\vec{x}_i$ und Geschwindigkeiten $\vec{v}_i$ vorgegebenen Verteilungen genügen. Danach beginnt der eigentliche Zyklus, der während jedes Zeitschritts Δt von neuem durchlaufen wird: Dieser setzt sich zusammen aus der Gewichtung der Raumladungen der Simulationsteilchen auf die Gitterpunkte ($\vec{x}_i \to \rho_j$) und der anschließenden Lösung der diskretisierten Poisson-Gleichung auf dem Gitter ($\rho_j \to \vec{E}_j$). Mit Hilfe des elektrischen Feldes an den Gitterpunkten werden die elektrischen Kräfte berechnet, die auf die Simulationsteilchen wirken ($\vec{E}_j \to \vec{F}_i$). Anschließend werden die Teilchen durch Integration der Bewegungsgleichungen auf ihre neuen Geschwindigkeiten beschleunigt und dann im Raum bewegt ($\vec{F}_i \to \vec{v}_i' \to \vec{x}_i$). Schließlich führen einige Teilchen noch Monte-Carlo-Stöße mit neutralen Atomen des Hintergrundgases aus, wobei sich ihre Geschwindigkeiten noch einmal ändern ($\vec{v}_i' \to \vec{v}_i''$).

Anhang B

Randbedingungen bei eindimensionalen planaren PIC/MC-Simulationen

B.1 Einleitung

Zur Untersuchung der Schicht- und Vorschichtdynamik bei der PIII mittels PIC/MC ist es erforderlich, eine Plasmarandschicht zu modellieren. Eine Möglichkeit hierzu besteht darin, eine gesamte Plasmaquelle zu simulieren und an der Randschicht des in dieser Quelle erzeugten Plasmas die Untersuchungen zur Dynamik durchzuführen. Solche Simulationen wurden bereits erfolgreich durchgeführt [Krimke, 1996] und zeigen in der Tat realistische Verläufe der Dichte- und Potentialverteilungen im Plasmabulk und in der Randschicht. Ein Nachteil dieser Vorgehensweise liegt jedoch darin, daß das gesamte Plasma simuliert werden muß, obwohl sich das eigentliche Interesse bei der PIII auf die randnahen Bereiche beschränkt. Das führt in günstigen Fällen (bei eindimensionalen Problemen) dazu, daß die Simulationen länger dauern, als bei einer Beschränkung auf den Randbereich. In ungünstigen Fällen (mehrdimensionale Probleme) kann der hohe Rechenaufwand jedoch dazu führen, daß diese Probleme gar nicht mehr behandelt werden können. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit eine alternative Vorgehensweise entwickelt, die es aufgrund geeigneter Randbedingungen erlaubt, ausschließlich die randnahen Schichten zu simulieren. Dieses Verfahren soll im folgenden vorgestellt werden.

B.2 Randbedingungen bei statischen Randschichten

In diesem Abschnitt wird ein Verfahren erläutert, das es ermöglicht, anstelle einer gesamten Plasmaquelle nur einen Ausschnitt der Quelle nahe einer Wand zu simulieren, um eine statische Plasmarandschicht zu erzeugen. Abbildung B.1 skizziert den typischen Potentialverlauf in einem Plasma nahe einer Wand, die sich bei $x = 0$ befindet. Das Potential fällt vom Plasmabulk bei $x \approx x_\mathrm{b}$ zur Wand stetig ab, wo es den Wert des Floating-Potentials Φ_float erreicht. Die Vorschicht liegt im Bereich $x_\mathrm{s} \leq x \leq x_\mathrm{b}$, die eigentliche Schicht zwischen $0 \leq x \leq x_\mathrm{s}$.

Obwohl es für die Ausbildung einer Vorschicht in einem planaren Plasma notwendig ist, daß die Ionen durch Stöße gebremst werden oder der Strom der Ionen in Richtung der Wand durch Ionisationsprozesse zunimmt [Riemann, 1991], wird in der folgenden Betrachtung zunächst einmal angenommen, daß das Plasma hinreichend dünn ist, sodaß keine nennenswerte Zahl von Stößen passiert. Aus der dann geltenden Energieerhaltung der Ionen beim Durchlaufen des Potentialgefälles zwischen Plasmainnerem und der Wand läßt sich die Ionengeschwindigkeit und die Ionendichte an jedem Ort in Abhängigkeit vom Plasmapotential bestimmen. Auf den Einfluß der Stöße wird dann im Anschluß an diese Betrachtung eingegangen.

Zunächst nimmt man eine beliebige Stelle L innerhalb der Vorschicht ($x_\mathrm{s} \leq L < x_\mathrm{b}$) und bezeichnet die Plasmadichte an dieser Stelle mit n_p. Das elektrische Potential dort habe den Wert $\Phi_\mathrm{presheath}$. Die Ionen erreichen an dieser Stelle den Bruchteil α ($0 < \alpha \leq 1$) der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}}$ (T_e: Elektronentemperatur). Der Ionenstrom an der Stelle L beträgt deshalb

$$j_\mathrm{i}(L) = e n_\mathrm{i}(L) v_\mathrm{i}(L) = e n_\mathrm{p} \alpha v_\mathrm{B}. \tag{B.1}$$

Innerhalb der Vorschicht ist das Plasma quasineutral. Daher ist die Elektronendichte an der Stelle L gleich der Ionendichte n_p und der thermische Flächenstrom der Elektronen

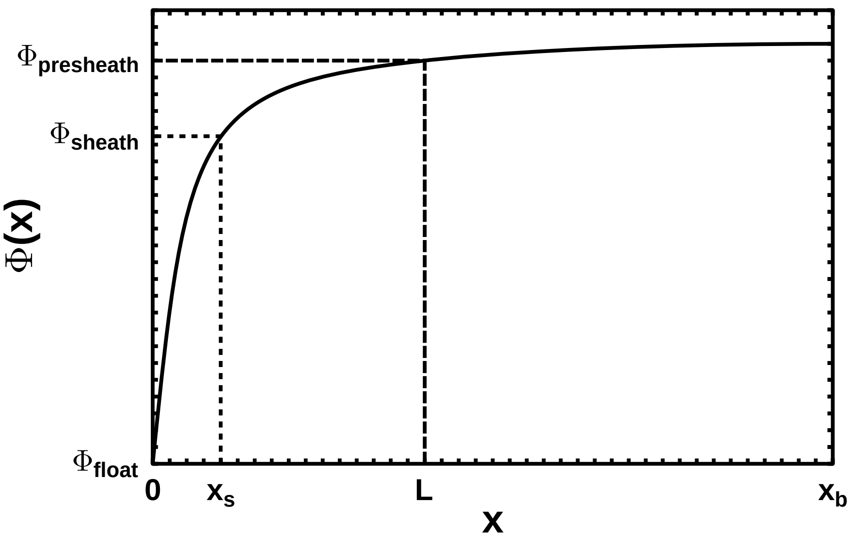

Abbildung B.1: Verlauf des Potentials Φ in einem Plasma nahe einer Wand bei $x = 0$ in Abhängigkeit vom Abstand x zur Wand.

mit der Temperatur T_e in Richtung der Wand beträgt dort

$$j_\mathrm{e}(L) = \frac{1}{4} e n_\mathrm{p} \cdot \sqrt{\frac{8 k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e} \pi}}. \tag{B.2}$$

Nimmt das elektrische Potential im weiteren Verlauf von Schicht und Vorschicht nun um $\Delta\Phi = \Phi_\mathrm{presheath} - \Phi_\mathrm{float}$ bis zur Wand ab, so reduziert sich die Wandstromdichte der Elektronen gegenüber der Stromdichte aus Gleichung (B.2) um den Boltzmann-Faktor $\exp(-e\Delta\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e})$, da die Elektronen gegen ein Gegenfeld anlaufen müssen. Damit beträgt die Wandstromdichte der Elektronen

$$j_\mathrm{e} = j_\mathrm{e}(L) \cdot e^{-\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}} = \frac{1}{4} e n_\mathrm{p} \cdot \sqrt{\frac{8 k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e} \pi}} \cdot e^{-\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}. \tag{B.3}$$

Die Wandstromdichte der Ionen wird dagegen im vorliegenden Fall eines planaren Plasmas denselben Wert annehmen wie an der Stelle L:

$$j_\mathrm{i} = j_\mathrm{i}(L) = e n_\mathrm{p} \alpha v_\mathrm{B} \tag{B.4}$$

In einem stationären Plasma sind die Wandstromdichten der Ionen und der Elektronen nun gleich, woraus sich dann eine Beziehung zwischen α und $\Delta\Phi$ ergibt:

$$\begin{aligned}
j_\mathrm{i} &= j_\mathrm{e} \\
e n_\mathrm{p} \alpha v_\mathrm{B} &= \frac{1}{4} e n_\mathrm{p} \cdot \sqrt{\frac{8 k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e} \pi}} \cdot e^{-\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}} \quad \text{mit} \quad v_\mathrm{B} = \sqrt{\frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{i}}} \\
\alpha &= \sqrt{\frac{m_\mathrm{i}}{2\pi m_\mathrm{e}}} \cdot e^{-\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}.
\end{aligned} \tag{B.5}$$

Nach dem Bohmkriterium fällt das Potential zwischen dem Plasmabulk und der Schichtkante innerhalb der Vorschicht um $\frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{2e}$ ab. Da das Potential an der Stelle L, die sich irgendwo innerhalb der Vorschicht befindet, $\Phi_\mathrm{presheath}$ beträgt, liegt die Potentialdifferenz $\Phi_\mathrm{presheath} - \Phi_\mathrm{sheath}$ irgendwo im Bereich

$$0 < \Phi_\mathrm{presheath} - \Phi_\mathrm{sheath} \leq \frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{2e} \tag{B.6}$$

Es ist nun bekannt, daß der Potentialabfall in einer stoßfreien Schicht

$$\Phi_\mathrm{sheath} - \Phi_\mathrm{float} = \frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{2e} \ln \frac{m_\mathrm{i}}{2\pi m_\mathrm{e}} \tag{B.7}$$

beträgt [Chapman, 1980]. Damit und mit der Beziehung (B.6) ergibt sich schließlich für den gültigen Bereich von $\Delta\Phi = \Phi_\mathrm{presheath} - \Phi_\mathrm{float}$:

$$\frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{2e} \ln \frac{m_\mathrm{i}}{2\pi m_\mathrm{e}} \leq \Delta\Phi < \frac{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}{2e} \left(1 + \ln \frac{m_\mathrm{i}}{2\pi m_\mathrm{e}}\right) \tag{B.8}$$

Es können nun fast alle Parameter zu Durchführung einer Randschichtsimulation festgelegt werden:

1. Aus der Elektronentemperatur T_e, der Masse eines Elektrons m_e und der eines Ions m_i berechnet man nach Ungleichung (B.8) die Grenzen des Bereichs, aus dem die Potentialdifferenz $\Delta\Phi$ zwischen der Wand und der Stelle L der Vorschicht gewählt werden darf. Für ein Ar-Plasma mit einer Elektronentemperatur von $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ gilt beispielsweise $37.43\,\mathrm{V} \leq \Delta\Phi < 41.43\,\mathrm{V}$.

2. Dann berechnet man nach der Beziehung (B.5) den Faktor α und findet zusammen mit der Bohmgeschwindigkeit $v_\mathrm{B} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/m_\mathrm{i}}$ die Geschwindigkeit der Ionen $v_\mathrm{i}(L) = \alpha v_\mathrm{B}$ an der Stelle L. Für das Ar-Plasma im Beispiel mit $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$ und $v_\mathrm{B} = 4400\,\mathrm{m/s}$ findet man $0.60 < \alpha \leq 1$, entsprechend $2640\,\mathrm{m/s} < v_\mathrm{i}(L) \leq 4400\,\mathrm{m/s}$.

3. Schließlich gibt man noch die Plasmadichte n_p an der Stelle L vor. Dadurch läßt sich dort die Stromdichte der Ionen j_i und der Elektronen j_e in Richtung auf die Wand unter Verwendung der Beziehungen (B.1) und (B.2) bestimmen.

Für die Randschichtsimulation wählt man nun einen Simulationsbereich der Länge L und legt zwischen der Wand bei $x = 0$ und der Stelle $x = L$ eine Potentialdifferenz von $\Delta\Phi = \Phi(L) - \Phi(0)$ an. Auf der Plasmaseite bei L werden dann die aus dem Plasmainneren kommenden Ionen und Elektronen mit den berechneten Stromdichten eingekoppelt. Leider sagt das bisher beschriebene Verfahren noch nichts über die zu verwendende Länge L aus. Der Potentialunterschied $\Delta\Phi$ sowie die damit verbundene Ionengeschwindigkeit $v_\mathrm{i}(L)$ gehören natürlich zu einem bestimmten Wert L. Um diesen Wert zu bestimmen, kann folgendes Kriterium verwendet werden: In einem stationären Plasma müssen sich die Wandströme der Ionen und der Elektronen kompensieren. Man kann nun für verschiedene Werte von L Randschichtsimulationen durchführen und die Wandströme der beiden Spezies jeweils messen.

Man wird erwarten, daß sich in der Simulation eine Elektronen- und Ionendichteverteiltung einstellt, die bei L mit dem vorgegebenen Wert n_p beginnt und innerhalb der Vorschicht langsam monoton abnimmt. Wegen der Quasineutraliät sollten die Ionen und Elektronen dort jedoch noch die gleich Dichte haben. Entsprechend sollte das Potential bei L mit dem Wert 0 beginnen und innerhalb der Vorschicht monoton auf den Wert $-k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}/2e$ an der Schichtkante abnehmen. In der eigentlichen Schicht sollte schließlich die Elektronendichte stärker als die Ionendichte absinken und das Potential schnell auf den Wert $-\Delta\Phi$ an der Wand abnehmen.

Mit den oben genannten Randbedingungen, die streng nur für ein stoßfreies Plasma gelten, wurden Simulationen für ein stoßbehaftetes Ar-Plasma mit den folgenden Parametern durchgeführt: Die Elektronentemperatur betrug $k_B T_e = 8\,\text{eV}$, entsprechend einer Bohmgeschwindigkeit $v_B = 4400\,\text{m/s}$. Für $\Delta\Phi$ wurde der Wert 40.285 V verwendet, was $\alpha = 0.7$ entspricht. Die Plasmadichte wurde mit $n_p = 2.0 \cdot 10^{16}\,\text{m}^{-3}$ vorgegeben. Die eingekoppelten Teilchenströme betrugen daher $j_e = 1516\,\text{A/m}^2$ und $j_i = 9.86\,\text{A/m}^2$. Die Ionen konnten sowohl Ladungsaustauschstöße mit einem Stoßquerschnitt von etwa $36\,\text{Å}^2$ bei $v_B = 4400\,\text{m/s}$ und elastische Stöße mit einem Querschnitt von $40\,\text{Å}^2$ bei der Bohmgeschwindigkeit v_B durchführen [Cramer, 1959]. Beim Eintritt in das Simulationsvolumen hatten die Ionen eine thermische Geschwindigkeitsverteilung mit einer Temperatur von $T_i = 300\,\text{K}$ um ihre Schwerpunktsgeschwindigkeit $\alpha v_B = 3080\,\text{m/s}$. Das Potential betrug links an der Wand $\Phi(0) = -40.285\,\text{V}$ und rechts $\Phi(L) = 0\,\text{V}$. Die Simulation wurde zunächst für verschiedene Längen L wiederholt, um die Länge zu finden, bei der sich die Wandströme der Ionen und Elektronen gerade kompensieren. Abbildung B.2 zeigt die simulierten Wandströme der Ionen und Elektronen in Abhängigkeit von der Länge L des Simulationsgebietes. Bei der Länge $L = 0.9\,\text{cm}$ haben Ionen und Elektronen dieselben Wandströme und daher ist dies die geeignete Länge zur Durchführung einer Plasmarandschichtsimulation. Abbildung B.3 zeigt nun die Ergebnisse einer Simulation, die mit diesem Wert $L = 0.9\,\text{cm}$ durchgeführt wurden. Wie man in Abbildung B.3 a) sieht, weisen die gemessenen Dichteverteilungen große Abweichungen von den erwarteten Verteilungen auf. Merkwürdig ist der starke Dichteanstieg nahe der rechten Berandung von dem vorgegebenen Wert $n_p = 2.0 \cdot 10^{16}\,\text{m}^{-3}$ auf über $4.0 \cdot 10^{16}\,\text{m}^{-3}$ und der anschließend starke Abfall auf beinahe $1.0 \cdot 10^{16}\,\text{m}^{-3}$, während dessen die Elektronendichte sogar in einem klei-

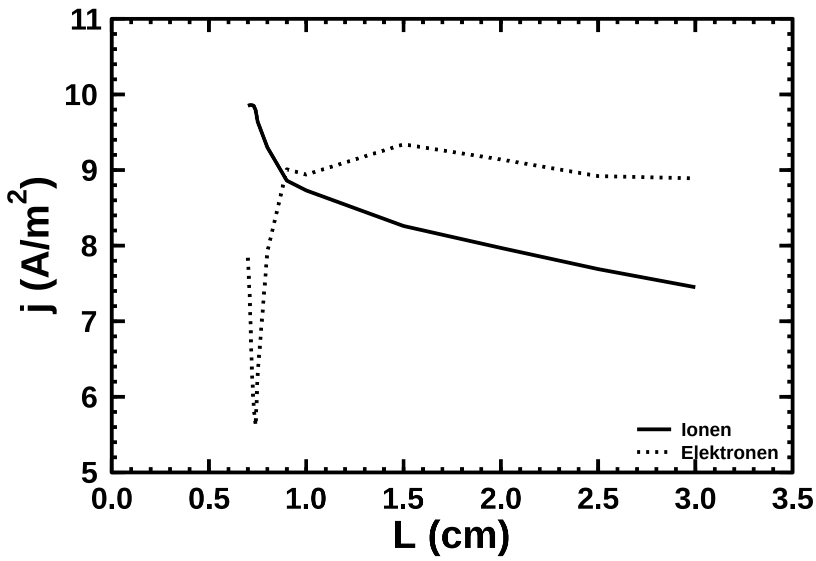

Abbildung B.2: Simulierte Wandströme der Ionen und Elektronen in Abhängigkeit von der Länge L des Simulationsgebietes bei Verwendung der Randbedingungen eines stoßfreien Plasmas. Bei $L = 0.9\,\text{cm}$ kompensieren sich die Wandströme der Ionen und Elektronen gerade.

nen Bereich die Ionendichte übertrifft. In der simulierten Potentialverteilung (Abbildung B.3 b)) fällt auf, daß das Potential bei L zunächst auf etwa 2 V ansteigt und anschließend auf beinahe -4 V abfällt, bevor es seinen Verlauf plasmatypisch vorsetzt.

Die Klärung dieses Verhaltens liegt in dem Einfluß der Stöße, den die Ionen mit den neutralen Atomen machen. Die Ionen können sowohl Ladungsaustauschstöße als auch elastische Stöße durchführen. Im ersten Fall nimmt ein schnelles Ion von einem thermischen Atom ein Elektron auf, wonach ein thermisches Ion zurückbleibt. Im zweiten Fall werden die Ionen isotrop gestreut und verlieren zusätzlich noch einen Teil ihrer kinetischen Energie. Dadurch wird ihre gerichtete Bewegung zerstört. Beide Stöße führen letztend-

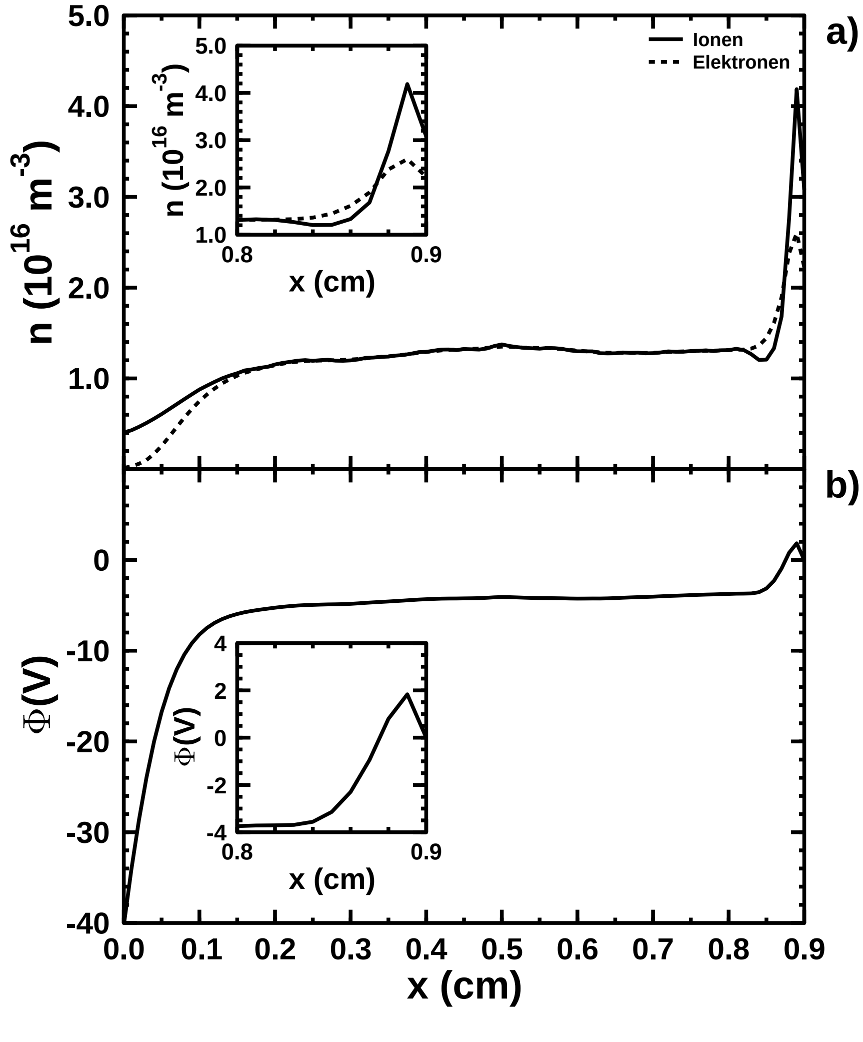

Abbildung B.3: Ergebnisse der Randschichtsimulation eines Ar-Plasmas mit den Parametern $k_B T_e = 8\,\text{eV}$, $T_i = 300\,\text{K}$, $\Delta\Phi = 40.285\,\text{V}$, $L = 0.9\,\text{cm}$ und $n_p = 2.0 \cdot 10^{16}\,\text{m}^{-3}$ unter Verwendung der Randbedingungen eines stoßfreien Plasmas: a) Dichteverteilungen, b) Potentialverteilung.

lich dazu, daß die Ionen länger in der Schicht- und Vorschicht verweilen und damit die Ionendichte anwächst. Nimmt man für einen kurzen Moment einmal an, daß die Ionen und die Elektronen nicht über die Coulomb-Kräfte miteinander wechselwirkten, dann würde sich die stoßbedingte Zunahme der Ionendichte wie folgt auswirken: Die Ionendichte wächst in etwa so an, als würde deren vorgegebene Dichte bei L um $\Delta n_\mathrm{p} > 0$ von n_p auf ${n_\mathrm{p}}^\mathrm{eff} = n_\mathrm{p} + \Delta n_\mathrm{p}$ erhöht werden, während die Elektronen weiterhin mit der Dichte n_p eingespeist werden. Da die beiden Spezies jedoch über die Coulomb-Kräfte miteinander wechselwirken, versucht das System die, aus der Sicht der Elektronen, überschüssigen Ionen zu entfernen, um einen möglichst großräumigen quasineutralen Bereich zu erzeugen. Dazu wächst das Potential nahe L auf etwa 2 V und schafft somit für die Ionen eine Barriere, an der ein Teil von ihnen reflektiert wird und sofort wieder aus dem Simulationsgebiet verschwindet. Man erkennt dies auch an der Abnahme des Ionenwandstromes von dem vorgegebenen Wert $j_\mathrm{i} = 9.86\,\mathrm{A/m^2}$ auf unter $9\,\mathrm{A/m^2}$ (siehe Abbildung B.2). Anschließend nimmt das Potential auf fast -4 V ab, wodurch die restlichen Ionen, die die Barriere überwinden konnten, beschleunigt werden und dadurch deren Dichte abnimmt. Die dadurch entstehende Doppelschicht [Hershkowitz, 1994] ermöglicht es den Elektronen letztendlich, die positive Raumladung der Ionen auszugleichen. Die Reflektion der Ionen an der Barriere führt auch zu dem starken Dichtezuwachs auf der rechten Seite in Abbildung B.3 a). Die Doppelschicht ist also eine Folge der Anwendung stoßfreier Randbedingungen auf ein stoßbehaftetes Plasma ist und tritt in der Realität nicht auf. Es sei darauf hingewiesen, daß auch bei der fluiddynamischen Untersuchung stoßbehafteter Schichten mit ähnlichen Randbedingungen schon von solchen Übergangsschichten berichtet wurde [Sheridan und Goree, 1991].

