# INVESTIGAÇÃO DO EFEITO DA TENSÃO APLICADA NO ALVO EM IMPLANTAÇÃO IÔNICA POR IMERSÃO EM PLASMA COM CAMPO MAGNETICO EXTERNO

E.J.D.M. Pillaca<sup>\*</sup>; K.G. Kostov

UNESP, Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá, Rua Ariberto Pereira da Cunha, 333, 12.500-000, Guaratinguetá, SP

Recebido: 26 de julho, 2008; Revisado: 15 de setembro, 2008

Palavras-chave: Implantação iônica por imersão em plasma, simulação, campo magnético.

#### RESUMO

Usando o código computacional KARAT em geometria cilíndrica foi investigado o efeito da tensão do alvo no processo de implantação iônica por imersão em plasma com campo magnético externo. Encontramos que a aplicação de um campo magnético transversal em relação ao campo elétrico suprime a expansão da bainha, gerando uma região com alta densidade de plasma ao redor do alvo. Por outro lado, a densidade de corrente iônica de implantação apresenta uma distribuição não uniforme, mostrando uma dose maior no centro do alvo. Esses resultados são explicados em termos da ionização em um sistema de campos cruzados **ExB** devido as colisões dos elétrons com o gás residual.

## ABSTRACT

Using the computer code KARAT in cylindrical geometry the effect of the target bias in the process of plasma immersion ion implantation with external magnetic field was investigated. It is found that the application of static magnetic field transversal with respect to the electric field suppresses the sheath expansion, generating a region with high plasma density around the target. On the other hand, the implanted ion current density presents a distribution not uniform, showing a bigger dose in the center of the target. These results are explained in terms of ionization in a **ExB** system due to the electrons collisions with the background gas.

## 1. INTRODUÇÃO

Implantação iônica por imersão em plasma (3IP) é um processo físico eficiente para o tratamento e modificação das propriedades superficiais (desgaste, corrosão, oxidação, fadiga) dos materiais contendo partes irregulares e complexas [1,2]. Neste processo, a amostra é imersa dentro do plasma gerado na câmara de vácuo. Posteriormente, pulsos de alta tensão negativo são aplicados no alvo. Os íons positivos extraídos do plasma são acelerados em direção perpendicular à superfície do substrato colidindo simultaneamente com todas as partes da superfície em incidência normal (*conformal implantation*), fazendo com que esta técnica seja adequada para o tratamento de peças de formas complexas. Desta maneira, o processo garante uma implantação uniforme com um tempo de tratamento independente do tamanho das peças. Além disso, o processo é relativamente simples, sendo possível no mesmo processo a implantação de grandes áreas, com uma dose maior à da implantação convencional [3,4].

#### 2. MODELO TEÓRICO

Quando uma seqüência de pulsos negativos de alta tensão (tipicamente entre 10 e 100 kV, 10 µs de duração e centenas de Hz de taxa de repetição) é aplicada a um alvo imerso em plasma, três fases de acordo ao tempo de escala físico podem ser distinguidas.

Primeiro, para um tempo aproximadamente igual ao inverso da freqüência eletrônica do plasma,  $\omega_{pe}^{-1}$  (em torno de alguns ns), os elétrons do plasma próximos ao alvo são repelidos, enquanto os íons muito mais massivos que os elétrons permanecem na mesma posição, formando uma região com carga positiva chamada bainha iônica. Esta região é caracterizada pela espessura de bainha s<sub>0</sub> [5]

$$s_0 = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 V}{en_0}} \tag{1}$$

onde: *V* é a tensão aplicada,  $n_0$  é a densidade do plasma,  $\varepsilon_0$  é a permissividade do vácuo e, *e* é a carga elementar.

Segundo, quando o tempo após a aplicação do pulso é aproximadamente igual ao inverso da freqüência iônica do plasma,  $\omega_{pi}$ -<sup>1</sup>, o campo elétrico resultante na bainha acelera gradualmente os íons em direção ao alvo. Quando os íons são acelerados a partir de suas posições iniciais, eles atingem o alvo com energias diferentes. Na medida em que os íons extraídos da bainha são implantados, a densidade de corrente iônica aumenta até atingir um valor máximo. Logo depois que os íons da bainha são esgotados, novos íons são extraídos do plasma e acelerados na direção ao alvo. Devido à conservação de carga, a bainha se desloca para dentro do plasma, desta maneira descobrindo novos íons para serem implantados.