Will man eine Plasmarandschicht erzeugen, die besser zu der vorgegebenen Plasmadichte von $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m^{-3}}$ paßt, so ist es erforderlich, den stoßbedingten Überschuß an Ionen zu kompensieren. Also muß man an der Stelle L mehr Elektronen einkoppeln, als es der vorgegebenen Dichte n_p entspricht. Dazu dient folgende Überlegung: Durch den Dichteüberschuß der Ionen reagiert das System mit dem Aufbau der Doppelschicht an der rechten Berandung und dem damit verbundenen starken elektrischen Feld, das der Abbremsung und Beschleunigung der Ionen dient. Wenn man erreichen kann, daß dieses Feld möglichst klein ist oder sogar verschwindet, dann sollte dieser Zustand gleichbedeutend sein mit einer ausgeglichenen Ionen- und Elektronendichte. Die Untersuchung des PIC-Algorithmus für eindimensionale, berandete Plasmen [Lawson, 1989; Verboncoeur *et al.*, 1990] liefert nun für das elektrische Feld unmittelbar am rechten Rand den Ausdruck

$$E_N = \frac{\Phi_{N-1} - \Phi_N}{\Delta x} + \frac{\Delta x \cdot e}{2\epsilon_0} \cdot ({n_\mathrm{i}}^N - {n_\mathrm{e}}^N). \tag{B.9}$$

Darin hat Φ_i die Bedeutung des elektrischen Potentials in der Zelle i, Δx stellt die Breite einer Zelle dar, und ${n_\mathrm{i}}^N$ sowie ${n_\mathrm{e}}^N$ bezeichnen die Dichten der Ionen und der Elektronen in der äußersten rechten Zelle N. Fordert man nun, daß das elektrische Feld E_N verschwindet, so folgt aus Gleichung (B.9) die Beziehung

$$ {n_\mathrm{e}}^N = {n_\mathrm{i}}^N + \frac{2\epsilon_0}{(\Delta x)^2 \cdot e} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N). \tag{B.10}$$

Daraus erkennt man, daß sich die Elektronendichte ${n_\mathrm{e}}^N$ von der Ionendichte ${n_\mathrm{i}}^N$ in der Zelle N um den Betrag

$$\Delta n_\mathrm{e} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{2\epsilon_0}{(\Delta x)^2 \cdot e} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N) \tag{B.11}$$

unterscheiden muß, wenn augenblicklich ein Potentialunterschied $\Phi_{N-1} - \Phi_N$ zwischen der vorletzten Zelle $N-1$ und der letzten Zelle N existiert, damit das elektrische Feld rechts verschwindet. Das hat zur Folge, daß zum stationären Elektronenstrom (vgl. Gleichung (B.2))

$$j_\mathrm{e} = \frac{1}{4} e n_\mathrm{p} \cdot \sqrt{\frac{8k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}\pi}} \tag{B.12}$$

in jedem Zeitschritt zusätzlich der Elektronen-Korrekturstrom

$$\begin{aligned} \Delta j_\mathrm{e} &\stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{4} e \Delta n_\mathrm{e} \cdot \sqrt{\frac{8k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}\pi}} \\ &= \sqrt{\frac{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{m_\mathrm{e}\pi}} \cdot \frac{\epsilon_0}{(\Delta x)^2} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N) \end{aligned} \tag{B.13}$$

eingekoppelt werden muß, um in der letzten Zelle N diesen Ladungsträgerunterschied zwischen Ionen und Elektronen herzustellen. Je nachdem, ob die Potentialdifferenz $\Phi_{N-1} - \Phi_N$ und damit der Elektronen-Korrekturstrom Δj_e positiv oder negativ ist, muß der stationäre Elektronenstrom j_e um diesen Strom erhöht oder erniedrigt werden. Im Beispiel der Simulation aus Abbildung B.3 war $\Phi_{N-1} - \Phi_N$ stets positiv und damit müßte nach Gleichung (B.13) der Elektronenstrom erhöht werden, um das Feld zum Verschwinden zu bringen. Die dadurch um Δn_e erhöht Elektronendichte würde gerade zu einem Ausgleich des stoßbedingten Ionenüberschusses führen.

Es muß erwartet werden, daß sich die optimale Länge L des Simulationsgebiets bei Verwendung des Elektronen-Korrekturstroms verändert, weil zu dem bisherigen Elektronenstrom noch der Strom Δj_e hinzukommt. Daher muß die Länge L bei Verwendung des Elektronen-Korrekturstroms neu bestimmt werden. Abbildung B.4 zeigt für ein Plasma mit den gleichen Parametern wie oben die gemessenen Wandströme der Ionen und Elektronen in Abhängigkeit von der Länge L des Simulationsgebiets, wenn der Elektronen-Korrekturstrom verwendet wird. Man erkennt, daß der Elektronenwandstrom mit zunehmendem L ansteigt und bei $L \approx 2.5\,\mathrm{cm}$ denselben Wert erreicht wie der Ionenwandstrom, der nahezu konstant bleibt. Damit stellt $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ die passende Länge zur Durchführung einer Randschichtsimulation mit den genannten Parametern dar.

Abbildung B.5 zeigt die Resultate einer Randschichtsimulation mit $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ unter Verwendung des Elektronen-Korrekturstroms. Das System zeigt zwar nahe der rechten Berandung immer noch einen Peak in den Teilchendichten (Abbildung B.5 a)), das Dichtemaximum ist jedoch deutlich reduziert und beträgt nunmehr nur noch etwas über $3.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$. Der ansonsten beobachtete Zuwachs der Dichten, der für $x \geq 1.3\,\mathrm{cm}$ sogar zu Dichten über dem vorgegebenen Wert $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ führt, zeigt den Einfluß

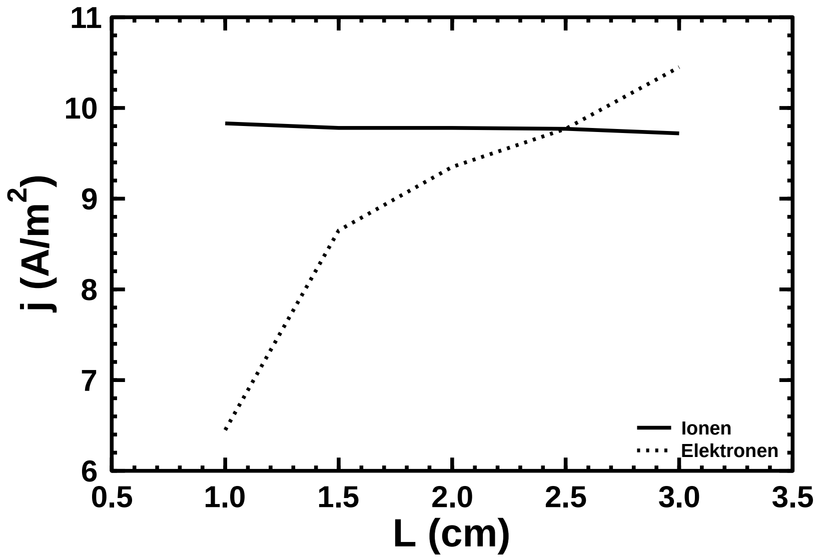

Abbildung B.4: Simulierte Wandströme der Ionen und Elektronen in Abhängigkeit von der Länge L des Simulationsgebietes bei Verwendung des Elektronen-Korrekturstroms. Bei $L = 2.5\,\mathrm{cm}$ kompensieren sich die Wandströme der Ionen und Elektronen gerade.

der Ionenstöße auf die Dichteverteilung. Insgesamt wird die Dichtestruktur in der Doppelschicht gegenüber der Simulation aus Abbildung B.3 um einen Faktor 3 verringert. Das Potential zeigt ebenfalls einen den Erwartungen entsprechenden Verlauf (Abbildung B.5 b)), sieht man von den kleinen Oszillationen am rechten Rand einmal ab. In weiten Teilen der Vorschicht hat das Potential einen Wert nahe Null und sinkt nicht schon, wie zuvor, an der rechten Berandung auf $-4\,\mathrm{V}$ ab. Auch hier zeigt sich eine Abnahme der Doppelschichtstruktur um eine Faktor 3 gegebenüber der vorherigen Simulation. Die zwischen $2.3\,\mathrm{cm} \leq x \leq 2.5\,\mathrm{cm}$ beobachteten Schwankungen in den Dichten und im Potential haben ihren Ursprung darin, daß es dort zu einer Transformation von der vorgegebenen Geschwindigkeitsverteilung stoßfreier Ionen zu einer Verteilung kommt, die typisch ist für Ionen, die Stöße mit den Neutralteilchen durchführen können: Neben der vorgegebenen thermischen Verteilung um die Schwerpunktsgeschwindigkeit αv_{B} in x-Richtung treten auch niedrigere Geschwindigkeiten mit nahezu konstanter Häufigkeit auf. Dies sind die Geschwindigkeiten der gestreuten oder durch Ladungsaustausch entstehenden thermischen Ionen, die unter dem Einfluß des elektrischen Feldes bereits wieder teilweise beschleunigt wurden.

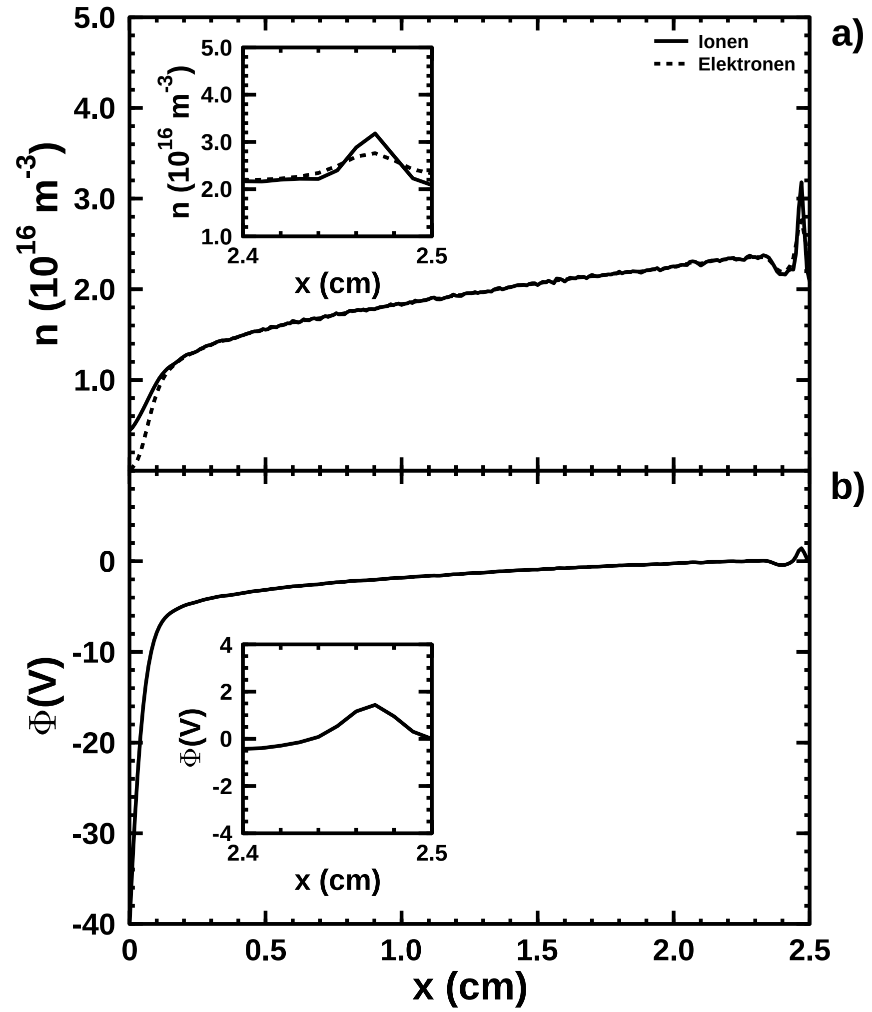

Abbildung B.5: Ergebnisse der Randschichtsimulation eines Ar-Plasmas mit den Parametern $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e} = 8\,\mathrm{eV}$, $T_\mathrm{i} = 300\,\mathrm{K}$, $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$, $x_\mathrm{p} = 2.5\,\mathrm{cm}$ und $n_\mathrm{p} = 2.0 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ unter Verwendung des Elektronen-Korrekturstroms: a) Dichteverteilungen, b) Potentialverteilung.

B.3 Randbedingungen bei dynamischen Randschichten

Das im vorhergehenden Abschnitt beschriebene Verfahren eignet sich gut zur Erzeugung einer statischen Plasmarandschicht, bei der sich das System im Gleichgewicht befindet. Was passiert jedoch, wenn man an die linke Wand eine negative Hochspannung anlegt und damit das System für kurze Zeit aus dem Gleichgewichtszustand gerät? Zum Verständnis sind in Abbildung B.6 die Ionen- und Elektronendichten unmittelbar vor und zu zwei verschiedenen Zeiten nach Anlegen der negativen Hochspannung zum Zeitpunkt $t = 0$

qualitativ dargestellt. Abbildung B.6 a) zeigt die stationären Dichteverteilungen der Ionen und Elektronen zu einem Zeitpunkt $t < 0$ vor Anlegen der Hochspannung an die linke Wand. Bis auf den Bereich der Schicht direkt vor der Wand besitzen beide Teilchensorten die gleiche räumliche Dichte. Wird nun zum Zeitpunkt $t = 0$ an die linke Wand die negative Hochspannung angelegt, so werden die Elektronen unter dem Einfluß des sehr starken elektrischen Feldes ins Plasmainnere zurückgedrängt und das gesamte Elektronengas zu Oszillationen mit der Elektronenplasmafrequenz $\omega_{\mathrm{p,e}} = \sqrt{n_{\mathrm{e}} e^2/\epsilon_0 m_{\mathrm{e}}}$ angeregt. Die Ionen dagegen reagieren aufgrund ihrer Masse m_{i}, die sehr viel größer als die Elektronenmasse m_{e} ist, erst auf einer Zeitskala, die um $\sqrt{m_{\mathrm{i}}/m_{\mathrm{e}}}$ größer ist als die Zeitskala der Elektronenreaktionszeit und können daher in guter Näherung zunächst als stationär betrachtet werden. Abbildung B.6 b) zeigt nun die Verhältnisse für eine Zeit $0 < t < \pi/\omega_{\mathrm{p,e}}$, also innerhalb der ersten Halbperiode der Elektronenschwingung. Wie zu sehen ist, gelangt ein großer Teil der Elektronen bei der Schwingung nach rechts jenseits die Berandung bei L und damit aus dem Simulationsbereich heraus. Dieser Teil des Elektronengases, der in der Darstellung grau schattiert ist, geht daher in der Simulation verloren. Wenn jetzt in der zweiten Periodenhälfte $\pi/\omega_{\mathrm{p,e}} < t < 2\pi/\omega_{\mathrm{p,e}}$ die Elektronen wieder nach links schwingen, entsteht unmittelbar vor der rechten Berandung bei L kurzzeitig eine Elektronenverarmungszone, weil die Teilchen außerhalb des Simulationsbereichs nicht wieder eingekoppelt werden. Dadurch kommt es zu einer Störung der Quasineutralität und es wird sich ein Potentialgefälle $\Phi_{N-1} - \Phi_N > 0$ zwischen der vorletzten und der letzten Zelle aufbauen. Auf diesen Potentialunterschied wird der Algorithmus nach Gleichung (B.13) jedoch mit einer Erhöhung des eingespeisten Elektronenstroms reagieren, sodaß der kurzzeitige Ionenüberschuß wieder aufgehoben wird. Damit funktioniert die PIC/MC-Methode, ergänzt um den Elektronen-Korrekturstrom, auch für dynamische Randschichten und stellt ein geeignetes Werkzeug zum Studium sowohl statischer als auch dynamischer Randschichten, wie sie beide in der PIII auftreten, dar.

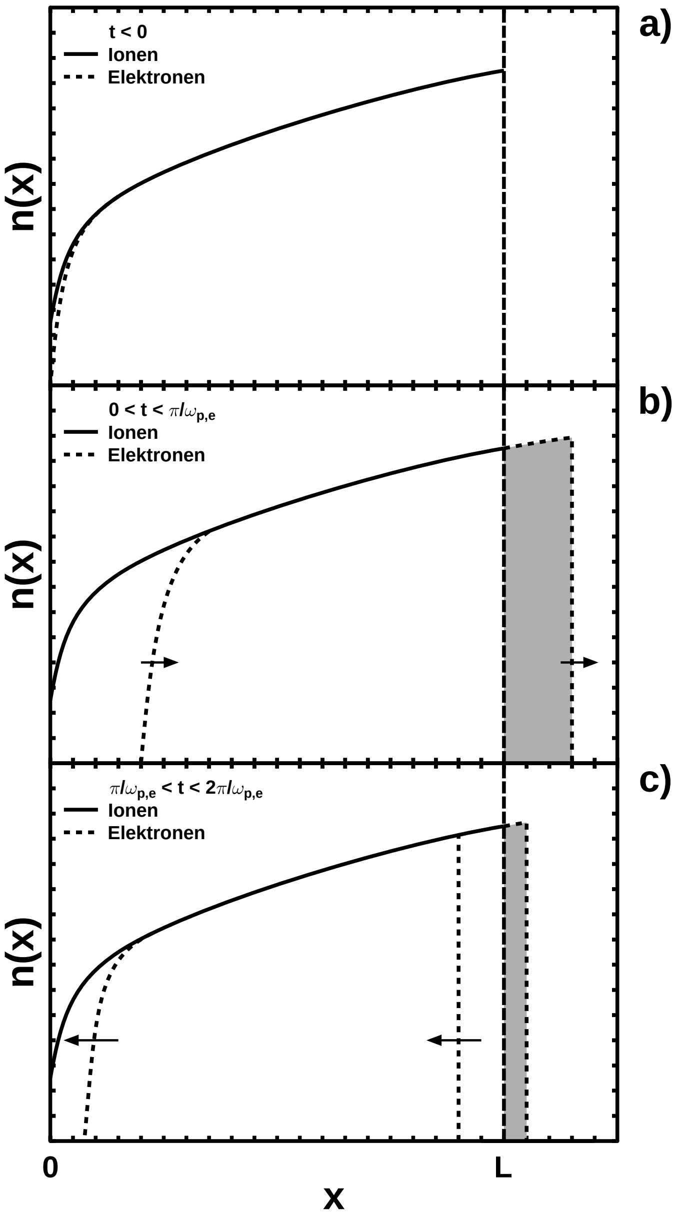

Abbildung B.6: Ionen- und Elektronendichte unmittelbar vor und zu zwei verschiedenen Zeiten nach Anlegen einer negativen Hochspannung bei $t = 0$ an die linke Wand (der Anteil der Elektronen, die außerhalb des Simulationsbereichs liegen, ist grau schattiert): a) $t < 0$, b) $0 < t < \pi/\omega_{\mathrm{p,e}}$, c) $\pi/\omega_{\mathrm{p,e}} < t < 2\pi/\omega_{\mathrm{p,e}}$.

Anhang C

Hybrides eindimensionales PIC/MC-Verfahren

C.1 Einleitung

Das Particle In Cell/Monte Carlo-Verfahren (PIC/MC) stellt eine Standardmethode zur Simulation von Plasmen dar [Hockney und Eastwood, 1994; Birdsall, 1991; Birdsall und Langdon, 1995], die schon in zahlreichen Untersuchungen verwendet wurde. Wie in Anhang A näher erläutert wird, basiert das Verfahren in einer Dimension in der Diskretisierung des Ortsraumes in Zellen der Breite Δx und einer Zerlegung der Zeit in Zeitschritte gleicher Länge Δt. Die Zellen werden anfänglich mit Simulationsteilchen belegt, die die Ionen und Elektronen des Plasmas darstellen. In jedem Zeitschritt werden die elektrischen Ladungen der Teilchen auf die Gitterpunkte zwischen den Zellen gewichtet und anschließend wird die Poisson-Gleichung auf dem Gitter gelöst. Daraus werden die Bewegungen der Teilchen unter dem Einfluß des elektrischen Feldes berechnet. Schließlich werden noch die Wechselwirkungen der geladenen Teilchen mit eventuell vorhandenen Neutralteilchen mittels eines Monte Carlo-Verfahrens berücksichtigt. Diese Schritte werden in jedem aufeinanderfolgenden Zeitschritt wiederholt, bis die gewünschte Zeitspanne simuliert wurde.

Der Vorteil des Verfahrens liegt in der teilchenbasierten Beschreibung des Plasmas, die es erlaubt, die Bewegung einzelner Teilchen zu untersuchen. Der Nachteil gegenüber fluidbasierten Verfahren liegt dagegen eindeutig in dem höheren Rechenaufwand. Dieser rührt in erster Linie daher, daß die Zeitschrittlänge Δt hinreichend klein gewählt werden muß, damit die schnellen Elektronen während eines Zeitschritts höchstens die Entfernung Δx zurücklegen können (numerische Stabilität) und damit die Oszillationen des Elektronengases zeitlich aufgelöst werden können. Zum anderen müssen auch dann die Trajektorien der Elektronen in jedem Zeitschritt berechnet werden, wenn das Interesse mehr den Ionen gilt. Im folgenden wird nun gezeigt, wie sich der Rechenaufwand stark reduzieren läßt, indem die Elektronen als ein Fluid beschrieben werden, während die Ionen nach wie vor teilchenbasiert dargestellt werden. Die Implementierung dieses Verfahrens war Teil der vorliegenden Arbeit.

C.2 Boltzmann-Dichteverteilung eines isothermen Elektronengases

Die Elektronendichte eines isothermen Elektronengases der Temperatur T_e in Abhängigkeit vom Plasmapotential Φ läßt sich durch eine Boltzmann-Verteilung

$$n_\mathrm{e}(\Phi) = {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \tag{C.1}$$

beschreiben [Chen, 1974; Chapman, 1980]. Darin hat ${n_\mathrm{e}}^0$ die Bedeutung der Elektronendichte an dem Ort, an dem das Plasmapotential Null ist und Φ stellt das elektrische Potential am betrachteten Ort dar. Man gelangt zu diesem Ausdruck, wenn man ein Elektron betrachtet, das sich in einem äußeren Potential Φ befinden, welches durch die umgebenden Ionen und Elektronen bestimmt wird. Die Hamilton-Funktion dieses Elektrons, das aus einem Elektronengas der Temperatur T_e stammen soll, lautet dann

$$H(\vec{p}, \vec{x}) = \frac{\vec{p}^2}{2m_\mathrm{e}} - e\Phi(\vec{x}), \tag{C.2}$$

wobei $\vec{p}$ den Impuls und $\vec{x}$ den Ort des Teilchens darstellt. Für die Phasenraumdichte $\rho(\vec{p}, \vec{x})$ des Elektrons läßt sich damit schreiben [Greiner *et al.*, 1993]:

$$\begin{aligned} \rho(\vec{p}, \vec{x})\, d^3p\, d^3x &\propto e^{-H(\vec{p},\vec{x})/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\, d^3p\, d^3x \\ &= e^{-\vec{p}^2/2m_\mathrm{e}k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \cdot e^{e\Phi(\vec{x})/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\, d^3p\, d^3x. \end{aligned} \tag{C.3}$$

Integriert man diese Beziehung über den Impulsraum, so findet man für die Ortsraumdichte $n_\mathrm{e}(\vec{x})$ des Elektrons

$$\begin{aligned} n_\mathrm{e}(\vec{x})\, d^3x &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \rho(\vec{p}, \vec{x})\, d^3p\right] d^3x \\ &\propto e^{e\Phi(\vec{x})/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\, d^3x. \end{aligned} \tag{C.4}$$

Drückt man darin die Abhängigkeit der Dichte vom Potential am Ort $\vec{x}$ des Elektrons nur durch die Abhängigkeit vom Potential selbst aus und bezeichnet man die Dichte an dem Ort, wo das Potential Null ist, als ${n_\mathrm{e}}^0$, dann erhält man schließlich die Beziehung (C.1).

Die Annahme, daß die Temperatur der Elektronen überall gleich ist, ist in den Randschichtsimulationen, wie sie im Verlauf dieser Arbeit durchgeführt wurden, gut erfüllt. Die Elektronen wurden nämlich stets in einer Entfernung L von der eigentlichen Wand mit einer vorgegebenen Temperatur T_e in die Vorschicht eingekoppelt und verließen das Simulationsvolumen nach der Reflektion an der Plasma-Wand-Potentialbarriere wieder in Richtung Plasmabulk. Dazwischen konnten die Elektronen zwar elastische Stöße mit den Ionen und den neutralen Atomen machen, wegen der großen freien Weglänge und wegen des großen Massenunterschieds wurde dabei aber nur wenig Energie auf die schwereren Teilchen übertragen. Aus diesem Grund kann sich die Temperatur der Elektronen auf ihrem Weg durch das Simulationsgebiet kaum verändern. Um das zu demonstrieren, ist in Abbildung C.1 zunächst der zeitliche Verlauf der mittleren Elektronentemperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ für den Fall der in Abschnitt 4.4 beschriebenen Simulation dargestellt. Dabei wurde das Wandpotential zum Zeitpunkt $t = 0$ vom Wert des Floatingpotentials von $-40.285\,\mathrm{V}$ auf die Hochspannung von $-1000\,\mathrm{V}$ umgeschaltet. In der Abbildung ist sehr schön zu erkennen, daß die Elektronen sowohl in der Floatingpotential-Randschicht ($t < 0$) als auch in der sich anschließend entwickelnden Hochspannungsrandschicht ($t > 0$) eine mittlere Energie von beinahe $8\,\mathrm{eV}$ haben. Durch das instantane Umschalten der Wandspannung auf $-1000\,\mathrm{V}$ werden die Elektronen in der Anfangsphase stark zu Elektronenschwingungen angeregt, während sich das Elektronengas insgesamt von der Wand zurückzieht. Dadurch steigt die Temperatur der Elektronen anfangs auf einen Mittelwert von umgerechnet $9.3\,\mathrm{eV}$ zum Zeitraum $t = 10-15\,\mathrm{ns}$ an, um anschließend auf der Zeitskala von etwa $150\,\mathrm{ns}$ wieder auf den Wert von etwas unter $8\,\mathrm{eV}$ zu relaxieren. Abbildung C.2 zeigt schließlich noch Momentaufnahmen der ortsaufgelösten Elektronentemperatur zu verschiedenen Zeiten innerhalb der ersten $100\,\mathrm{ns}$ nach Einschalten der Hochspannung. Darin ist gut zu sehen, daß

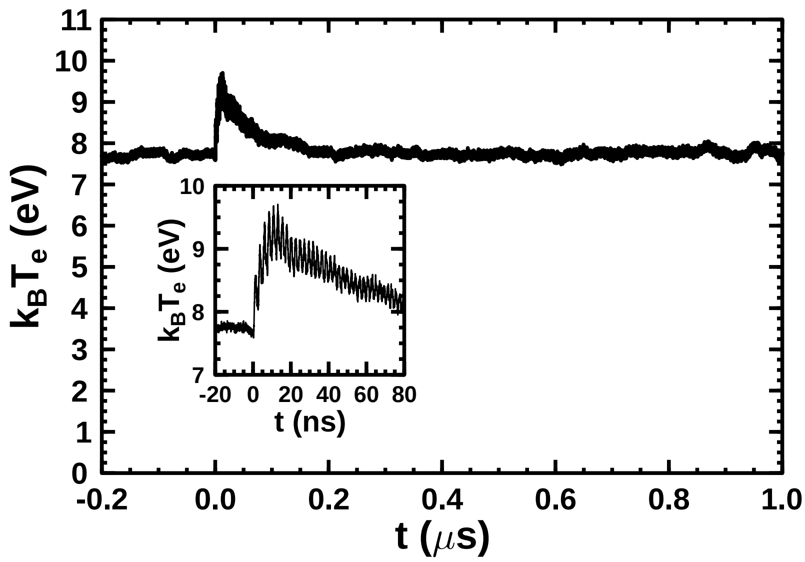

Abbildung C.1: Zeitlicher Verlauf der mittleren Elektronentemperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ für den Fall, daß das Wandpotential zum Zeitpunkt $t = 0$ vom Wert des Floatingpotentials von $-40.285\,\mathrm{V}$ auf $-1000\,\mathrm{V}$ umgeschaltet wird. Das kleine Diagramm zeigt einen Ausschnitt höherer zeitlicher Auflösung um den Zeitpunkt $t = 0$ herum.

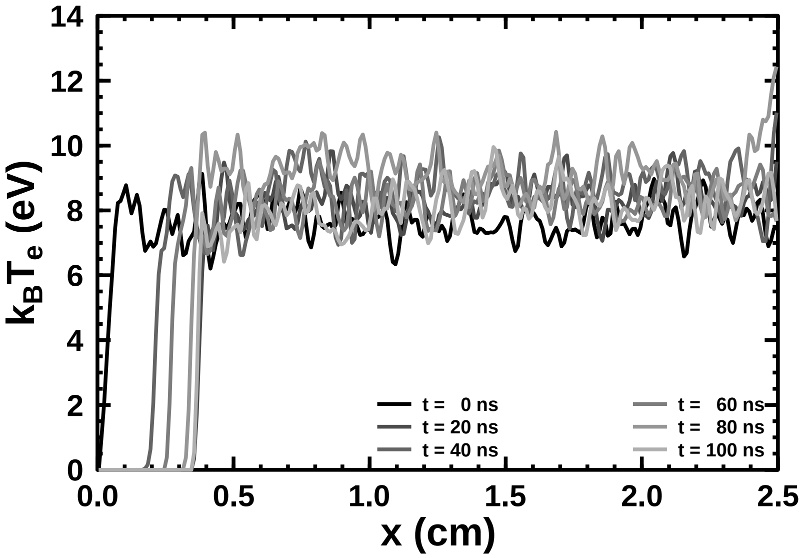

Abbildung C.2: Ortsaufgelöste Darstellung der Elektronentemperatur $k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}$ zu verschiedenen Zeiten innerhalb der ersten 100 ns nach Einschalten der Wandspannung von -1000 V.

die Temperatur der Elektronen überall im Bereich des Elektronengases im Mittel nahezu konstant ist. Die starken Oszillationen stellen lediglich das Rauschen der Temperatur dar.

Aus diesen Ausführungen folgt, daß die Dichte der Elektronen in guter Näherung der Boltzmann-Verteilung nach Gleichung (C.1) genügen sollte. Abbildung C.3 zeigt nun einen Vergleich zwischen der PIC/MC-simulierten Elektronendichte in der Floatingpotential-Randschicht aus Kapitel 2 und der Boltzmann-Dichteverteilung aufgrund des Potentialverlaufs in der Randschicht. Für die Elektronendichte ${n_\mathrm{e}}^0$ wurde dabei die simulierte Dichte von $2.3 \cdot 10^{16}\,\mathrm{m}^{-3}$ verwendet, die sich an der rechten Seite, wo das elektrische Potential Null ist, aufgrund der automatischen Anpassung des Elektronenstroms eingestellt hat (Anhang B). Wie man in Abbildung C.3 a) sieht, deckt sich die simulierte Dichteverteilung der Elektronen mit den Vorhersagen der Boltzmann-Gleichung nahezu perfekt und rechtfertigt daher deren Verwendung zur Beschreibung der Elektronen als ein Boltzmann-artiges Fluid.

C.3 Hybride Poisson-Gleichung

Die gute Übereinstimmung zwischen der simulierten Elektronendichte und der Boltzmann-Dichteverteilung erlaubt es nun, die bisherige teilchenbasierte Darstellung der Elektronen durch eine fluide Beschreibung zu ersetzen, während die Ionen nach wie vor als Partikel behandelt werden. Auf diese Weise läßt sich zum einen die Zahl der zu simulierenden Teilchen halbieren, zum anderen wird es aber auch möglich, die Länge der Zeitschritte Δt

in der Simulation deutlich zu vergrößern. Diese müssen jetzt nur noch klein genug sein, um die viel langsameren Ionenplasmaschwingungen auflösen zu können ($\Delta t < 2\pi/\omega_{\mathrm{p,i}}$) und um zu verhindern, daß ein Ion während eines Zeitschritts mehr als eine Zellen durchfliegen kann ($\Delta t < \Delta x/v_{\mathrm{i,max}}$). Diese Maßnahmen wirken stark beschleunigend auf die Programmausführung. Bei der Simulation der Randschicht eines Plasmas mit einer Elektronentemperatur von $k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}} = 8\,\mathrm{eV}$, einem Plasma-Wand-Potentialunterschied von $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ und einer Zellenbreite von $\Delta x = 0.1\,\mathrm{mm}$ wird damit eine Vergrößerung der Zeitschrittlänge um mehr als zwei Größenordnungen möglich. Das resuliert aus der Tatsache, daß die Ionen mit $v_{\mathrm{i,max}} = (2e\Phi/m_{\mathrm{i}})^{1/2} = 14\,\mathrm{km/s}$ eine deutlich niedrigere Maxi-

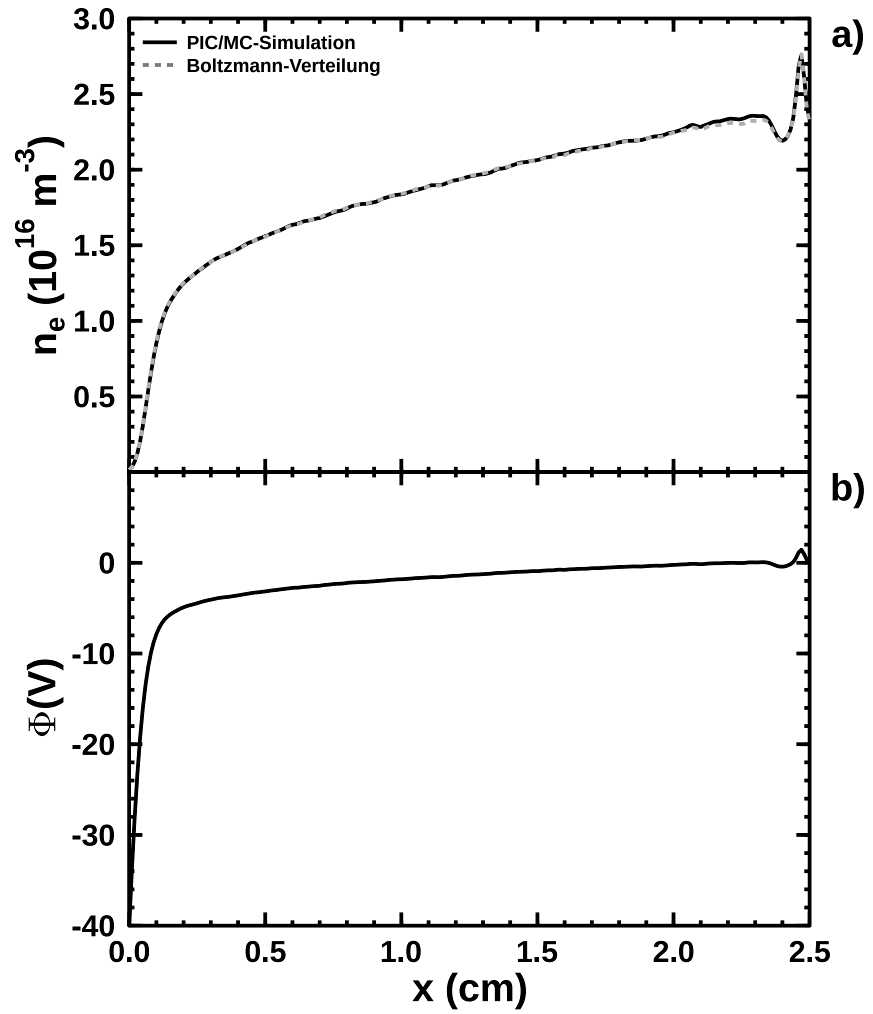

Abbildung C.3: Vergleich zwischen a) der simulierten Elektronendichte in der Floatingpotential-Randschicht (Kapitel 2) und der Boltzmann-Dichteverteilung nach Gleichung (C.1), die sich aufgrund des in b) dargestellten Potentialverlaufs in der Randschicht ergibt.

malgeschwindigkeit haben als die Elektronen, deren mittlere thermische Geschwindigkeit bereits bei $\bar{v}_{\mathrm{e}} = (8k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}/m_{\mathrm{e}}\pi)^{1/2} = 1893\,\mathrm{km/s}$ liegt.

Ein Nachteil in der fluiden Beschreibung der Elektronen liegt aber in der zunehmenden Komplexität der zu lösenden Poisson-Gleichung. Während die Dichte der Ionen n_{i} wie beim rein teilchenbasierten PIC/MC-Verfahren in jedem Zeitschritt gewichtet auf die Gitterpunkte zwischen den Zellen verteilt wird, hängt die Elektronendichte nun selbst vom elektrischen Potential Φ ab. Die zu lösende Poisson-Gleichung

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon_0}\left[n_{\mathrm{i}} - {n_{\mathrm{e}}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}\right] \tag{C.5}$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_{\mathrm{i}} - {n_{\mathrm{e}}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}\right] = 0 \tag{C.6}$$

stellt daher eine nichtlineare Differentialgleichung dar.

C.4 Lösung der hybriden Poisson-Gleichung

Als Ansatz zur Lösung des Problems kann man die Differentialgleichung (C.6) auch als Nullstellenproblem betrachten, bei dem die Potentialfunktion $\Phi(x)$ so gewählt werden muß, daß das nichtlineare Funktional

$$N(\Phi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_{\mathrm{i}} - {n_{\mathrm{e}}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}}\right] \tag{C.7}$$

an jeder Stelle x verschwindet. Ein solches Problem löst man üblicherweise mit einem Newton-Iterationsverfahren [Press *et al.*, 1992; Hockney und Eastwood, 1994]. Dazu entwickelt man das Funktional $N(\Phi)$ um eine Näherungslösung Φ_0 herum, die beispielsweise durch die Lösung aus dem vorherigen Zeitschritt dargestellt wird, und fordert, daß $N(\Phi) = 0$ ist:

$$N(\Phi) = N(\Phi_0) + \left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} (\Phi - \Phi_0) + \mathcal{O}\left((\Phi - \Phi_0)^2\right) \stackrel{!}{=} 0. \tag{C.8}$$

Bricht man die Entwicklung (C.8) nach dem linearen Glied ab, dann erhält man statt der genauen Lösung des Nullstellenproblems zumindest eine gegenüber Φ_0 verbesserte Lösung Φ, die der Gleichung

$$\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} \Phi \approx -N(\Phi_0) + \left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} \Phi_0 \tag{C.9}$$

genügt. Diese Gleichung stellt die Berechnungsvorschrift für einen Iterationsschritt des Newton-Verfahrens dar. Nach Auflösen der Beziehung (C.9) nach Φ verwendet man diese verbesserte Lösung als Ausgangspunkt Φ_0 für weitere Iterationen. Dieses Schema führt man so lange durch, bis die gewünschte Genauigkeit ϵ erreicht ist:

$$|N(\Phi)| < \epsilon \quad \text{an jeder Stelle } x. \tag{C.10}$$

Das Newton-Verfahren besitzt ein quadratisches Konvergenzverhalten und ist daher sehr schnell, solange die Startlösung Φ_0 schon hinreichend nahe an der tatsächlichen Lösung des Nullstellenproblems liegt. Verwendet man für $N(\Phi)$ jetzt das Funktional aus Gleichung (C.7), dann stellt $\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0}$ den Operator

$$\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} = \frac{d^2}{dx^2} - \frac{1}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \tag{C.11}$$

dar, wobei $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}\epsilon_0/{n_\mathrm{e}}^0 e^2}$ die Debye-Länge darstellt. Eingesetzt in Gleichung (C.9) lautet die Berechnungsvorschrift für einen Iterationsschritt des Newton-Verfahrens unter Beachtung von Gleichung (C.7) damit:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{dx^2} - \frac{\Phi}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} &= -\frac{d^2\Phi_0}{dx^2} - \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i} - {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right] \\ &\quad + \frac{d^2\Phi_0}{dx^2} - \frac{\Phi_0}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \\ &= \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e{\lambda_\mathrm{D}}^2}\left[\left(1 - \frac{e\Phi_0}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} - \frac{n_\mathrm{i}}{{n_\mathrm{e}}^0}\right] \end{aligned} \tag{C.12}$$

Diese Differentialgleichung ist jetzt linear in Φ und kann mit der Methode der Finiten Differenzen gelöst werden [Press *et al.*, 1992]. Dazu verwendet man die Punkte $x_i = i \cdot \Delta x$ mit $i = 0, \ldots, N$ des äquidistanten Ortsraumgitters aus Abbildung C.4 und definiert an jedem Punkt dieses Gitters die Größe des elektrischen Potentials

$$\Phi_i \overset{\mathrm{def}}{=} \Phi(x_i) \quad \text{und} \quad \Phi_i^0 \overset{\mathrm{def}}{=} \Phi_0(x_i), \quad i = 0, \ldots, N. \tag{C.13}$$

Dann ersetzt man noch die zweite Ableitung durch die Finite Differenz

$$\left.\frac{d^2\Phi}{dx^2}\right|_{x_i} \longrightarrow \frac{\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1}}{(\Delta x)^2}, \quad i = 1, \ldots, N-1 \tag{C.14}$$

und setzt diese Ausdrücke in Gleichung (C.12) ein. Daraus folgt schließlich das System der Gleichungen

$$\begin{aligned} &\Phi_{i+1} - \left(2 + \left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot e^{e\Phi_i^0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot \Phi_i + \Phi_{i-1} = \\ &\quad \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e}\left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot \left[\left(1 - \frac{e\Phi_i^0}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot e^{e\Phi_i^0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} - \frac{n_\mathrm{i}(x_i)}{{n_\mathrm{e}}^0}\right], \quad i = 1, \ldots, N-1, \end{aligned} \tag{C.15}$$

das in jedem Iterationsschritt zu lösen ist. Beachtet man, daß die Werte des Potentials am rechten und linken Rand (Φ_0 und Φ_N) vorgegeben sind, dann nimmt das Gleichungsystem

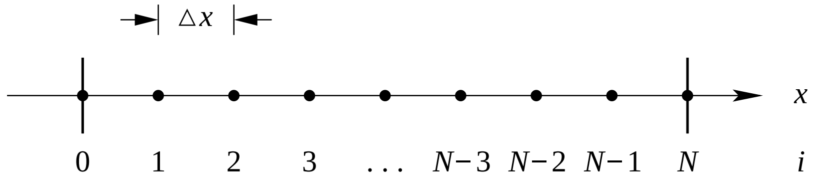

Abbildung C.4: Schematische Darstellung des Ortsraumgitters der Gitterbreite Δx, das zur Darstellung von Gleichung (C.12) in der Finiten-Differenzen-Form verwendet wird. Die Gitterpunkte sind durchnumeriert von 0 bis N.

(C.15) die Form eines tridiagonalen Systems mit der Matrix

$$\begin{pmatrix} -d(\Phi_1^0) & 1 & & & & & \\ 1 & -d(\Phi_2^0) & 1 & & & & \\ & 1 & -d(\Phi_3^0) & 1 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & 1 & -d(\Phi_{N-3}^0) & 1 & \\ & & & & 1 & -d(\Phi_{N-2}^0) & 1 \\ & & & & & 1 & -d(\Phi_{N-1}^0) \end{pmatrix} \tag{C.16}$$

an, wobei $d(\Phi_i^0) \stackrel{\text{def}}{=} 2 + \left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot e^{e\Phi_i^0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}$ ist. Ein solches Gleichungssystem läßt sich sehr effektiv lösen und stellt daher keinen nennenswerten Aufwand dar [Press *et al.*, 1992]. Die weitere Berechnung des elektrischen Feldes, die Bewegung der Ionen in diesem Feld und die Durchführung der Stöße mit den Neutralteilchen geschieht weiter wie beim rein teilchenbasierten PIC/MC-Verfahren.

C.5 Elektronen-Korrekturdichte

Bei der Definition der Randbedingungen zur Simulation einer eindimensionalen Plasmarandschicht wurde in Anhang B gezeigt, daß der eingekoppelte Elektronenstrom ständig durch einen Korrekturstrom (Gleichung (B.13)) variiert werden muß, der sich in jedem Zeitschritt automatisch anpaßt. Eine solche Anpassung wird aus den dort genannten Gründen auch beim hybriden PIC/MC-Verfahren erforderlich sein. Dazu betrachtet man wieder die Beziehung

$$n_\mathrm{e}{}^N = n_\mathrm{i}{}^N + \frac{2\epsilon_0}{(\Delta x)^2 \cdot e} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N), \tag{C.17}$$

die den erforderlichen Unterschied zwischen der Elektronen- und der Ionendichte in der rechten Randzelle beschreibt, damit das elektrische Feld am rechten Rand verschwindet. Nach der Boltzmann-Dichteverteilung für die Elektronen, $n_\mathrm{e}(\Phi) = n_\mathrm{e}{}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}$, beträgt die unkorrigierte Dichte der Elektronen am rechten Rand $n_\mathrm{e}{}^0$, weil das elektrische Potential dort mit $\Phi = 0$ vorgegeben ist. Um jetzt die Dichte an dieser Stelle auf den nach

Gleichung (C.17) erforderlichen Wert zu erhöhen, muß eine Elektronen-Korrekturdichte Δn_e eingeführt werden, die der folgenden Beziehung genügt:

$$\begin{aligned} {n_\mathrm{e}}^0 + \Delta n_\mathrm{e} &\stackrel{\mathrm{def}}{=} {n_\mathrm{i}}^N + \frac{2\epsilon_0}{(\Delta x)^2 \cdot e} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N) \\ \Delta n_\mathrm{e} &= {n_\mathrm{i}}^N - {n_\mathrm{e}}^0 + \frac{2\epsilon_0}{(\Delta x)^2 \cdot e} \cdot (\Phi_{N-1} - \Phi_N). \end{aligned} \tag{C.18}$$

In jedem Zeitschritt wird dann die aktuelle Elektronen-Korrekturdichte nach der Beziehung (C.18) berechnet und aus dieser und den Korrekturdichten vergangener Zeitschritte eine mittlere Korrekturdichte $\overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ errechnet. Die Zahl der Zeitschritte, über die die Mittelung durchgeführt wird, sollte dabei nicht zu klein sein, damit auftretende Fluktuationen herausgemittelt werden. Andererseits sollte der Mittelungszeitraum aber auch nicht zu groß sein, damit die Dichte sich an verändernde Gegebenheiten, wie beispielsweise eine Umschaltung des Wandpotentials, schnell genug anpassen kann. Es hat sich gezeigt, daß als Mittelungszeitraum eine viertel Periodenlänge der Ionenplasmaschwingung, $\frac{1}{4} \cdot 2\pi/\omega_{\mathrm{p,i}}$, geeignet ist. In jedem Zeitschritt wird dann zur vorgegebenen Elektronendichte ${n_\mathrm{e}}^0$ die mittlere Elektronen-Korrekturdichte $\overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ hinzuaddiert und die Summe ${n_\mathrm{e}}^0 + \overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ überall anstelle von ${n_\mathrm{e}}^0$ verwendet.

C.6 Vergleich zu rein teilchenbasierten PIC/MC-Simulationen

Anhand der Ergebnisse aus der Simulation einer statischen Plasmarandschicht bei Floatingpotential soll abschließend noch gezeigt werden, daß das hybride PIC/MC-Verfahren in der Lage ist, die gleichen Resultate zu liefern wie das rein teilchenbasierte PIC/MC-Verfahren. Abbildung C.5 zeigt dazu die mit der hybriden Methode simulierten Verteilungen der Elektronendichte, Ionendichte und des Potentials zusammen mit den entsprechenden Verteilung aus einer PIC/MC-Simulation nach dem rein teilchenbasierten Verfahren, die bereits in Kapitel 2 vorgestellt wurden. Wie Abbildung C.5 c) zu entnehmen ist, decken sich die Potentialverteilungen in allen Bereichen des Simulationsvolumens nahezu perfekt. Dagegen sind die Teilchendichten aus der hybriden Simulation beinahe durchgängig geringfügig größer als diejenigen aus der rein teilchenbasierten Simulation (Abbildungen C.5 a) und b)). Der Unterschied zwischen den Ergebnissen, der sowohl für die Ionen als auch für die Elektronen im Mittel etwa 2% beträgt, liegt jedoch innerhalb der Schwankungsbreiten von etwa 10% um die mittleren Kurvenverläufe, die in beiden Verfahren auftreten. Insofern zeigen auch diese Kurven eine gute Deckung miteinander.

Insgesamt liefert damit das hybride PIC/MC-Verfahren die gleichen Ergebnisse wie das rein teilchenbasierte Verfahren bei einer dramatischen Verkürzung der Rechenzeit. Die genaue Information über die Bewegung einzelner Elektronen geht dabei zwar leider verloren, diese spielt aber im Bereich der Plasmaimmersions-Ionenimplantation sowieso nur eine untergeordnete Rolle.

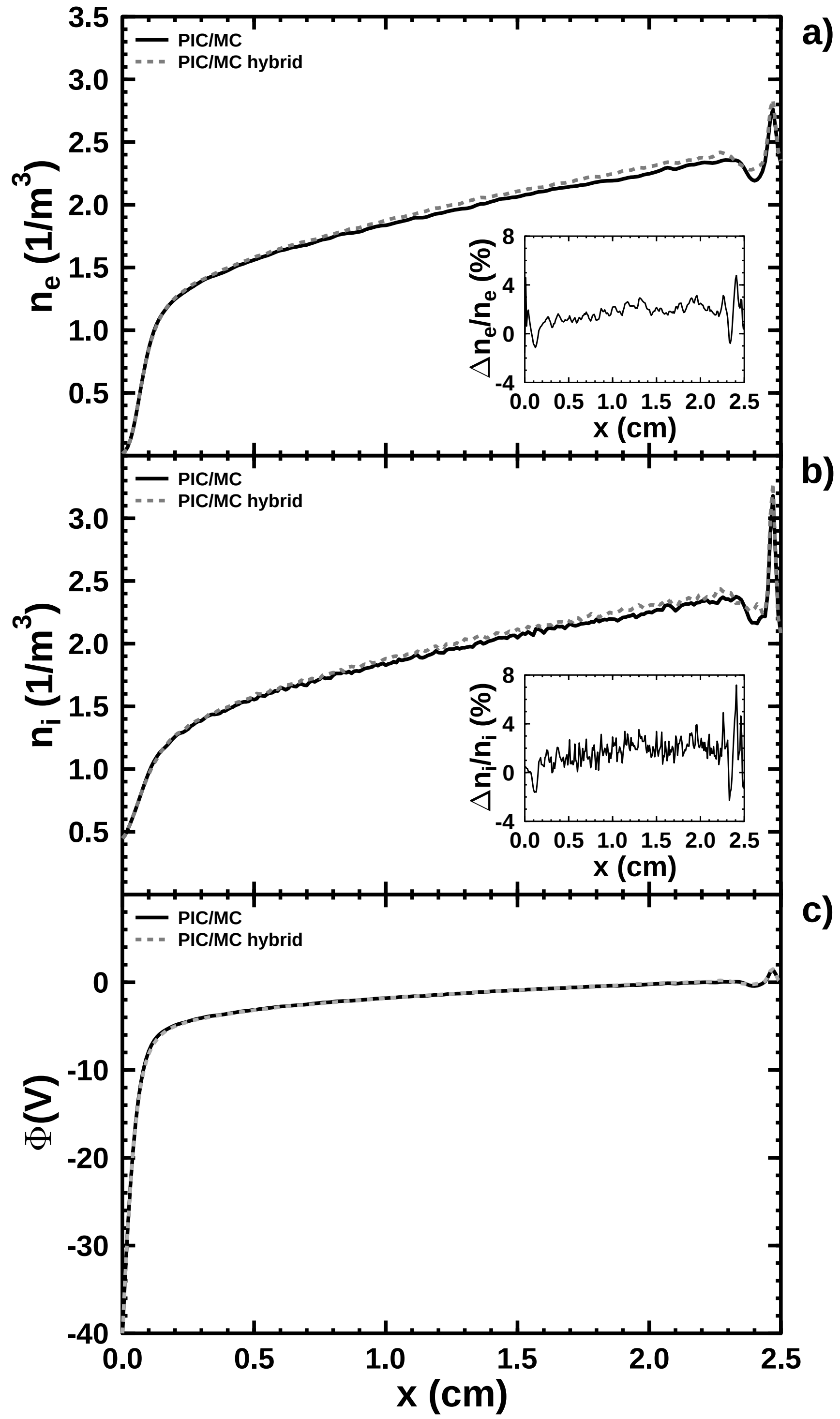

Abbildung C.5: Vergleich a) der Elektronendichte, b) der Ionendichte und c) der Potentialverteilung aus hybrider und rein teilchenbasierter PIC/MC-Simulation einer Plasmarandschicht bei Floatingpotential. Die Diagramme a) und b) enthalten zusätzlich noch die relativen Unterschiede in Prozent bezogen auf die Dichten aus der rein teilchenbasierten PIC/MC-Simulation.

Anhang D

Hybrides zweidimensionales PIC/MC-Verfahren

D.1 Einleitung

Die Computersimulation der Plasmaimmersions-Ionenimplantation an zwei- und dreidimensionalen Targetstrukturen spielt eine bedeutende Rolle. Mit ihrer Hilfe gelingt es, die komplexen Vorgänge, die sich aufgrund der vorhandenen Ecken und Kanten sowie der unterschiedlich orientierten Flächen abspielen, zu durchleuchten und zu verstehen. Das Particle In Cell/Monte Carlo-Verfahren (PIC/MC) bietet dabei gegenüber fluidbasierten Verfahren die Möglichkeit, die Bewegung einzelner Teilchen zu verfolgen. Dieser Vorteil muß jedoch mit einem höheren Rechenaufwand bezahlt werden. Wie in Anhang C anhand des eindimensionalen PIC/MC-Verfahrens gezeigt wurde, läßt sich der erforderliche Rechenaufwand durch Darstellung der Elektronen als Boltzmann-artiges Fluid erheblich reduzieren, weil dadurch einerseits die Zahl der zu simulierenden Teilchen halbiert wird und andererseits die Zeitschrittlänge Δt um einen Faktor in der Größenordnung $(m_\mathrm{i}/m_\mathrm{e})^{1/2}$ vergrößert werden kann. Die Entwicklung und Implementierung des im folgenden vorgestellten zweidimensionalen Verfahrens war ebenfalls Bestandteil der vorliegenden Arbeit.

D.2 Hybride Poisson-Gleichung in zwei Dimensionen

Wie im eindimensionalen Fall läßt sich die Abhängigkeit der Dichte eines isothermen Elektronengases der Temperatur T_e vom Plasmapotential Φ durch eine Boltzmann-Verteilung

$$n_\mathrm{e}(\Phi) = {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \tag{D.1}$$

beschreiben. Setzt man diesen Ausdruck in die zweidimensionale Poisson-Gleichung ein und bezeichnet man die Dichte der Ionen mit n_i, dann lautet die zu lösende zweidimensionale Gleichung:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = -\frac{e}{\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i} - {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right] \tag{D.2}$$

$$\Leftrightarrow \quad \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i} - {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right] = 0. \tag{D.3}$$

Im Gegensatz zum eindimensionalen Fall stellt diese Gleichung nun keine gewöhnliche, sondern eine partielle Differentialgleichung dar, die aufgrund der Exponentialfunktion nichtlinear ist.

D.3 Lösung der hybriden Poisson-Gleichung

Als Ansatz zur Lösung des Problems betrachtet man die Differentialgleichung (D.3) wieder als Nullstellenproblem, bei dem die Potentialfunktion $\Phi(x, y)$ so gewählt werden muß, daß das nichtlineare Funktional

$$N(\Phi) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} + \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i} - {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right] \tag{D.4}$$

an jedem Punkt (x, y) verschwindet. Dieses Problem löst man mit einem Newton-Iterationsverfahren [Press *et al.*, 1992; Hockney und Eastwood, 1994]. Zunächst entwickelt man das Funktional $N(\Phi)$ um eine Näherungslösung Φ_0 herum, die beispielsweise die Lösung aus dem vorherigen Zeitschritt darstellt, und fordert dann, daß $N(\Phi) = 0$ ist:

$$N(\Phi) = N(\Phi_0) + \left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} (\Phi - \Phi_0) + \mathcal{O}\left((\Phi - \Phi_0)^2\right) \stackrel{!}{=} 0. \tag{D.5}$$

Anschließend bricht man die Entwicklung (D.5) nach dem linearen Glied ab, wodurch man statt der genauen Lösung des Nullstellenproblems zumindest eine gegenüber Φ_0 verbesserte Lösung Φ erhält, die der Gleichung

$$\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} \Phi \approx -N(\Phi_0) + \left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} \Phi_0 \tag{D.6}$$

genügt. Diese Gleichung stellt nun die Berechnungsvorschrift für die Iterationsschritte des Newton-Verfahrens dar. Die Lösung Φ der Gleichung (D.6) wird dazu als Ausgangspunkt für weitere Iterationen verwendet und dieses Schema so lange durchgeführt, bis die gewünschte Genauigkeit ϵ erreicht ist:

$$|N(\Phi)| < \epsilon \quad \text{an jedem Punkt } (x, y). \tag{D.7}$$

Aufgrund des quadratischen Konvergenzverhaltens ist das Newton-Verfahren sehr schnell, solange die Startlösung Φ_0 schon hinreichend nahe an der tatsächlichen Lösung des Nullstellenproblems liegt.

Mit $N(\Phi)$ aus Gleichung (D.4) stellt $\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0}$ den Operator

$$\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{1}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \tag{D.8}$$

dar. Darin hat $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}\epsilon_0/{n_\mathrm{e}}^0 e^2}$ die Bedeutung der Debye-Länge. Durch Einsetzen der Operator-Darstellung für $\left.\frac{dN}{d\Phi}\right|_{\Phi_0}$ in Gleichung (D.6) und Verwendung von Gleichung (D.4) lautet die Berechnungsvorschrift für einen Iterationsschritt des Newton-Verfahrens schließlich:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} - \frac{\Phi}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} &= -\frac{\partial^2\Phi_0}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Phi_0}{\partial y^2} - \frac{e}{\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i} - {n_\mathrm{e}}^0 \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right] \\
&\quad + \frac{\partial^2\Phi_0}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi_0}{\partial y^2} - \frac{\Phi_0}{{\lambda_\mathrm{D}}^2} \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} \\
&= \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e{\lambda_\mathrm{D}}^2}\left[\left(1 - \frac{e\Phi_0}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot e^{e\Phi_0/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} - \frac{n_\mathrm{i}}{{n_\mathrm{e}}^0}\right]
\end{aligned} \tag{D.9}$$

Diese Differentialgleichung ist jetzt linear in Φ und kann mit der Methode der Finiten Differenzen gelöst werden [Press *et al.*, 1992].

Dazu führt man ein zweidimensionales Ortsraumgitter, bestehend aus Gitterpunkten $(x_i, y_j) = (i \cdot \Delta x, j \cdot \Delta y)$ ein, mit $i = 0, \ldots, N$ und $j = 0, \ldots, M$. In den durchgeführten Simulationen wurde für die Abstände der Gitterpunkte in beiden Raumrichtungen stets der gleiche Wert verwendet, weshalb im folgenden davon ausgegangen wird, daß $\Delta y = \Delta x$ gilt. Außerdem wird angenommen, daß sich das System in y-Richtung periodisch fortsetzt. Abbildung D.1 zeigt eine schematische Darstellung des zweidimensionalen Ortsraumgitters. An jedem Punkt dieses Gitters definiert man nun die Größe des elektrischen Potentials

$$\Phi_{i,j} \overset{\mathrm{def}}{=} \Phi(x_i, y_j) \quad \text{und} \quad \Phi^0_{i,j} \overset{\mathrm{def}}{=} \Phi_0(x_i, y_j), \quad i = 0, \ldots, N,\ j = 0, \ldots, M. \tag{D.10}$$

Wegen der Periodizität in y-Richtung müssen dabei die Potentiale am oberen Rand ($j = M$) mit denen am unteren Rand des Simulationsgebiets ($j = 0$) übereinstimmen:

$$\Phi_{i,0} = \Phi_{i,M} \quad \text{und} \quad \Phi^0_{i,0} = \Phi^0_{i,M}, \quad i = 0, \ldots, N. \tag{D.11}$$

Es genügt daher die Berechnung der Größen am unteren Rand ($j = 0$). Zusätzlich sind die Potentiale am rechten und am linken Rand ($i = 0, N$) bereits durch das Targetpotential und das Potential in der Plasmavorschicht festgelegt. Aus diesen Gründen müssen nur noch die Potentiale mit den Indizes $i = 1, \ldots, N-1$ und $j = 0, \ldots, M-1$ (schattierte Fläche in Abbildung D.1) bestimmen werden.

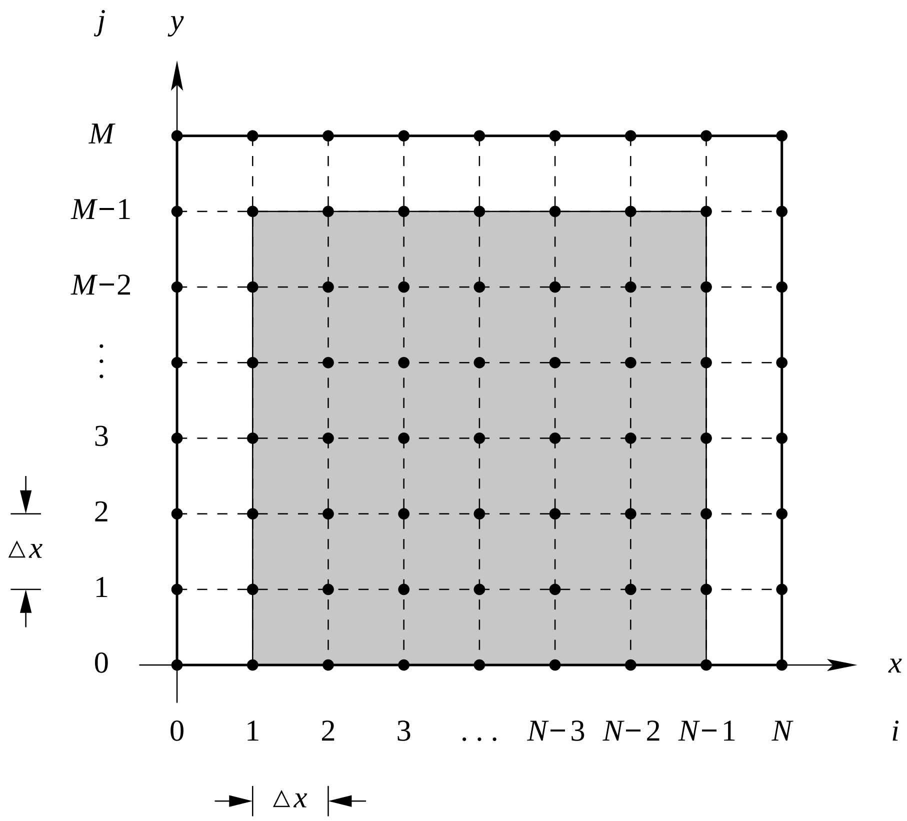

Abbildung D.1: Schematische Darstellung des zweidimensionalen Ortsraumgitters mit gleicher Gitterbreite Δx in beiden Raumrichtungen, das zur Darstellung von Gleichung (D.9) in der Finiten-Differenzen-Form verwendet wird. Die Gitterpunkte tragen Indizes, die in x-Richtung von 0 bis N und in y-Richtung von 0 bis M durchnumeriert sind. Die Schattierung markiert den Bereich der Gitterpunkte, auf denen das elektrische Potential bestimmt werden muß: Aufgrund der vorausgesetzten Periodizität in y-Richtung stimmen die physikalischen Größen am oberen Rand mit denen am unteren Rand überein und brauchen daher nicht gesondert berechnet zu werden. Daneben sind die Potentiale am linken und am rechten Rand bereits durch Randbedingungen festgelegt.

Dann ersetzt man noch die zweiten Ableitungen durch Finite Differenzen, die die Darstellungen

$$\left.\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2}\right|_{x_i,y_j} \longrightarrow \frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}}{(\Delta x)^2}, \quad \text{für } i = 1, \ldots, N-1,\ j = 0, \ldots, M \tag{D.12}$$

$$\text{und} \quad \left.\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\right|_{x_i,y_j} \longrightarrow \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}}{(\Delta x)^2}, \quad \text{für } i = 0, \ldots, N,\ j = 1, \ldots, M-1 \tag{D.13}$$

besitzen. Am oberen und unteren Rand dagegen sind die Krümmungen des Potentials in y-Richtung aus Symmetriegründen gleich und lauten in der Finiten Differenzenform:

$$\left.\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\right|_{x_i,y_0} = \left.\frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2}\right|_{x_i,y_M} \longrightarrow \frac{\Phi_{i,1} - 2\Phi_{i,0} + \Phi_{i,M-1}}{(\Delta x)^2}, \quad i = 0,\ldots,N. \tag{D.14}$$

Einsetzen dieser Ausdrücke in die Beziehung (D.9) liefert schließlich das folgende System von Gleichungen für die Potentiale an den Gitterpunkten:

$$\begin{aligned} &\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} - \left(4 + \left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot e^{e\Phi^0_{i,j}/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot \Phi_{i,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} = \\ &\quad \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e}\left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot \left[\left(1 - \frac{e\Phi^0_{i,j}}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot e^{e\Phi^0_{i,j}/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} - \frac{n_\mathrm{i}(x_i,y_j)}{{n_\mathrm{e}}^0}\right], \\ &\quad \text{für } i = 1,\ldots,N-1,\ j = 1,\ldots,M-1, \end{aligned} \tag{D.15}$$

und

$$\begin{aligned} &\Phi_{i+1,0} + \Phi_{i-1,0} - \left(4 + \left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot e^{e\Phi^0_{i,0}/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot \Phi_{i,0} + \Phi_{i,1} + \Phi_{i,M-1} = \\ &\quad \frac{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}{e}\left(\frac{\Delta x}{\lambda_\mathrm{D}}\right)^2 \cdot \left[\left(1 - \frac{e\Phi^0_{i,0}}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right) \cdot e^{e\Phi^0_{i,0}/k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}} - \frac{n_\mathrm{i}(x_i,y_0)}{{n_\mathrm{e}}^0}\right], \\ &\quad \text{für } i = 1,\ldots,N-1,\ j = 0, M. \end{aligned} \tag{D.16}$$

Aufgrund der Periodizitätsbeziehung (D.11) sowie der Tatsache, daß die Gleichungen für $j = 0$ und $j = M$ in Beziehung (D.16) identisch sind, ist die Gleichung mit dem Index $j = M$ redundant und kann daher bei der Lösung des Systems unbeachtet bleiben.

Um das System der Gleichungen (D.15) und (D.16) nun in die Form eines linearen Gleichungssystems in Matrixdarstellung zu überführen, müssen die paarweise auftretenden Indizes (i, j) bei den Größen $\Phi_{i,j}$, $\Phi^0_{i,j}$ und $n_\mathrm{i}(x_i, y_j)$ eliminiert werden. Dies geschieht durch Abbildung dieser Größen auf neue Größen $\tilde{\Phi}_l$, $\tilde{\Phi}^0_l$ und $\tilde{n}_l$ mit neuen Indizes l:

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_l \overset{\text{def}}{=} \Phi_{i,j}, \quad \tilde{\Phi}^0_l \overset{\text{def}}{=} \Phi^0_{i,j} \quad \text{und} \quad \tilde{n}_l \overset{\text{def}}{=} n_\mathrm{i}(x_i,y_j) \quad &\text{mit} \quad l \overset{\text{def}}{=} i \cdot M + j \\ &\text{und} \quad i = 1,\ldots,N-1, \\ &\phantom{\text{und}} \quad j = 0,\ldots,M-1. \end{aligned} \tag{D.17}$$

Auf diese Art erhält man ein linearen Gleichungssystem $\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} = \vec{b}$ in insgesamt $(N-1) \cdot M$ Unbekannten $\tilde{\Phi}_l$ $(l = M,\ldots,N \cdot M - 1)$, den Kompenten des Vektors $\vec{\tilde{\Phi}}$. Das Schema der Indizierung der neuen Größen ist Abbildung D.2 zu entnehmen. Die zugehörige Matrix $\mathbf{A}$ besitzt die Dimension $(N-1) \cdot M \times (N-1) \cdot M$ und weist eine Struktur auf, wie sie in Abbildung D.3 dargestellt ist. Bei den Größen $\mathbf{D}_i$, $i = 1,\ldots,N-1$, in Abbildung D.3

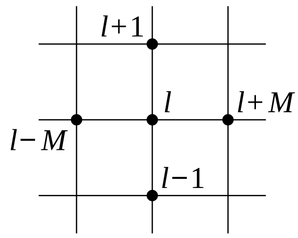

Abbildung D.2: Darstellung der Indizierung der neuen Größen $\tilde{\Phi}_l$, $\tilde{\Phi}_l^0$ und $\tilde{n}_l$: Die Nachbarpunkte eines zentralen Punktes mit dem Index l tragen die Indizes $l-M$, $l-1$, $l+1$ und $l+M$.

handelt es sich um $M \times M$-Matrizen mit dem Aufbau:

$$\mathbf{D}_i \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} -d(\tilde{\Phi}^0_{i\cdot M}) & 1 & & & 1 \\ 1 & -d(\tilde{\Phi}^0_{i\cdot M+1}) & 1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & 1 & -d(\tilde{\Phi}^0_{i\cdot M+(M-2)}) & 1 \\ 1 & & & 1 & -d(\tilde{\Phi}^0_{i\cdot M+(M-1)}) \end{pmatrix} \tag{D.18}$$

Dabei wurde die Abkürzung $d(\tilde{\Phi}^0_l) \stackrel{\text{def}}{=} 4 + \left(\frac{\Delta x}{\lambda_{\text{D}}}\right)^2 e^{e\tilde{\Phi}^0_l/k_{\text{B}}T_{\text{e}}}$ benutzt. Die Einsen in der jeweils linken unteren und rechten oberen Ecke der Matrizen $\mathbf{D}_i$ sind dabei eine Folge der Periodizität in y-Richtung, die durch Gleichung (D.11) ausgedrückt wird. Der Inhomogenitätsvektor $\vec{b}$ des Gleichungssystems besteht zeilenweise aus Elementen der Form

$$b_l(\tilde{\Phi}^0_l, \tilde{n}_l) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{k_{\text{B}}T_{\text{e}}}{e}\left(\frac{\Delta x}{\lambda_{\text{D}}}\right)^2 \cdot \left[\left(1 - \frac{e\tilde{\Phi}^0_l}{k_{\text{B}}T_{\text{e}}}\right) \cdot e^{e\tilde{\Phi}^0_l/k_{\text{B}}T_{\text{e}}} - \frac{\tilde{n}_l}{{n_{\text{e}}}^0}\right], \tag{D.19}$$

mit Indizes zwischen $l = M, \ldots, N \cdot M - 1$.

Aufgrund der Größe der dünn besetzten Matrix $\mathbf{A}$, die symmetrisch, aber nicht notwendigerweise positiv definit ist, wurde zur Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} = \vec{b}$ ein Iterationsverfahren gewählt, das in der Literatur unter den Namen *Bikonjugierte-Gradienten-Methode* oder *Minimum-Residuum-Methode* bekannt ist [Press *et al.*, 1992; Stoer und Bulirsch, 1990]. Dieses Verfahren hat den Vorteil, daß es die Matrix $\mathbf{A}$ nur im Zusammenhang mit Multiplikationen mit Vektoren benutzt, die wegen der dünnen Besetzung schnell auszuführen sind. Im Laufe des Verfahrens wird iterativ versucht, das Residuum $R(\vec{\tilde{\Phi}}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}|\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} - \vec{b}|^2$ zu minimieren, was der Suche nach der Lösung des Gleichungssystems entspricht. Die Iteration erfordert dabei typischerweise mehrere $(N-1) \cdot M$ Durchläufe, bis das Minimum des Residuums mit der gewünschten Genauigkeit eingekreist und die Lösung des Gleichungssystem hinreichend genau bestimmt werden kann. Damit ist dann ein Iterationsschritt des Newton-Verfahrens in der Finiten Differenzenform, also die simultane Lösung der Gleichungen (D.15) und (D.16), durchgeführt und der nächste Iterationsschritt kann beginnen.

$\mathbf{D}_1$	$\mathbf{1}$						
$\mathbf{1}$	$\mathbf{D}_2$	$\mathbf{1}$					
	$\mathbf{1}$	$\mathbf{D}_3$	$\mathbf{1}$				
		$\mathbf{1}$	$\ddots$	$\ddots$			
			$\ddots$	$\ddots$	$\mathbf{1}$		
				$\mathbf{1}$	$\mathbf{D}_{N-3}$	$\mathbf{1}$	
					$\mathbf{1}$	$\mathbf{D}_{N-2}$	$\mathbf{1}$
						$\mathbf{1}$	$\mathbf{D}_{N-1}$

Abbildung D.3: Strukturdarstellung der $(N-1) \cdot M \times (N-1) \cdot M$-Matrix $\mathbf{A}$ des linearen Gleichungssystems, das aus den Gleichungen (D.15) und (D.16) nach der Transformation auf die neuen Größen $\tilde{\Phi}_l$, $\tilde{\Phi}_l^0$ und $\tilde{n}_l$ entsteht. Darin stellt $\mathbf{1}$ jeweils eine $M \times M$-Einheitsmatrix dar, während die $\mathbf{D}_i$, $i = 1, \ldots, N-1$, $M \times M$-Matrizen sind, deren Aufbau in Gleichung (D.18) gezeigt wird.

Das gesamte in diesem Abschnitt geschilderte Verfahren basiert also auf der Newton-Iteration zur Lösung der zweidimensionalen Poisson-Gleichung durch Relaxation, wobei in jedem einzelnen Newton-Iterationschritt das zu lösende Gleichungssystem der Dimension $(N-1) \cdot M$ seinerseits durch ein Iterationsverfahren, die *Bikonjugierte-Gradienten-Methode* oder *Minimum-Residuum-Methode* gelöst wird.

D.4 Berechnung mit zweidimensionalen Targetstrukturen

Bei der Vorstellung des Rechenverfahrens zur Lösung der zweidimensionalen Poisson-Gleichung im vorhergehenden Abschnitt wurde stillschweigend davon ausgegangen, daß das Target auf der linken Seite planar ist und entsprechend das Targetpotential nur am linken Rand vorgegeben ist (Gitterpunkte in der Spalte $i = 0$ in Abbildung D.1). Das zweidimensionale Verfahren hat jedoch zum Ziel, Simulationen an zweidimensional strukturierten Targets durchführen zu können. Dazu muß es möglich sein, das Potential auch an anderen Gitterpunkten vorgeben zu können, wie Abbildung D.4 verdeutlicht. Darin stellt die schattierte Fläche einen Querschnitt durch ein zweidimensionale Target dar, und alle Gitterpunkte auf oder in der Fläche müssen das gleiche vorgegebene Potential besitzen.

Durch eine Modifikation des Gleichungssystems $\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} = \vec{b}$ soll nun erreicht werden, daß ein beliebig herausgegriffener Gitterpunkt des Targets auf einem vorgegebenen Potential ϕ_0 liegen kann. Dazu soll angenommen werden, daß der betrachtete Gitterpunkt die Indizes (i_0, j_0) trägt. Gemäß Gleichung (D.17) besitzt dieser Gitterpunkt im transformierten

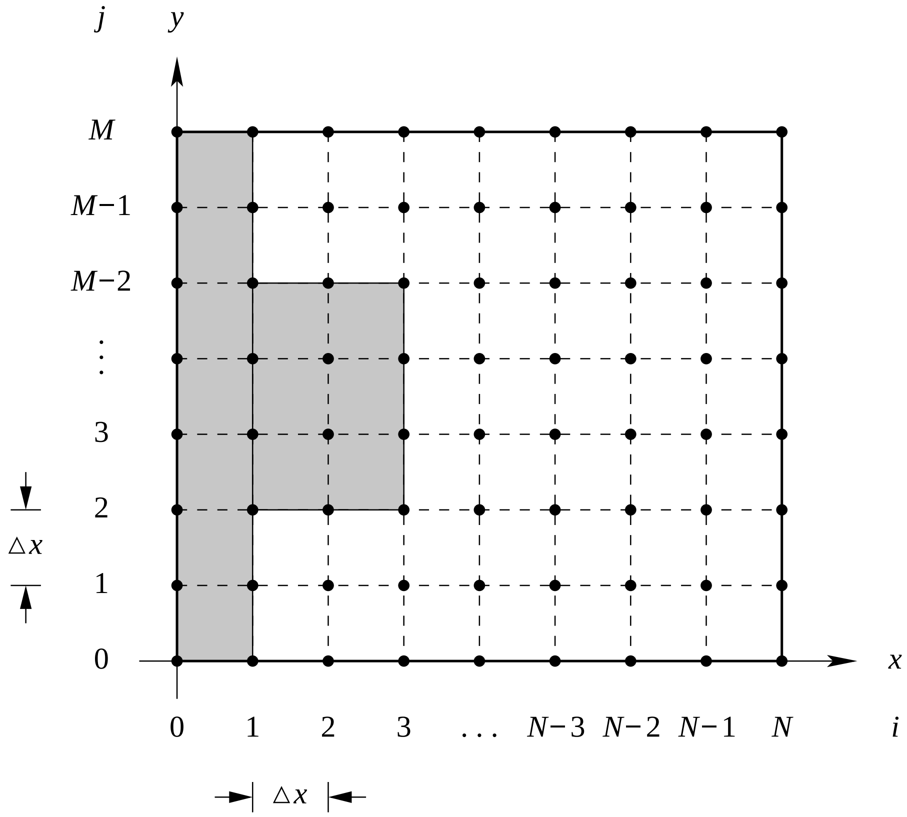

Abbildung D.4: Schematische Darstellung eines zweidimensionalen Targets auf dem Ortsraumgitter. Die schattierte Fläche stellt einen Querschnitt durch ein Target dar.

System den Index $l_0 \stackrel{\text{def}}{=} i_0 \cdot M + j_0$, und aufgrund des vorgegebenen Potentials muß $\tilde{\Phi}_{l_0} \stackrel{!}{=} \phi_0$ gelten. Diese Beziehung läßt sich zu

$$1 \cdot \tilde{\Phi}_{l_0} + \sum_{l \neq l_0} 0 \cdot \tilde{\Phi}_l = \phi_0 \tag{D.20}$$

umschreiben und kann dann so interpretiert werden, daß alle Elemente der l_0-ten Zeile der Matrix $\mathbf{A}$ auf Null gesetzt werden müssen, mit Ausnahme des Diagonalelements dieser Zeile, das Eins sein muß (linke Seite der Gleichung). Außerdem muß das l_0-te Element des Vektors $\vec{b}$ zu ϕ_0 geändert werden (rechte Seite der Gleichung). Jetzt betrachtet man eine beliebige andere Zeile des Gleichungssystems $\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} = \vec{b}$ mit einem Index $k \neq l_0$ und ordnet diese etwas um:

$$\begin{aligned}
\sum_{l} A_{k,l} \cdot \tilde{\Phi}_l &= b_k \\
A_{k,l_0} \cdot \tilde{\Phi}_{l_0} + \sum_{l \neq l_0} A_{k,l} \cdot \tilde{\Phi}_l &= b_k \\
A_{k,l_0} \cdot \phi_0 + \sum_{l \neq l_0} A_{k,l} \cdot \tilde{\Phi}_l &= b_k, \quad \text{wegen } \tilde{\Phi}_{l_0} \stackrel{!}{=} \phi_0 \\
0 \cdot \tilde{\Phi}_{l_0} + \sum_{l \neq l_0} A_{k,l} \cdot \tilde{\Phi}_l &= b_k - A_{k,l_0} \cdot \phi_0. \qquad \text{(D.21)}
\end{aligned}$$

Gleichung (D.21) kann so interpretiert werden, daß das l_0-te Spaltenelement der k-ten Zeile ($k \neq l_0$) der Matrix $\mathbf{A}$ auf Null gesetzt werden muß, während alle anderen Zeilenelemente unverändert bleiben (linke Seite der Gleichung). Außerdem muß vom k-ten Element des Vektors $\vec{b}$ der Wert $A_{k,l_0} \cdot \phi_0$ subtrahiert werden (rechte Seite der Gleichung). Diese Änderungen müssen an allen Zeilen, außer der Zeile mit dem Index l_0 selbst, vorgenommen werden.

Modifiziert man die Matrix $\mathbf{A}$ sowie den Inhomogenitätsvektor $\vec{b}$ entsprechend diesen Anweisungen für jeden Gitterpunkt auf oder in dem Target, dann erhält man schließlich ein neues Gleichungssystem $\mathbf{A} \cdot \vec{\tilde{\Phi}} = \vec{b}$. Da diese Modifikationen an der Symmetrie und der dünnen Besetzung der Matrix nichts verändern, kann das Gleichungssystem weiterhin mit der im letzten Abschnitt beschriebenen *Minimum-Residuum-Methode* gelöst werden.

Dem Verfahren, nach dem anschließend aus der bekannten Potentialverteilung das elektrische Feld an den Rändern, Ecken und Kanten berechnet wird, wurde seines Umfangs wegen ein eigenes Kapitel gewidmet. Dieses befindet sich in Anhang E.

D.5 Elektronen-Korrekturdichte

Ähnlich wie im Fall der eindimensionalen hybriden Plasmasimulation wird auch im zweidimensionalen Fall die auf der rechten Seite vorgegebene Elektronendichte ${n_\mathrm{e}}^0$ um eine

Korrekturdichte Δn_e verändert, die sich in jedem Zeitschritt automatisch anpaßt (vergleiche Abschnitt C.5). Dazu wird gefordert, daß das elektrische Feld in x-Richtung an jedem Gitterpunkt (x_N, y_j) der rechten Berandung (mit $j = 0, \ldots, M$ in Abbildung D.1) verschwindet. Weil man sich die rechte Berandung als eine planare Wand vorstellen kann, auf der überall das gleiche Potential anliegt, gelten für die Komponenten des elektrischen Feldes dort die Gleichungen zu Punkt 9 in Tabelle E.1. Danach nimmt das elektrische Feld in x-Richtung an den Gitterpunkten (x_N, y_j) die Werte

$$\begin{aligned} E^x_{N,j} &= \frac{\Phi_{N-1,j} - \Phi_{N,j}}{\Delta x} + \frac{e\Delta x}{2\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i}(x_N, y_j) - n_\mathrm{e}(x_N, y_j)\right] + \\ &\quad \frac{\Delta x}{8} \cdot \frac{\Phi_{N-1,j+1} - 2\Phi_{N-1,j} + \Phi_{N-1,j-1}}{(\Delta x)^2},\ j = 1, \ldots, M-1, \qquad \text{(D.22)} \\ \text{und} \quad E^x_{N,j} &= \frac{\Phi_{N-1,0} - \Phi_{N,0}}{\Delta x} + \frac{e\Delta x}{2\epsilon_0}\left[n_\mathrm{i}(x_N, y_j) - n_\mathrm{e}(x_N, y_j)\right] + \\ &\quad \frac{\Delta x}{8} \cdot \frac{\Phi_{N-1,1} - 2\Phi_{N-1,0} + \Phi_{N-1,M-1}}{(\Delta x)^2},\ j = 0, M, \qquad \text{(D.23)} \end{aligned}$$

an. Dabei wurde benutzt, daß in den Simulationen stets $\Delta y = \Delta x$ gilt. Die Forderung nach $E^x_{N,j} \stackrel{!}{=} 0$ führt dann sofort zu den Beziehungen

$$\begin{aligned} n_\mathrm{e}(x_N, y_j) &= n_\mathrm{i}(x_N, y_j) + \frac{2\epsilon_0}{e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,j} - \Phi_{N,j}\right) + \\ &\quad \frac{\epsilon_0}{4e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,j+1} - 2\Phi_{N-1,j} + \Phi_{N-1,j-1}\right), \\ &\quad \text{für } j = 1, \ldots, M-1, \qquad \text{(D.24)} \\ \text{und} \quad n_\mathrm{e}(x_N, y_j) &= n_\mathrm{i}(x_N, y_j) + \frac{2\epsilon_0}{e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,0} - \Phi_{N,0}\right) + \\ &\quad \frac{\epsilon_0}{4e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,1} - 2\Phi_{N-1,0} + \Phi_{N-1,M-1}\right), \\ &\quad \text{für } j = 0, M. \qquad \text{(D.25)} \end{aligned}$$

Die Elektronendichte $n_\mathrm{e}(x_N, y_j)$ am rechten Rand sollte sich also lokal von der Ionendichte $n_\mathrm{i}(x_N, y_j)$ an der gleichen Stelle gemäß diesen Gleichungen unterscheiden. Dazu müßte die Elektronendichte von ihrer am rechten Rand vorgegebenen Dichte ${n_\mathrm{e}}^0$ lokal um Werte $\Delta n_\mathrm{e}(x_N, y_j)$ korrigiert werden, die den folgenden Beziehungen genügen:

$$\begin{aligned} \Delta n_\mathrm{e}(x_N, y_j) &\stackrel{\mathrm{def}}{=} n_\mathrm{i}(x_N, y_j) - {n_\mathrm{e}}^0 + \frac{2\epsilon_0}{e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,j} - \Phi_{N,j}\right) + \\ &\quad \frac{\epsilon_0}{4e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,j+1} - 2\Phi_{N-1,j} + \Phi_{N-1,j-1}\right), \\ &\quad \text{für } j = 1, \ldots, M-1, \qquad \text{(D.26)} \\ \text{und} \quad \Delta n_\mathrm{e}(x_N, y_j) &\stackrel{\mathrm{def}}{=} n_\mathrm{i}(x_N, y_j) - {n_\mathrm{e}}^0 + \frac{2\epsilon_0}{e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,0} - \Phi_{N,0}\right) + \\ &\quad \frac{\epsilon_0}{4e(\Delta x)^2}\left(\Phi_{N-1,1} - 2\Phi_{N-1,0} + \Phi_{N-1,M-1}\right), \\ &\quad \text{für } j = 0, M. \qquad \text{(D.27)} \end{aligned}$$

Weil aber überall am rechten Rand das elektrische Potential gleich ist, können die Elektronen aufgrund der Boltzmann-Verteilung keine lokal variierenden Dichten ${n_\mathrm{e}}^0 + \Delta n_\mathrm{e}(x_N, y_j)$ aufweisen. Daher muß eine für den gesamten Rand geltende mittlere Korrekturdichte aus den einzelnen Werten der Gleichungen (D.26) und (D.27) gebildet werden:

$$\Delta n_\mathrm{e} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{M-1} \Delta n_\mathrm{e}(x_N, y_j). \tag{D.28}$$

Die Summe endet dabei bei dem oberen Index $j = M - 1$, weil der Punkt mit dem Index $j = M$ wegen der periodischen Fortsetzung schon zu der sich oben anschließenden, identischen Nachbarregion gezählt werden muß. Andernfalls würden bei der Mittelwertbildung die Korrekturdichten an den Rändern doppelt gewichtet eingehen, weil diese nach Gleichung (D.27) identisch sind.

In jedem Zeitschritt wird dann die aktuelle Elektronen-Korrekturdichte nach der Beziehung (D.28) berechnet und aus dieser und den Korrekturdichten vergangener Zeitschritte eine mittlere Korrekturdichte $\overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ errechnet. Als Zeitraum für diese Mittelung wurde wie im eindimensionalen Fall eine viertel Periodenlänge der Ionenplasmaschwingung, $\frac{1}{4} \cdot 2\pi / \omega_{\mathrm{p,i}}$ gewählt. Schließlich wird in jedem Zeitschritt zu der vorgegebenen Elektronendichte ${n_\mathrm{e}}^0$ die mittlere Elektronen-Korrekturdichte $\overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ hinzuaddiert und die Summe ${n_\mathrm{e}}^0 + \overline{\Delta n_\mathrm{e}}$ überall anstelle von ${n_\mathrm{e}}^0$ verwendet.

D.6 Länge des Simulationsgebiets in Abhängigkeit von der Targetstruktur

In den vorangegangenen Abschnitten dieses Kapitels wurde erklärt, wie das hybride zweidimensionale PIC/MC-Verfahren funktioniert und wie es zur Berechnung der Plasmadynamik eingesetzt werden kann, wenn das Target zweidimensionale Strukturen aufweist. In diesem Abschnitt soll nun noch etwas zur Wahl der richtigen Ausdehnung des Simulationsgebiets gesagt werden.

Bei der Behandlung der Randbedingungen bei eindimensionalen planaren Simulationen in Anhang B wurde betont, daß die Länge L_x des Simulationsgebiets in x-Richtung eine wichtige Rolle dabei spielt, ob sich in einer simulierten Randschicht bei Floatingpotential die Ionen- und Elektronen-Wandströme kompensieren oder nicht. Es hat sich herausgestellt, daß die Ströme nur bei einer ganz bestimmten Länge L_x^0 den gleichen Betrag haben und nur dann die simulierte eindimensionale Randschicht tatsächlich als Plasmarandschicht angesehen werden kann. Man kann die Simulation dieser planaren Plasmarandschicht nun auch mit einem zweidimensionalen Simulationsverfahren durchführen. Dazu wählt man ein zweidimensionales Gebiet, das in x-Richtung wieder die Ausdehnung L_x^0 besitzt, während man in y-Richtung einen beliebigen Ausschnitt der Länge $L_\mathrm{y} > 0$ betrachtet und das System entlang der y-Achse als periodisch fortgesetzt ansieht. Das simulierte Plasmavolumen beträgt also $V_0 = L_\mathrm{x}^0 \cdot L_\mathrm{y}$. Es stellt sich nun die Frage, wie die x-Ausdehnung des Simulationsgebiets verändert werden muß, wenn das Target nicht mehr planar, sondern zweidimensional strukturiert ist. Dazu ist es hilfreich, Abbildung D.5 zu betrachten. Darin stellt die gestrichelte Linie bei $x = L_\mathrm{x}^0$ den Ort der rechten Berandung dar, wenn das Target nur aus einer planaren Wand bei $x = 0$ besteht. Erweitert man die planare Wand nun durch einen Steg der Breite b und der Höhe h, dann muß die Ausdehnung des Gebiets in x-Richtung von L_x^0 auf einen noch unbekannten Wert L_x vergrößert werden. Dies wird deutlich, wenn man den Grenzfall $b = L_\mathrm{y}$ betrachtet: In diesem Fall wird das Target wieder zu einer planaren Wand, deren Oberfläche jetzt aber bei $x = h$ liegt. Aus Symmetriegründen zu dem Fall der planaren Wand bei $x = 0$ muß die rechte Berandung des Simulationsgebiets dann aber bei $x = L_\mathrm{x} = L_\mathrm{x}^0 + h$ liegen. Liegt die Stegbreite b zwischen 0 und L_y, dann kann man für die Wahl des Ortes der rechten Berandung in erster Näherung eine lineare Interpolation zwischen den Grenzfällen einer planaren Wand bei $x = 0$ und $x = h$ ansetzen:

$$L_\mathrm{x} \stackrel{\mathrm{def}}{=} L_\mathrm{x}^0 + h\frac{b}{L_\mathrm{y}}, \text{ für } 0 \leq b \leq L_\mathrm{y}. \tag{D.29}$$

Berechnet man auf der Grundlage dieser Beziehung das vom Plasma eingenommene Volumen, dann findet man folgenden Wert:

$$V = L_\mathrm{x} \cdot L_\mathrm{y} - b \cdot h = L_\mathrm{x}^0 \cdot L_\mathrm{y} = V_0. \tag{D.30}$$

Das Plasma nimmt als für alle Werte $0 \leq b \leq L_\mathrm{y}$ stets das gleiche Volumen ein wie im Fall einer planaren Wand. Dieses Kriterium kann leicht auf zweidimensional strukturierte Targets erweitert werden, die aus einer beliebigen Zusammensetzung von Stegen verschiedener Höhe und Breite bestehen. Aus diesem Grund kam es in allen in dieser Arbeit durchgeführten zweidimensionalen Simulationen zur Anwendung, um die Ausdehnung des Simulationsgebiets in x-Richtung festzulegen.

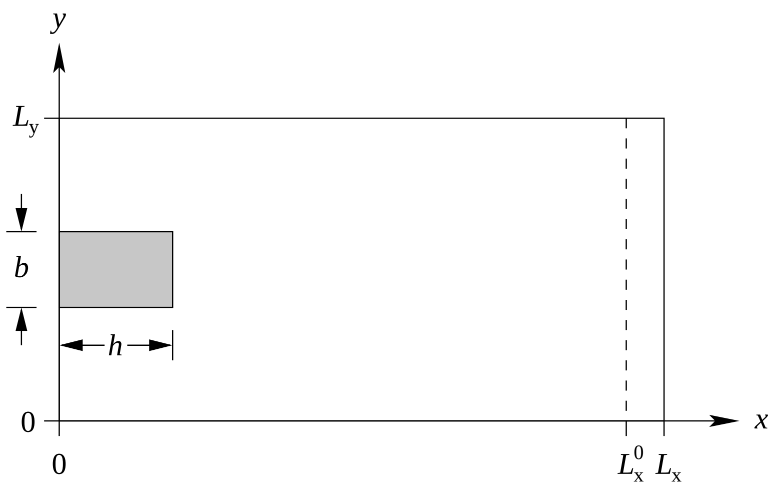

Abbildung D.5: Zur Wahl der x-Ausdehnung des Simulationsgebiets bei einem zweidimensional strukturierten Target: Die gestrichelte Linie bei $x = L_x^0$ stellt den Ort der rechten Berandung dar, wenn das Target nur aus einer planaren Wand bei $x = 0$ besteht. Erweitert man die planare Wand nun durch einen Steg der Breite b und der Höhe h, dann muß die Ausdehnung des Gebiets in x-Richtung von L_x^0 auf einen noch unbekannten Wert L_x vergrößert werden. Dies wird deutlich, wenn man den Grenzfall $b = L_y$ betrachtet: In diesem Fall wird das Target wieder zu einer planaren Wand, deren Oberfläche jetzt aber bei $x = h$ liegt. Aus Symmetriegründen zu dem Fall der planaren Wand bei $x = 0$ muß die rechte Berandung des Simulationsgebiets dann aber bei $x = L_x = L_x^0 + h$ liegen.

Anhang E

Randbedingungen bei zweidimensionalen PIC/MC-Simulationen

E.1 Grenzbedingungen an der Trennfläche des Plasmas zu einer metallischen Wand

In der klassischen Elektrodynamik wird gezeigt, daß das elektrische Feld zu beiden Seiten einer Trennfläche zwischen zwei verschiedenen Medien den folgenden Grenzbedingungen genügt [JACKSON, 1982]:

$$\vec{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = 0 \tag{E.1}$$

$$\vec{n} \cdot (\epsilon_2 \vec{E}_2 - \epsilon_1 \vec{E}_1) = \sigma/\epsilon_0. \tag{E.2}$$

Dabei bezeichnet $\vec{n}$ die in das Medium 2 gerichtete Flächennormale, $\vec{E}_1$ und $\vec{E}_2$ das elektrische Feld und ϵ_1 sowie ϵ_2 die relativen Dielektrizitätskonstanten in den beiden Medien. σ stellt die Flächendichte der Ladungsträger dar, die sich an der Trennfläche befinden. Gleichung (E.1) besagt, daß die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes in beiden Medien gleich sind. Gleichung (E.2) dagegen zeigt, daß sich die Normalkomponenten in der Regel unterscheiden, wenn die Trennfläche mit Ladungsträgern der Flächenladungsdichte σ belegt ist oder die Dielektrizitätskonstanten ϵ_1 und ϵ_2 verschieden sind.

Im vorliegenden Fall wird nun davon ausgegangen, daß es sich bei dem Medium 1 um eine metallische Wand handelt, bei Medium 2 dagegen um ein Vakuum ($\epsilon_2 = 1$), das von den Ladungsträgern des Plasmas erfüllt ist. Da innerhalb eines Metalls jedes elektrische Feld zusammenbricht ($\vec{E}_1 = 0$), vereinfachen sich die obigen Beziehungen zu

$$\vec{n} \times \vec{E}_2 = 0 \tag{E.3}$$

$$\text{und} \quad \vec{n} \cdot \vec{E}_2 = \sigma/\epsilon_0. \tag{E.4}$$

Danach verschwindet die Tangentialkomponenten des elektrischen Feldes im Plasma, das im folgenden nur noch mit $\vec{E}$ bezeichnet wird (Gleichung (E.3)). Das elektrische Feld tritt also immer senkrecht aus der Wand aus und hat direkt an der Oberfläche den Wert $E = \pm\sigma/\epsilon_0$, wobei das Vorzeichen von der relativen Orientierung zwischen $\vec{E}$ und $\vec{n}$ abhängt (Gleichung (E.4)).

E.2 Randbedingungen für elementare Geometrien

Beim PIC-Simulationsverfahren in zwei kartesischen Dimensionen wird der Raum diskretisiert in rechteckige Zellen der Kantenlängen Δx und Δy (Ausnahmen an den Rändern, wo die Kantenlängen nur jeweils $\Delta x/2$ und/oder $\Delta y/2$ betragen). In der Mitte jeder Zelle liegt ein Gitterpunkt, dessen Koordinaten sich allgemein durch

$$\begin{aligned} x_i &= i \cdot \Delta x, \quad i = 0, 1, ..., N && \text{(E.5)} \\ \text{und} \quad y_j &= j \cdot \Delta y, \quad j = 0, 1, ..., M && \text{(E.6)} \end{aligned}$$

beschreiben lassen. Auf diesen Gitterpunkten werden durch den PIC-Algorithmus das elektrische Potential $\Phi_{i,j} \stackrel{\text{def}}{=} \Phi(x_i, y_j)$ und die Komponenten des elektrischen Feldes $E^x_{i,j} \stackrel{\text{def}}{=} E^x(x_i, y_j)$ und $E^y_{i,j} \stackrel{\text{def}}{=} E^y(x_i, y_j)$ berechnet. Im Inneren des Simulationsgebietes, fern von irgendwelchen Rändern oder Wänden, wird das elektrische Feld an jedem Punkt gemäß

$$\begin{aligned} E^x_{i,j} &= \frac{\Phi_{i-1,j} - \Phi_{i+1,j}}{2\Delta x} && \text{(E.7)} \\ \text{und} \quad E^y_{i,j} &= \frac{\Phi_{i,j-1} - \Phi_{i,j+1}}{2\Delta y} && \text{(E.8)} \end{aligned}$$

berechnet. An den Wänden dagegen gelten für das elektrische Feld die Grenzbedingungen aus Abschnitt E.1. Daher muß das elektrische Feld an Gitterpunkten, die auf der Oberfläche einer Wand sitzen, auf andere Art und Weise bestimmt werden. Welche verschiedenen Fälle dabei zu berücksichtigen sind, ist Abbildung E.1 zu entnehmen. Bei der Herleitung der Ausdrücke für das elektrische Feld an den Wandoberflächen sind danach 12 verschiedene Fälle zu berücksichtigen, wenn man nur Wandflächen entlang der Zellengrenzen zuläßt. Insgesamt lassen sich diese Fälle jedoch in drei verschiedene Gruppen zusammenfassen, deren Elemente jeweils durch Drehung oder Spiegelung auseinander hervorgehen.

E.2.1 Konkave Ecken

Die Punkte 1 bis 4, die hier als konkave Ecken bezeichnet werden, bilden die erste Gruppe. Abbildung E.2 zeigt als Vertreter dieser Gruppe die linke obere konkave Ecke, die mit dem Fall 1 aus Abbildung E.1 übereinstimmt. Die Feldkomponente $E^x_{i,j}$ ist eine Tangen-

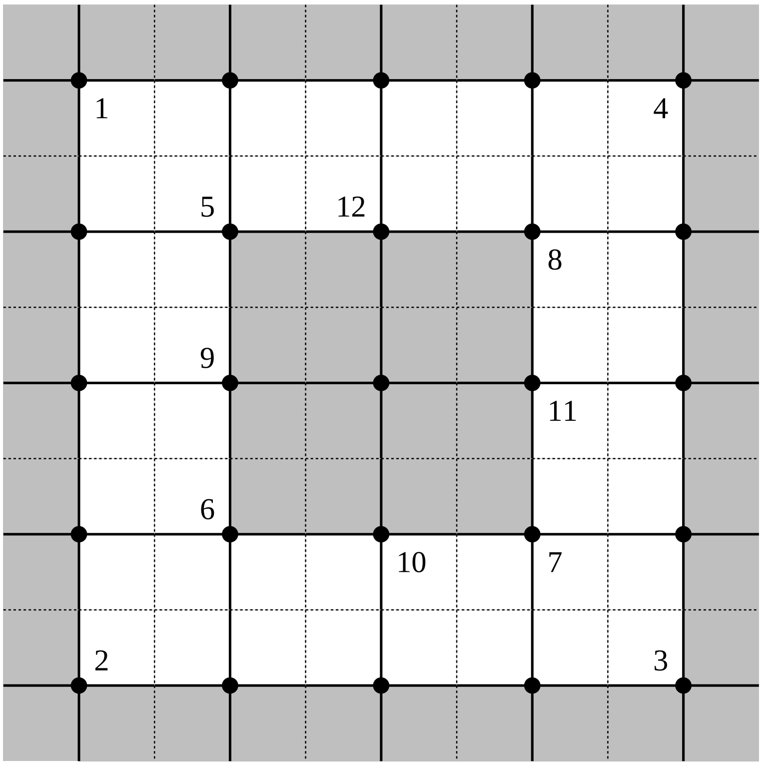

Abbildung E.1: In einem zweidimensionalen kartesischen Koordinatensystem müssen 12 verschiedene Fälle betrachtet werden, wie Gitterpunkte auf der Oberfläche einer Wand liegen können. Der vom Plasma ausgefüllte Raum ist hell dargestellt, die graue Schattierung dagegen gibt die Lage der Wände wieder. Die Raumzellen um die Gitterpunkte herum werden durch die gepunkteten Linien skizziert.

tialkomponente an die obere Wand, $E^y_{i,j}$ dagegen eine Tangentialkomponente an die linke Wand. Wegen der Beziehung (E.3) verschwinden jedoch alle Tangentialkomponenten und daher gilt in diesem Fall:

$$E^x_{i,j} = 0 \tag{E.9}$$

$$\text{und} \quad E^y_{i,j} = 0. \tag{E.10}$$

Dies gilt aus Symmetriegründen auch für die anderen konkaven Ecken (Punkte 2 bis 4 aus Abbildung E.1).

E.2.2 Ebene Flächen

Die zweite Gruppe setzt sich zusammen aus den Punkten 9 bis 12, die jeweils auf planaren Flächen, eingebettet zwischen benachbarten Punkten auf diesen Flächen, liegen.

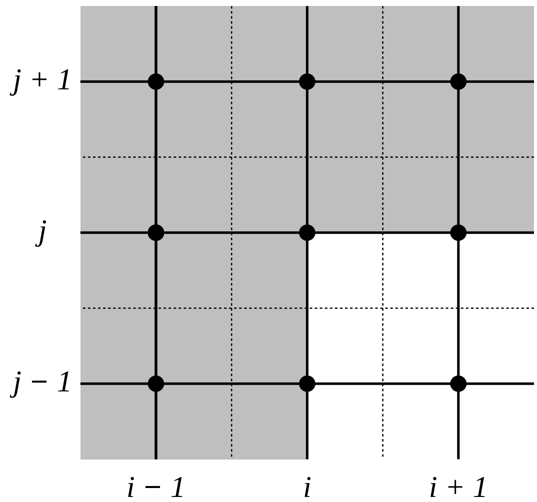

Abbildung E.2: Linke obere konkave Ecke. Die angegeben Indizes bezeichnen die Koordinaten der Gitterpunkt.

Die Vorgehensweise zur Berechnung des Feldes wird für den Punkt 11 vorgeführt, der in Abbildung E.3 vergrößert dargestellt ist. Ausgehend von der Maxwell'schen Gleichung

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho/\epsilon_0 \tag{E.11}$$

integriert man über das Volumen $V_{i,j}$ der Zelle mit dem Mittelpunkt (x_i, y_j) und erhält unter Verwendung des Gauß'schen Satzes:

$$\int\limits_{V_{i,j}} \vec{\nabla} \cdot \vec{E}\, dV = \oint\limits_{\partial V_{i,j}} \vec{E} \cdot d\vec{S} = Q_{i,j}/\epsilon_0. \tag{E.12}$$

Darin stellt $Q_{i,j}$ die gesamte Ladung dar, die in der Zelle enthalten ist. Diese setzt sich zusammen aus der Oberflächenladung $\sigma \cdot \Delta y \Delta z$ auf der Wand und der Ladung der Ionen und Elektronen $\rho_{i,j} \cdot \frac{1}{2}\Delta x \Delta y \Delta z$ in der rechten Zellenhälfte, die im Plasma liegt:

$$Q_{i,j} = \sigma \cdot \Delta y \Delta z + \rho_{i,j} \cdot \frac{1}{2}\Delta x \Delta y \Delta z. \tag{E.13}$$

Zu dem Oberflächenintegral tragen nur die Flächenelemente bei, die im Plasma liegen, da innerhalb der metallischen Wand jedes elektrische Feld verschwindet:

$$\oint\limits_{\partial V_{i,j}} \vec{E} \cdot d\vec{S} = E^y_{i+1/4,j+1/2} \cdot \frac{1}{2}\Delta x \Delta z - E^y_{i+1/4,j-1/2} \cdot \frac{1}{2}\Delta x \Delta z + E^x_{i+1/2,j} \cdot \Delta y \Delta z. \tag{E.14}$$

Die verwendeten Werte des elektrischen Feldes stellen dabei die Feldnormalen in der Mitte der jeweils beitragenden Fläche dar und werden durch lineare Interpolation aus den

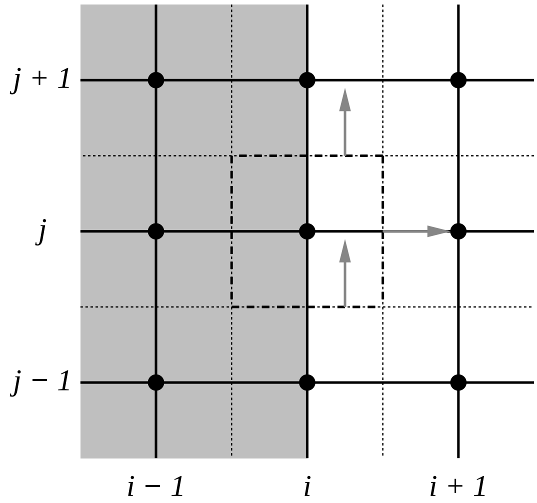

Abbildung E.3: Ebene Wandfläche auf der linken Seite. Die angegeben Indizes bezeichnen die Koordinaten der Gitterpunkte. Die Pfeile stellen die elektrischen Feldvektoren $E^y_{i+1/4,j+1/2}$ (oben), $E^y_{i+1/4,j-1/2}$ (unten) und $E^x_{i+1/2,j}$ (rechts) dar. Das gestrichelte Quadrat soll die Oberfläche $\partial V_{i,j}$ der Zelle um den Mittelpunkt (x_i, y_j) zeigen.

Werten in der jeweiligen Umgebung berechnet:

$$\begin{aligned}
E^y_{i+1/4,j\pm1/2} &= E^y(x_i + \Delta x/4, y_j \pm \Delta y/2) \\
&= \frac{1}{2}(E^y_{i,j\pm1/2} + E^y_{i+1/2,j\pm1/2}) \\
&= \frac{1}{2}(E^y_{i,j\pm1/2} + \frac{1}{2}[E^y_{i,j\pm1/2} + E^y_{i+1,j\pm1/2}]) \\
&= \frac{1}{4}E^y_{i+1,j\pm1/2}\,, \quad \text{da } E^y_{i,j\pm1/2} = 0 \\
&= \pm\frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i+1,j\pm1}}{4\Delta y}, \qquad \text{(E.15)} \\
E^x_{i+1/2,j} &= E^x(x_i + \Delta x/2, y_j) \\
&= \frac{\Phi_{i,j} - \Phi_{i+1,j}}{\Delta x}. \qquad \text{(E.16)}
\end{aligned}$$

Faßt man alle Gleichungen (E.12) bis (E.16) zusammen, löst nach σ/ϵ_0 auf, und benutzt die Tatsache, daß $+\sigma/\epsilon_0$ gerade der Normalkomponenten $E^x_{i,j}$ an der Wand entspricht (Gleichung (E.4)), so erhält man schließlich:

$$E^x_{i,j} = -\frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i,j}}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} - \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\Phi_{i+1,j+1} - 2\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i+1,j-1}}{(\Delta y)^2}. \qquad \text{(E.17)}$$

Analog dazu läßt sich das Feld an den übrigen Gitterpunkten 9, 10 und 12 berechnen. Die Ergebnisse sind in Tabelle E.1 tabellarisch aufgeführt.

Es sei noch angemerkt, daß die hier vorgeführte Methode zur Berechnung des Feldes in ganz ähnlicher Form bereits von Vahedi und DiPeso benutzt wurde [Vahedi und DiPeso, 1997]. Im Unterschied zu deren Arbeit wird jedoch hier stets die Normalkomponente des elektrischen Feldes in der Mitte jeder Fläche verwendet, die zum Oberflächenintegral beiträgt (zum Beispiel $E^y_{i+1/4,j+1/2}$ auf der oberen Fläche und $E^y_{i+1/4,j-1/2}$ auf der unteren Fläche in Abbildung E.3). Dadurch unterscheiden sich die erzielten Resultate von deren Ergebnissen, sind dadurch aber genauer, da sie auch die Krümmung des Potentials parallel zur jeweiligen Wandfläche berücksichtigen (siehe beispielsweise den letzten Term in Gleichung (E.17)).

E.2.3 Konvexe Kanten

Die letzte Gruppe, die sich aus den Punkten 5 bis 8 zusammensetzt, enthält alle Gitterpunkte, die auf konvexen, also nach außen gerichteten Kanten der Wand sitzen. Als Beispielelement dieser Gruppe ist in Abbildung E.4 die rechte untere konvexe Ecke (Punkt 7) vergrößert dargestellt. Anhand dieses Beispiels wird gezeigt, wie man das Feld für konvexe Kanten berechnen kann. Wie im Abschnitt zuvor wendet man dazu den Gauß'schen Satz

$$\oint_{\partial V_{i,j}} \vec{E} \cdot d\vec{S} = Q_{i,j}/\epsilon_0 \tag{E.18}$$

auf die Zelle um den konvexen Gitterpunkt (x_i, y_j) an. Die elektrische Ladung $Q_{i,j}$ setzt sich wieder zusammen aus der Oberflächenladung $\sigma \cdot \frac{1}{2}(\Delta x + \Delta y)\Delta z$ und der Ionen- und

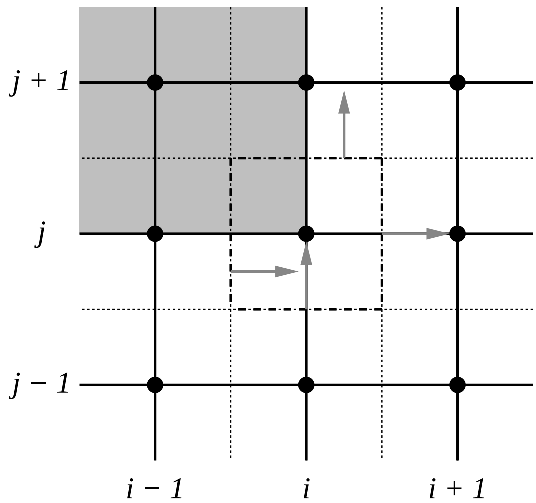

Abbildung E.4: Linke obere konvexe Kante. Die angegeben Indizes bezeichnen die Koordinaten der Gitterpunkte. Die Pfeile stellen die elektrischen Feldvektoren $E^y_{i+1/4,j+1/2}$ (oben), $E^y_{i,j-1/2}$ (unten), $E^x_{i-1/2,j-1/4}$ (links) und $E^x_{i+1/2,j}$ (rechts) dar. Das gestrichelte Quadrat soll die Oberfläche $\partial V_{i,j}$ der Zelle um den Mittelpunkt (x_i, y_j) zeigen.

Elektronenladung $\rho_{i,j} \cdot \frac{3}{4}\Delta x \Delta y \Delta z$ im Plasma:

$$Q_{i,j} = \sigma \cdot \frac{1}{2}(\Delta x + \Delta y)\Delta z + \rho_{i,j} \cdot \frac{3}{4}\Delta x \Delta y \Delta z. \tag{E.19}$$

Zu dem Oberflächenintegral tragen diesmal vier Flächenelemente bei:

$$\begin{aligned}\oint_{\partial V_{i,j}} \vec{E} \cdot d\vec{S} &= E^y_{i+1/4,j+1/2} \cdot \frac{1}{2}\Delta x \Delta z - E^y_{i,j-1/2} \cdot \Delta x \Delta z - \\ &\quad E^x_{i-1/2,j-1/4} \cdot \frac{1}{2}\Delta y \Delta z + E^x_{i+1/2,j} \cdot \Delta y \Delta z. \end{aligned} \tag{E.20}$$

Die darin auftretenden Werte des elektrischen Feldes stellen wieder die Normalkomponenten in der Mitte der jeweils beitragenden Flächen dar und werden zum Teil durch lineare Interpolation aus benachbarten Feldwerten berechnet:

$$\begin{aligned}
E^y_{i+1/4,j+1/2} &= E^y(x_i + \Delta x/4, y_j + \Delta y/2) \\
&= \frac{1}{2}(E^y_{i,j+1/2} + E^y_{i+1/2,j+1/2}) \\
&= \frac{1}{2}(E^y_{i,j+1/2} + \frac{1}{2}[E^y_{i,j+1/2} + E^y_{i+1,j+1/2}]) \\
&= \frac{1}{4}E^y_{i+1,j+1/2}\,, \quad \text{da } \; E^y_{i,j+1/2} = 0 \\
&= \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i+1,j+1}}{4\Delta y}, && \text{(E.21)} \\
E^y_{i,j-1/2} &= E^y(x_i, y_j - \Delta y/2) \\
&= \frac{\Phi_{i,j-1} - \Phi_{i,j}}{\Delta y}, && \text{(E.22)} \\
E^x_{i-1/2,j-1/4} &= E^x(x_i - \Delta x/2, y_j - \Delta y/4) \\
&= \frac{1}{2}(E^x_{i-1/2,j} + E^x_{i-1/2,j-1/2}) \\
&= \frac{1}{2}(E^x_{i-1/2,j} + \frac{1}{2}[E^x_{i-1/2,j} + E^x_{i-1/2,j-1}]) \\
&= \frac{1}{4}E^x_{i-1/2,j-1}\,, \quad \text{da } \; E^x_{i-1/2,j} = 0 \\
&= \frac{\Phi_{i-1,j-1} - \Phi_{i,j-1}}{4\Delta x}, && \text{(E.23)} \\
E^x_{i+1/2,j} &= \frac{\Phi_{i,j} - \Phi_{i+1,j}}{\Delta x}. && \text{(E.24)}
\end{aligned}$$

Setzt man die Ausdrücke (E.19) bis (E.24) in (E.18) ein und löst nach σ/ϵ_0 auf, so erhält man

$$\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{2}{\Delta x + \Delta y} \cdot \Bigg(\frac{8\Phi_{i,j} - 8\Phi_{i,j-1} + \Phi_{i+1,j} - \Phi_{i+1,j+1}}{8\Delta y} \cdot \Delta x + \frac{8\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1} - 8\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i-1,j-1}}{8\Delta x} \cdot \Delta y - \frac{3\rho_{i,j}}{4\epsilon_0} \cdot \Delta x \Delta y \Bigg). \tag{E.25}$$

Dieser Wert entspricht nach Gleichung (E.4) dem Betrag der elektrischen Feldnormalen, die am Eckpunkt (x_i, y_j) herrscht. Da aber die Normalenrichtung an einem Eckpunkt nicht definiert ist, wird als Richtungsvektor in diesem Fall der Vektor $\vec{n} = (n_x, n_y)$ mit

$$n_x \stackrel{\text{def}}{=} +\frac{|g_x|}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}} \quad \text{und} \quad n_y \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{|g_y|}{\sqrt{g_x^2 + g_y^2}} \tag{E.26}$$

definiert, wobei für

$$g_x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Phi_{i+1,j} - \Phi_{i,j}}{\Delta x} \quad \text{und} \quad g_y \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\Phi_{i,j-1} - \Phi_{i,j}}{\Delta y}, \tag{E.27}$$

verwendet werden. Insgesamt lauten damit die Komponenten des elektrischen Feldes am Eckpunkt der rechten unteren konvexen Kante

$$E^x_{i,j} = n_x \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0} \quad \text{und} \quad E^y_{i,j} = n_y \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}, \tag{E.28}$$

mit σ/ϵ_0 nach Gleichung (E.25). Die Wahl des Richtungsvektors $\vec{n}$ als ein von der Kante weggerichteter Vektor stellt sicher, daß das elektrische Feld bei positiver Flächenladung σ tatsächlich von der Wand wegzeigt, bei negativer Flächenladung dagegen in die Wand hineingerichtet ist. Die Berechnung des Feldes an den anderen konvexen Eck-Gitterpunkten 5, 6 und 8 geschieht nach dem gleichen Schema. Die Ergebnisse sind wieder in Tabelle E.1 zusammengefaßt.

E.3 Korrektur der Fehler infolge divergierender Kantenfelder

Aus der Elektrostatik ist bekannt, daß das elektrische Feld in der Nähe geladener konvexer Kanten divergiert [Jackson, 1982]. Im Fall der zweidimensionalen PIC-Simulation in kartesischen Koordinaten sind die vorkommenden konvexen Kanten stets rechtwinklig. Bezeichnet man mit r den Abstand von einer solchen Kante, die sich im Vakuum befinden soll, dann zeigt das elektrische Feld ein divergentes Anwachsen mit $r^{-1/3}$ bei Annäherung an die Kante. Befindet sich die Ecke in einem Plasma der Dichte n_p, dann kommt es aufgrund des Abschirmeffekts im Plasma immer noch zu einem Anstieg wie $r^{-1/3} \cdot \exp(-r/\lambda_\mathrm{D})$, worin $\lambda_\mathrm{D} = \sqrt{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e} \epsilon_0 / n_\mathrm{p} e^2}$ die Debye-Länge darstellt. Ein solches divergentes Verhalten kann jedoch auf einem Gitter mit endlich kleiner Gitterbreite Δx nicht mehr richtig aufgelöst werden. Dadurch kommt es im Verlauf der Feldberechnung und der anschließenden Bewegung der Teilchen in dem Feld zu Fehlern, die dazu führen, daß die Energie der Teilchen nicht mehr erhalten bleibt. Liegt zwischen dem Plasmainneren und der Kante ein Potentialgefälle $\Delta\Phi$ an, in dem die Ionen auf die Kante zu beschleunigt werden, dann liegt der simulierte Fehler in der Aufschlagenergie der Ionen auf die Wand zwischen $+14\%$ bei $\Delta\Phi = 40.285\,\mathrm{V}$ und -11% bei $\Delta\Phi = 1000\,\mathrm{V}$. Dazwischen zeigt sich bei $\Delta\Phi \approx 500\,\mathrm{V}$ eine Übereinstimmung zwischen der simulierten Aufschlagenergie und deren erwartetem Wert. Eine eingehende Untersuchung, bei der das elektrische Feld direkt an der Kante mit verschiedenen Zahlenfaktoren γ korrigiert wurde, hat gezeigt, daß die Verwendung des Korrekturfaktors

$$\gamma(\Delta\Phi) \stackrel{\mathrm{def}}{=} 0.5 + \frac{\Delta\Phi}{910\,\mathrm{V}} \tag{E.29}$$

zu einer Reduzierung des Energiefehlers auf unter 3% im gesamten verwendeten Bereich von $\Delta\Phi$ zwischen $40.285\,\mathrm{V}$ und $1000\,\mathrm{V}$ führt.

Tabelle E.1: Zusammenfassung der Ergebnisse für die Komponenten $E^x_{i,j}$ und $E^y_{i,j}$ des elektrischen Feldes, das jeweils an den Punkten 1 bis 12 aus Abbildung E.1 herrscht.

Punkt	elektrische Feldkomponenten
1 – 4	$E^x_{i,j} = 0$ $E^y_{i,j} = 0$
5	$E^x_{i,j} = -\frac{\lvert g_x\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ und $E^y_{i,j} = +\frac{\lvert g_y\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ mit $g_x = \frac{\Phi_{i-1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x}$ und $g_y = \frac{\Phi_{i,j+1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y}$ und $\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{2}{\Delta x+\Delta y} \cdot \Big(\frac{8\Phi_{i,j}+\Phi_{i-1,j}-8\Phi_{i,j+1}-\Phi_{i-1,j-1}}{8\Delta y} \cdot \Delta x +$ $\frac{8\Phi_{i,j}-8\Phi_{i-1,j}+\Phi_{i,j+1}-\Phi_{i+1,j+1}}{8\Delta x} \cdot \Delta y -$ $\frac{3\rho_{i,j}}{4\epsilon_0} \cdot \Delta x\Delta y \Big)$
6	$E^x_{i,j} = -\frac{\lvert g_x\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ und $E^y_{i,j} = -\frac{\lvert g_y\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ mit $g_x = \frac{\Phi_{i-1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x}$ und $g_y = \frac{\Phi_{i,j-1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y}$ und $\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{2}{\Delta x+\Delta y} \cdot \Big(\frac{8\Phi_{i,j}-8\Phi_{i,j-1}+\Phi_{i-1,j}-\Phi_{i-1,j+1}}{8\Delta y} \cdot \Delta x +$ $\frac{8\Phi_{i,j}+\Phi_{i,j-1}-8\Phi_{i-1,j}-\Phi_{i+1,j-1}}{8\Delta x} \cdot \Delta y -$ $\frac{3\rho_{i,j}}{4\epsilon_0} \cdot \Delta x\Delta y \Big)$
7	$E^x_{i,j} = +\frac{\lvert g_x\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ und $E^y_{i,j} = -\frac{\lvert g_y\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ mit $g_x = \frac{\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x}$ und $g_y = \frac{\Phi_{i,j-1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y}$ und $\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{2}{\Delta x+\Delta y} \cdot \Big(\frac{8\Phi_{i,j}-8\Phi_{i,j-1}+\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i+1,j+1}}{8\Delta y} \cdot \Delta x +$ $\frac{8\Phi_{i,j}+\Phi_{i,j-1}-8\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i-1,j-1}}{8\Delta x} \cdot \Delta y -$ $\frac{3\rho_{i,j}}{4\epsilon_0} \cdot \Delta x\Delta y \Big)$
8	$E^x_{i,j} = +\frac{\lvert g_x\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ und $E^y_{i,j} = +\frac{\lvert g_y\rvert}{\sqrt{g_x^2+g_y^2}} \cdot \frac{\sigma}{\epsilon_0}$ mit $g_x = \frac{\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x}$ und $g_y = \frac{\Phi_{i,j+1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y}$ mit $\frac{\sigma}{\epsilon_0} = \frac{2}{\Delta x+\Delta y} \cdot \Big(\frac{8\Phi_{i,j}-8\Phi_{i,j+1}+\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i+1,j-1}}{8\Delta y} \cdot \Delta x +$ $\frac{8\Phi_{i,j}+\Phi_{i,j+1}-8\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i-1,j+1}}{8\Delta x} \cdot \Delta y -$ $\frac{3\rho_{i,j}}{4\epsilon_0} \cdot \Delta x\Delta y \Big)$
9	$E^x_{i,j} = +\frac{\Phi_{i-1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} + \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\Phi_{i-1,j+1}-2\Phi_{i-1,j}+\Phi_{i-1,j-1}}{(\Delta y)^2}$ $E^y_{i,j} = 0$
10	$E^x_{i,j} = 0$ $E^y_{i,j} = +\frac{\Phi_{i,j-1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y} + \frac{\Delta y}{2} \cdot \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} + \frac{\Delta y}{2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\Phi_{i+1,j-1}-2\Phi_{i,j-1}+\Phi_{i-1,j-1}}{(\Delta x)^2}$
11	$E^x_{i,j} = -\frac{\Phi_{i+1,j}-\Phi_{i,j}}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} - \frac{\Delta x}{2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\Phi_{i+1,j+1}-2\Phi_{i+1,j}+\Phi_{i+1,j-1}}{(\Delta y)^2}$ $E^y_{i,j} = 0$
12	$E^x_{i,j} = 0$ $E^y_{i,j} = -\frac{\Phi_{i,j+1}-\Phi_{i,j}}{\Delta y} - \frac{\Delta y}{2} \cdot \frac{\rho_{i,j}}{\epsilon_0} - \frac{\Delta y}{2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\Phi_{i+1,j+1}-2\Phi_{i,j+1}+\Phi_{i-1,j+1}}{(\Delta x)^2}$

Anhang F

Energie- und Winkelverteilung der Elektronen auf einer planaren Wand

Ausgehend von einem thermischen Elektronengas der Temperatur T_e im Plasmabulk werden in diesem Kapitel die Energie- und Winkelverteilung berechnet, mit der die Elektronen auf eine planare Wand pro Zeiteinheit auftreffen. Der Potentialunterschied zwischen der Wand und dem Plasmainneren soll dabei $\Delta\Phi > 0$ betragen.

Die Geschwindigkeitsverteilung in jede der drei Raumrichtungen folgt im Plasma einer Boltzmann-Verteilung

$$f_j(v_j)\,dv_j = \left(\frac{m_\mathrm{e}}{2\pi k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{m_\mathrm{e} {v_j}^2}{2k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}}\,dv_j \;\;\text{mit}\;\; j = x, y, z. \tag{F.1}$$

Angenommen, die planare Wand ist so orientiert, daß ihre Flächennormale in negative x-Richtung zeigt, dann werden die dazu senkrechten Geschwindigkeiten v_y und v_z der Elektronen durch die Potentialbarriere vor der Wand nicht verändert. Der Betrag der transversalen Geschwindigkeit $v_\perp \stackrel{\text{def}}{=} (v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$ genügt daher stets folgender Verteilung:

$$f_\perp(v_\perp)\,dv_\perp = \int_0^{2\pi} f_y(v_\perp \cos\varphi) f_z(v_\perp \sin\varphi) v_\perp\,dv_\perp d\varphi \tag{F.2}$$

$$= \frac{m_\mathrm{e}}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}} \cdot e^{-\frac{m_\mathrm{e} {v_\perp}^2}{2k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}} v_\perp\,dv_\perp. \tag{F.3}$$

Die Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung dagegen erfährt eine Änderung, wenn die Elektronen, die sich auf die Wand zubewegen ($v_x > 0$), genügend Energie haben, um die Plasma-Wand-Potentialbarriere zu überwinden. Die Geschwindigkeit unmittelbar an der Wand beträgt dann

$$v_x' \stackrel{\text{def}}{=} \left(v_x^2 - \frac{2e\Delta\Phi}{m_\mathrm{e}}\right)^{1/2} \;\;\text{für}\;\; v_x^2 \geq \frac{2e\Delta\Phi}{m_\mathrm{e}}. \tag{F.4}$$

Um die Verteilung der neuen Geschwindigkeiten $f'_x(v'_x)$ zu erhalten, überlegt man sich, daß die Anzahl der Elektronen $n_\mathrm{e} \cdot f_x(v_x)\, dv_x \cdot v_x\, dt \cdot dA$, die in der Zeit dt mit einer Geschwindigkeit zwischen v_x und $v_x + dv_x$ ($v_x^2 \geq 2e\Delta\Phi/m_\mathrm{e}$) aus dem Plasmabulk kommend durch ein gedachtes Flächenelement an der Schichtkante hindurchströmen, gleich der Anzahl der Elektronen sein muß, die anschließend mit der neuen Geschwindigkeit zwischen v'_x und $v'_x + dv'_x$ durch die Wand treten:

$$f'_x(v'_x)\, dv'_x \cdot v'_x\, dt \cdot dA \stackrel{!}{=} \alpha n_\mathrm{e} \cdot f_x(v_x)\, dv_x \cdot v_x\, dt \cdot dA \tag{F.5}$$

$$\Leftrightarrow \quad f'_x(v'_x)\, dv'_x = \alpha n_\mathrm{e} \cdot f_x(v_x) \cdot \frac{v_x}{v'_x} \cdot \frac{dv_x}{dv'_x}\, dv'_x. \tag{F.6}$$

Mit $\frac{dv_x}{dv'_x} = \frac{v'_x}{v_x}$ ergibt sich daraus:

$$f'_x(v'_x)\, dv'_x = \alpha n_\mathrm{e} \cdot \left(\frac{m_\mathrm{e}}{2\pi k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}} \cdot e^{-\frac{m_\mathrm{e} {v'_x}^2}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}\, dv'_x. \tag{F.7}$$

Darin bedeutet α ein Normierungsfaktor, der bestimmt wird durch die Forderung

$$\int_0^\infty f'_x(v'_x)\, dv'_x \stackrel{!}{=} 1, \tag{F.8}$$

weil nur Elektronen mit positiver Geschwindigkeit $v'_x > 0$ die Wand erreichen können. Ausführen der Integration unter Benutzung der Beziehung

$$\int_0^\infty e^{-a^2x^2}\, dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2a} \tag{F.9}$$

liefert für α den Wert $\alpha = 2e^{\frac{e\Delta\Phi}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}/n_\mathrm{e}$ und damit schließlich die Geschwindigkeitsverteilung in x-Richtung an der Wand:

$$f'_x(v'_x)\, dv'_x = 2 \cdot \left(\frac{m_\mathrm{e}}{2\pi k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}\right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{m_\mathrm{e} {v'_x}^2}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}}\, dv'_x. \tag{F.10}$$

Es ist bemerkenswert, daß diese Verteilung nach wie vor eine Boltzmann-Verteilung ist, die völlig unabhängig ist von der Höhe der Potentialbarriere $e\Delta\Phi$.

Bezeichnet man jetzt mit $v \stackrel{\mathrm{def}}{=} ({v'_x}^2 + {v_\perp}^2)^{1/2}$ den Betrag der Gesamtgeschwindigkeit eines Elektrons und mit ϑ den Winkel zur Flächennormalen der Wand ($0 \leq \vartheta \leq \pi/2$), dann lautet die Verteilung der Elektronen im Geschwindigkeitsraum in Polarkoordinaten vor der Wand:

$$\begin{aligned} f(v,\vartheta)\, dv d\vartheta &= f'_x(v\cos\vartheta) f_\perp(v \sin\vartheta) v\, dv d\vartheta & \text{(F.11)} \\ &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{m_\mathrm{e}}{k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_\mathrm{e} v^2}{2k_\mathrm{B}T_\mathrm{e}}} \cdot v^2 \sin\vartheta\, dv d\vartheta. & \text{(F.12)} \end{aligned}$$

Da im Zeitraum dt nur die Elektronen auf die Wand treffen, die sich maximal in der Entfernung $v'_x dt = v \cos\vartheta \, dt$ von der Wand befinden, beträgt die Verteilung der pro Zeiteinheit auf die Wand treffenden Elektronen in Polarkoordinaten

$$\begin{aligned} h(v,\vartheta)\, dv d\vartheta &= \beta \cdot f(v,\vartheta) \cdot v \cos\vartheta \, dv d\vartheta && \text{(F.13)} \\ &= \beta \cdot \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{m_\mathrm{e}}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}\right)^{3/2} e^{-\frac{m_\mathrm{e} v^2}{2 k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}} \cdot v^3 \sin\vartheta \cos\vartheta \, dv d\vartheta, && \text{(F.14)} \end{aligned}$$

wobei β die Rolle eines Normierungsfaktors spielt, der jedoch nicht weiter bestimmt wird. Die Geschwindigkeitverteilung der pro Zeiteinheit unter einem beliebigen Winkel auf die Wand treffenden Elektronen erhält man daraus durch Integration über den Winkel ϑ:

$$\begin{aligned} h(v)\, dv &= \int_{\vartheta=0}^{\vartheta=\pi/2} h(v,\vartheta)\, dv d\vartheta && \text{(F.15)} \\ &= \gamma \cdot v^3 \cdot e^{-\frac{m_\mathrm{e} v^2}{2 k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}} \, dv. && \text{(F.16)} \end{aligned}$$

Zur Energieverteilung der pro Zeiteinheit auf die Wand treffenden Elektronen gelangt man durch die Forderung:

$$h(E)\, dE \stackrel{!}{=} f(v)\, dv = f(v) \frac{dv}{dE} \, dE, \tag{F.17}$$

wobei $E = \frac{1}{2} m_\mathrm{e} v^2$ ist. Mit $\frac{dv}{dE} = (2 m_\mathrm{e} E)^{1/2}$ und der Normierung

$$\int_0^\infty h(E)\, dE \stackrel{!}{=} 1 \tag{F.18}$$

folgt dann:

$$h(E)\, dE = \frac{E}{(k_\mathrm{B} T_\mathrm{e})^2} \cdot e^{-\frac{E}{k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}}} \, dE. \tag{F.19}$$

Die Dichte $h(E)$ der Verteilung, die unabhängig ist von der Höhe der Potentialbarriere $e\Delta\Phi$, hat stets ein Maximum von $e^{-1}/k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}$ bei der Energie $E = k_\mathrm{B} T_\mathrm{e}$. Abbildung F.1 zeigt den Verlauf der Verteilungsdichte $h(E)$.

Die Winkelverteilung der pro Zeiteinheit auf die Wand treffenden Elektronen erhält man schließlich durch Integration von $h(v,\vartheta)\, dv d\vartheta$ nach Beziehung (F.14) über alle Geschwindigkeiten $v > 0$ und Normierung auf Eins:

$$\begin{aligned} h_\mathrm{rad}(\vartheta)\, d\vartheta &= \int_{v=0}^{v=\infty} h(v,\vartheta)\, dv d\vartheta && \text{(F.20)} \\ &= 2 \cdot \sin\vartheta \cos\vartheta \, d\vartheta. && \text{(F.21)} \end{aligned}$$

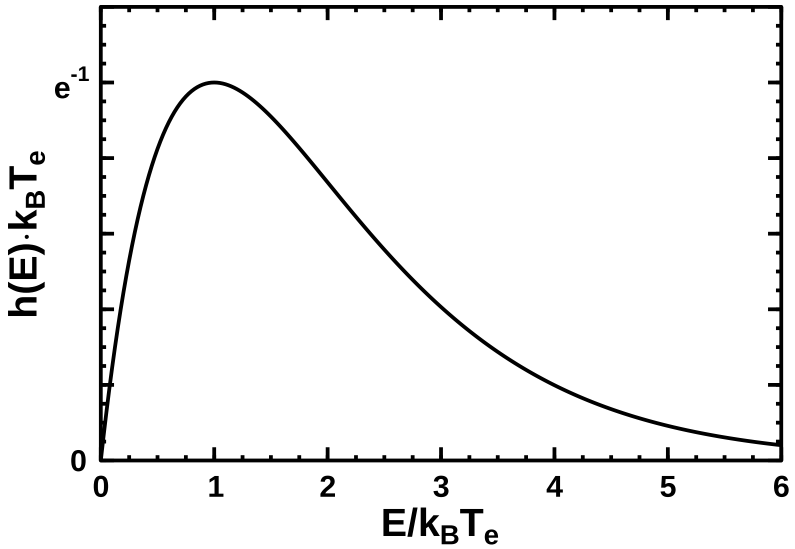

Abbildung F.1: Verlauf der Verteilungsdichte $h(E)$ der Energie E, mit der die Elektronen auf eine planare Wand treffen.

Dabei wird der Winkel ϑ im Bogenmaß (Einheit rad) gemessen. Für ϑ in Grad (Einheit °) lautet die Verteilungsfunktion

$$h(\vartheta)\,d\vartheta \;=\; \frac{\pi}{90^\circ} \cdot \sin\vartheta \cos\vartheta \, d\vartheta. \tag{F.22}$$

Auch die Winkelverteilung ist unabhängig von der Höhe der Potentialbarriere $e\Delta\Phi$ und zeigt, daß die Elektronen mit höchster Wahrscheinlichkeit unter einem Winkel von $\pi/4$ entsprechend 45° auf die Wand auftreffen, während senkrechter und streifender Einfall niemals vorkommen. Abbildung F.2 zeigt der Vollständigkeit halber den Verlauf der Winkelverteilungsdichte $h(\vartheta)$, wobei ϑ in Grad gemessen wird.

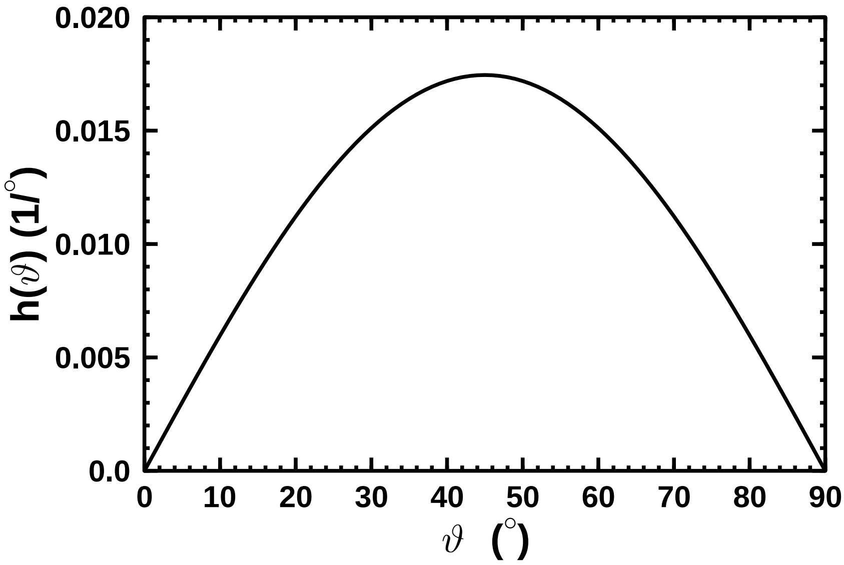

Abbildung F.2: Verlauf der Verteilungsdichte $h(\vartheta)$ des Winkels ϑ, unter dem die Elektronen auf eine planare Wand treffen.

Literaturverzeichnis

2000. *Plasmatechnik, Prozessvielfalt + Nachhaltigkeit.* Broschüre des Bundesministeriums für Bildung und Forschung.

1996. *Spektrum der Wissenschaft, Dossier: Mikrosystemtechnik.* Spektrum der Wissenschaft Verlagsgesellschaft mbH.

Allen, J. E. und J. G. Andrews, 1970. *A note on ion rarefaction waves.* J. Plasma Phys. **4**, 187.

Anders, A., Hrsg., 2000. *Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation and Deposition* (John Wiley & Sons, Inc.).

Anders, A., S. Anders, I. G. Brown und K. M. Yu, 1995. *Increasing the retained dose by plasma immersion ion implantation and deposition.* Nucl. Instr. and Meth. **B102**, 132.

Andrews, J. G. und R. H. Varey, 1971. *Sheath Growth in a Low Pressure Plasma.* Phys. Fluids **14**, 339.

Baer, D., Hrsg., 2000. *Duden, Das große Fremdwörterbuch: Herkunft und Bedeutung der Wörter* (Bibliographisches Institut & F. A. Brockhaus AG), 2. Auflage.

Behrisch, R., Hrsg., 1981. *Sputtering by Particle Bombardment I* (Springer).

Benilov, M. S., 2000. *Boundary Conditions for the Child-Langmuir Sheath Model.* IEEE Trans. Plasma Sci. **28**, 2207.

Birdsall, C. K., 1991. *Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations, Plus Monte Carlo Collisions With Neutral Atoms, PIC-MCC.* IEEE Trans. Plasma Sci. **19**, 65.

Birdsall, C. K. und W. B. Bridges, 1966. *Electron Dynamics of Diode Regions* (Academic Press Inc.).

Birdsall, C. K. und D. Fuss, 1969. *Clouds-in-Clouds, Clouds-in-Cells Physics for Many-Body Plasma Simulation.* J. Comput. Phys. **3**, 494.

Birdsall, C. K. und A. B. Langdon, 1995. *Plasma Physics via Computer Simulation* (IOP Publishing Ltd.), 2. Auflage.

Brutscher, J., R. Günzel und W. Möller, 1996. *Sheath dynamics in plasma immersion ion implantation.* Plasma Sources Sci. Technol. **5**, 54.

Chapman, B., 1980. *Glow Discharge Processes* (John Wiley & Sons, Inc.).

Chen, F. F., 1974. *Introduction to Plasma Physics and Controlled Fusion, Volume 1: Plasma Physics* (Plenum Press), 2. Auflage.

Cheung, N. W., 1991. *Plasma immersion ion implantation for ULSI processing.* Nucl. Instr. and Meth. **B55**, 811.

Child, C. D., 1911. *Discharge from hot cao.* Phys. Rev. **32**, 492.

Cho, M. H., N. Hershkowitz und T. Intrator, 1988. *Temporal evolution of collisionless sheaths.* J. Vac. Sci. Technol. A **6**, 2978.

Clapham, L. und J. L. Whitton, 1992. *High dose, heavy ion implantation into metals: The use of a sacrificial carbon surface layer for increased dose retention.* J. Appl. Phys. **72**, 4014.

Conrad, J. R., 1987. *Sheath thickness and potential profiles of ion-matrix sheaths for cylindrical and spherical electrodes.* J. Appl. Phys. **62**, 777.

Cramer, W. H., 1959. *Elastic and Inelastic Scattering of Low-Velocity Ions: Ne$^+$ in A, A$^+$ in Ne, and A$^+$ in A.* J. Chem. Phys. **30**, 641.

Dasgupta, A. und A. K. Bhatia, 1985. *Scattering of electrons from argon atoms.* Phys. Rev. A **32**, 3335.

Donnelly, I. J. und P. A. Watterson, 1989. *Ion-matrix sheath structure around cathodes of complex shape.* J. Phys. D: Appl. Phys. **22**, 90.

Dunn, D. A. und S. A. Self, 1964. *Static Theory of Density and Potential Distribution in a Beam-Generated Plasma.* J. Appl. Phys. **35**, 113.

Ecker, G., 2001. *Niedertemperatur-Plasmaphysik – Vom Stiefkind der Physik zur Schlüsseltechnologie.* Phys. Bl., Januar 2001, 57.

Emmert, G. A. und M. A. Henry, 1992. *Numerical simulation of plasma sheath expansion, with applications of plasma-source ion implantation.* J. Appl. Phys. **71**, 113.

En, W. und N. W. Cheung, 1994. *Analytical modeling of plasma immersion ion implantation target current using the SPICE circuit simulator.* J. Vac. Sci. Technol. B **12**, 833.

En, W. G., M. A. Lieberman und N. W. Cheung, 1995. *Comparison of Experimental Target Currents with Analytical Model Results for Plasma Immersion Ion Implantation.* IEEE Trans. Plasma Sci. **23**, 415.

Ensinger, W., K. Volz und T. Höchbauer, 1999. *Three-dimensional dose uniformity of plasma immersion ion implantation shown with the example of macro-trenches.* Surf. Coat. Technol. **120-121**, 347.

Ensinger, W., K. Volz und T. Höchbauer, 2000. *Plasma immersion ion implantation of complex-shaped objects: an experimental study on the treatment homogeneity.* Surf. Coat. Technol. **128-129**, 265.

FAROUKI, R. T., M. DALVIE und L. F. PAVARINO, 1990. *Boundary-condition refinement of the Child-Langmuir law for collisionless dc plasma sheaths.* J. Appl. Phys. **68**, 6106.

GOBRECHT, H., Hrsg., 1980. *Bergmann – Schaefer, Lehrbuch der Experimentalphysik Band IV, Teil 2, Aufbau der Materie* (Walter de Gruyter).

GOLDSTONE, R. J. und R. H. RUTHERFORD, 1995. *Introduction to Plasma Physics* (IOP Publushing Ltd.).

GREINER, W., L. NEISE und H. STÖCKER, 1993. *Thermodynamik und Statistische Mechanik* (Harri Deutsch).

GÜNZEL, R. und J. BRUTSCHER, 1996. *Sheath dynamics in plasma immersion ion implantation.* Surf. Coat. Technol. **85**, 98.

HAHN, S. J. und J. K. LEE, 1992. *Kinetic Simulation of the Transient Sheath in Plasma Ion Implantation.* Jpn. J. Appl. Phys. **31**, 2570.

HERSHKOWITZ, N., 1994. *How Does the Potential Get from A to B in a Plasma?* IEEE Trans. Plasma Sci. **22**, 11.

HOCKNEY, R. W. und J. W. EASTWOOD, 1994. *Computer Simulation Using Particles* (IOP Publishing Ltd.).

HONG, M. und G. A. EMMERT, 1994. *Two-dimensional fluid modeling of time-dependent plasma sheath.* J. Vac. Sci. Technol. B **12**, 889.

HONG, M. und G. A. EMMERT, 1995. *Two-dimensional fluid simulation of expanding plasma sheaths.* J. Appl. Phys. **78**, 6967.

HUDDLESTONE, R. H. und S. L. LEONARD, Hrsg., 1965. *Plasma Diagnostic Techniques* (Academic Press, Inc.).

JACKSON, J. D., 1982. *Klassische Elektrodynamik* (Walter de Gruyter), 2. Auflage.

KOPITZKI, K., 1989. *Einführung in die Festkörperphysik* (B. G. Teubner).

KRIMKE, R., 1996. *Kinetische Simulation von Gasentladungsplasmen.* Dissertation, Fachbereich Physik, Universität Kaiserslautern.

KRIMKE, R., H. M. URBASSEK und A. WUCHER, 1997. *High-frequency electron-gas secondary neutral mass spectrometry: evaluation of transient effects.* J. Phys. D: Appl. Phys. **30**, 1676.

LANGMUIR, I., 1913. *The effect of space charge and residual gases on thermionic currents in high vacuum.* Phys. Rev. **2**, 450.

LAWSON, W. S., 1989. *Particle Simulation of Bounded 1D Plasma Systems.* J. Comput. Phys. **80**, 253.

LIEBERMAN, M. A., 1989. *Model of plasma immersion ion implantation.* J. Appl. Phys. **66**, 2926.

LIEBERMAN, M. A. und A. J. LICHTENBERG, 1994a. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* (John Wiley & Sons, Inc.).

LIEBERMAN, M. A. und A. J. LICHTENBERG, 1994b. *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* (John Wiley & Sons, Inc.), Kap. 16.4.

LOCHTE-HOLTGREVEN, W., Hrsg., 1968. *Plasma Diagnostics* (North-Holland Publishing Company).

MÄNDL, S., 1997. *Die Randschichtausbreitung bei der Plasma-Immersions-Ionenimplantation.* Dissertation, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden.

MÄNDL, S., N. P. BARRADAS, J. BRUTSCHER, R. GÜNZEL und W. MÖLLER, 1997. *Comparison of measured and calculated dose for plasma source ion implantation into 3D-objects.* Nucl. Instr. and Meth. **B127/128**, 996.

MCDANIEL, E. W., 1964. *Collision Phenomena in Ionized Gases* (John Wiley & Sons, Inc.).

MESSIAH, A., 1991. *Quantenmechanik* (Walter de Gruyter), Kap. A.2.

MIZUNO, B., I. NAKAYAMA, N. AOI, M. KUBOTA und T. KOMEDA, 1988. *New doping method for subhalf micron trench sidewalls by using an electron cyclotron resonance plasma.* Appl. Phys. Lett. **53**, 2059.

MÜLLER, K.-H., 1987. *Ion-beam-induced expitaxial vapor-phase growth: A molecular-dynamics study.* Phys. Rev. B **35**, 7906.

NASTASI, M., J. W. MAYER und J. K. HIRVONEN, 1996. *Ion-Solid Interactions: Fundamentals and Applications* (Cambridge University Press).

OECHSNER, H., 1995. *Secondary neutral mass spectrometry (SNMS) - recent methodical progress and applications to fundamental studies in particle/surface interaction.* Int. J. Mass Spectrom. Ion Proc. **143**, 271.

PHELPS, A. V., 1997. *Collision cross sections for electrons with H_2, N_2, O_2, CO_2, H_2O, NO, SF_6, He, Ne, Ar, Kr, Xe, Mg, and Na (Compilation of electron cross sections last used by Phelps and coworkers at JILA).* JILA-Homepage http://jilawww.colorado.edu.

PRESS, W. H., S. A. TEUKOLSKY, W. T. VETTERLING und B. P. FLANNERY, 1992. *Numerical Recipes in C* (Cambridge University Press), 2. Auflage.

PROCASSINI, R. J., C. K. BIRDSALL und E. C. MORSE, 1990. *A fully kinetic, self-consistent particle simulation model of the collisionless plasma-sheath region.* Phys. Fluids B **2**, 3191.

QIAN, X. Y., N. W. CHEUNG, M. A. LIEBERMAN, R. BRENNAN, M. I. CURRENT und N. JHA, 1991. *Conformal implantation for trench doping with plasma immersion ion implantation.* Nucl. Instr. and Meth. **B55**, 898.

RIEMANN, K.-U., 1991. *The Bohm criterion and sheath formation.* J. Phys. D: Appl. Phys. **24**, 493.

RIEMANN, K.-U. und T. DAUBE, 1999. *Analytical model of the relaxation of a collisionless ion matrix sheath.* J. Appl. Phys. **86**, 1202.

SCHEUER, J. T., M. SHAMIM und J. R. CONRAD, 1990. *Model of plasma source ion implantation in planar, cylindrical, and spherical geometries.* J. Appl. Phys. **67**, 1241.

SHAMIM, M., J. T. SCHEUER und J. R. CONRAD, 1991. *Measurements of spatial and temporal sheath evolution for spherical and cylindrical geometries in plasma source ion implantation.* J. Appl. Phys. **69**, 2904.

SHERIDAN, T. E., 1993. *Ion-matrix sheath in a cylindrical bore.* J. Appl. Phys. **74**, 4903.

SHERIDAN, T. E., 1994. *Pulsed sheath dynamics in a small cylindrical bore.* Phys. Plasmas **1**, 3485.

SHERIDAN, T. E., 1995. *Pulsed-sheath ion dynamics in a trench.* J. Phys. D: Appl. Phys. **28**, 1094.

SHERIDAN, T. E., 1996. *Particle-in-Cell Simulation of the Pulsed Sheath in a Trench.* IEEE Trans. Plasma Sci. **24**, 57.

SHERIDAN, T. E. und M. J. ALPORT, 1994. *Two-dimensional model of ion dynamics during plasma source ion implantation.* Appl. Phys. Lett. **64**, 1783.

SHERIDAN, T. E. und M. J. GOECKNER, 1995. *Collisional sheath dynamics.* J. Appl. Phys. **77**, 4967.

SHERIDAN, T. E. und J. GOREE, 1991. *Collisional plasma sheath model.* Phys. Fluids B **3**, 2796.

SHIBUKI, S., H. KANAO und T. AKAHORI, 1997. *Copper film formation using electron cyclotron resonance plasma sputtering and reflow method.* J. Vac. Sci. Technol. B **15**, 60.

STANGEBY, P. C., 1986. *The Plasma Sheath.* In *Physics of Plasma-Wall Interactions in Controlled Fusion*, hrsg. von D. E. Post und R. Behrisch (Plenum Press, New York), S. 41.

STEWART, R. A. und M. A. LIEBERMAN, 1991. *Model of plasma immersion ion implantation for voltage pulses with finite rise and fall times.* J. Appl. Phys. **70**, 3481.

STOER, J. und R. BULIRSCH, 1990. *Numerische Mathematik, Band 2* (Springer), 2. Auflage.

SURENDRA, M., D. B. GRAVES und G. M. JELLUM, 1990. *Self-consistent model of direct-current glow discharge: Treatment of fast electrons.* Phys. Rev. A **41**, 1112.

THORNTON, J. A., 1986. *The microstructure of sputter-depositied coatings.* J. Vac. Sci. Technol. A **4**, 3059.

TIAN, X. und P. K. CHU, 2000. *Modeling of the relationship between implantation parameters and implantation dose during plasma immersion ion implantation.* Phys. Lett. A **277**, 42.

TONKS, L. und I. LANGMUIR, 1929. *Oscillations in ionized gases.* Phys. Rev. **33**, 195.

VAHEDI, V. und G. DIPESO, 1997. *Simultaneous Potential and Circuit Solution for Two-Dimensional Bounded Plasma Simulation Codes.* J. Comput. Phys. **131**, 149.

VAHEDI, V., M. A. LIEBERMAN, M. V. ALVES, J. P. VERBONCOEUR und C. K. BIRDSALL, 1991. *A one-dimensional collisional model for plasma-immersion ion implantation.* J. Appl. Phys. **69**, 2008.

VAHEDI, V. und M. SURENDRA, 1995. *A Monte Carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges.* Comput. Phys. Comm. **87**, 179.

VERBONCOEUR, J. P., M. V. ALVES und V. VAHEDI, 1990. *Simultanous potential and circuit solution for bounded plasma particle simulation codes.* Electronics Research Laboratory Report M90/67.

WALCHER, W., 1990. *Gewöhnliche Differentialgleichungen* (Springer), 4. Auflage.

WATTERSON, P. A., 1989. *Child-Langmuir sheath structure around wedge-shaped cathodes.* J. Phys. D: Appl. Phys. **22**, 1300.

WIDNER, M., I. ALEXEFF, W. D. JONES und K. E. LONNGREN, 1970. *Ion Acoustic Wave Excitation and Ion Sheath Evolution.* Phys. Fluids **13**, 2532.

WOOD, B., 1993. *Displacement current and multiple pulse effects in plasma source ion implantation.* J. Appl. Phys. **73**, 4770.

XIA, Z. und C. CHAN, 1993. *Modeling and experiment on plasma source ion implantation.* J. Appl. Phys. **73**, 3651.

YU, C. und N. W. CHEUNG, 1994. *Trench Doping Conformality by Plasma Immersion Ion Implantation (PIII).* IEEE Electron Dev. Lett. **15**, 196.

Publikationen

Im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit entstanden folgende Publikationen:

- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Presheath dynamics induced by sudden electrode voltage jumps*, J. Phys. D: Appl. Phys. **33**, 3066–3072 (2000)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Note on boundary conditions in plasma sheath simulations using the particle-in-cell algorithm*, IEEE Trans. Plasma Sci. **29**, 809–814 (2001)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Plasma recovery in plasma immersion ion implantation: dependence on pulse frequency and duty cycle*, J. Phys. D: Appl. Phys. **35**, 462–467 (2002)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Simulation of sheath and presheath dynamics in PIII*, Surf. Coat. Technol. **156**, 131–135 (2002)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Erratum to "Simulation of sheath and presheath dynamics in PIII"* [Surf. Coat. Technol. **156**, 131–135 (2002)], Surf. Coat. Technol. **167**, 112 (2003)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Sheath structure and ion current onto a patterned surface immersed in a plasma at floating potential*, Surf. Coat. Technol. **160**, 259–268 (2002)
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Erratum to "Sheath structure and ion current onto a patterned surface immersed in a plasma at floating potential"* [Surf. Coat. Technol. **160**, 259–268 (2002)], akzeptiert bei Surf. Coat. Technol.
- B. Briehl and H. M. Urbassek, *Simulation of sheath dynamics and current non-uniformity in plasma-immersion ion implantation of a patterned surface*, J. Appl. Phys. **93**, 4420–4431 (2003)