Terceiro, para um pulso de tensão com longa duração, tipicamente dezenas de  $\omega_{pi}^{-1}$ , a expansão da bainha, assim como

<sup>\*</sup> elver\_jdd@feg.unesp.br

a densidade da corrente atingem um estado estacionário, descrito pela lei de Child-Langmuir:

$$j_{CL} = \frac{4}{9} \varepsilon_0 \left(\frac{2e}{M}\right)^{1/2} \frac{V^{3/2}}{R_c R_s(t)\beta^2}$$
(2)

onde *M* é a massa do íon,  $R_s e R_t$  são a bainha e o raio do alvo, respectivamente, e  $\beta$  é uma função tabelada que depende de  $R_s / R_t$ .

O conhecimento detalhado da dinâmica da bainha durante o processo 3IP é muito importante para a determinação correta da dose implantada no alvo. Por isso o processo de expansão da bainha está sendo estudado e na literatura há vários modelos teóricos [6,7]. Por causa da complexidade do problema todos os modelos existentes (em geometrias planas, cilíndricas ou esféricas) são unidimensionais e são baseados no trabalho do Lieberman [8].

A uniformidade de implantação sobre a superfície do material a ser tratado depende em maior parte da dinâmica da bainha. Portanto, o conhecimento do comportamento da bainha é de grande interesse neste processo. Uma possibilidade para controlar a expansão da bainha é a incorporação de um campo magnético externo [9]. A aplicação de um campo magnético transversal em relação ao campo elétrico radial cria um sistema de campos ExB cruzados que permite aumentar a densidade de plasma e reter a expansão da bainha, resultando numa maior corrente de implantação, e conseqüentemente, um tratamento mais rápido e uma dose retida mais alta em relação ao processo de implantação convencional.

#### 3. SIMULAÇÃO NUMÉRICA

Simulações computacionais empregando o algoritmo PIC (Particle-in-Cell) tornaram-se um instrumento muito poderoso para o estudo de fenômenos em física de plasma. A partir da década de 90, as simulações eram aplicadas com sucesso no estudo de implantação iônica por imersão em plasma [10,11]. As primeiras simulações PIC em 3IP foram bastante simples, com uma só dimensão e usavam poucas superpartículas. Com o tempo novos algoritmos numéricos foram desenvolvidos, e com a chegada de novas gerações de computadores bem mais poderosos, foram realizadas simulações em duas e três dimensões.

Existem assuntos de grande importância para o estudo da eficiência do tratamento 3IP que foram abordados mediante simulação numérica, como por exemplo, a distribuição de dose em alvos com geometria complexa [12, 13,14], ou o processo de expansão da bainha [15,16]. Os resultados encontrados pelos autores mostraram estar em bom acordo com os dados experimentais. Porém, as simulações numéricas empregando algoritmo PIC, que se tornam cada vez mais sofisticadas e realistas, podem ser empregadas com sucesso na otimização do tratamento 3IP.

Neste trabalho apresentamos os resultados obtidos mediante simulação computacional de um sistema 3IP com campo

magnético externo, conduzida em geometria cilíndrica em duas dimensões (*r,z*). Esta simulação utiliza o código computacional KARAT [17], que é baseado no método PIC para o calculo do campo eletromagnético e o movimento de partículas carregadas. O algoritmo probabilístico Monte Carlo é empregado para simular o processo de ionização que ocorre devido às colisões dos elétrons do plasma com as moléculas do gás residual.

A emissão de elétrons secundários que são ejetados como resultado do impacto dos íons com o alvo também é incluída na simulação. O coeficiente de emissão (número de elétrons secundários liberados por impacto de íon),  $\gamma$ , é determinado pela relação empírica  $\gamma = \gamma_0 \sqrt{V(kV)/20}$  e que é tabelado em [18] para íons e alvos diferentes. Neste caso, o aço inoxidável é considerado como alvo. Uma grade retangular de  $\Delta Z = 4,0$  mm e  $\Delta R = 1,3$  mm, com o tempo de passo de 2,0 x 10<sup>-12</sup> s foram considerados como parâmetros numéricos.

A disposição geométrica de nosso sistema é mostrada na figura 1. Uma câmara de vácuo cilíndrica com dimensões r =13,0 cm e z = 38,0 cm, preenchida completamente com gás nitrogênio em pressão 0,4 Paé considerada. O alvo que será implantado com raio 1,5 cm e comprimento 10,0 cm está posicionado no cento da câmara. As dimensões da simulação são próximas aos tamanhos físicos da câmara de vácuo do sistema 3IP experimental que se encontra no LAP/INPE. Fora desta câmara são instaladas duas bobinas que produzem um campo magnético não uniforme. A amplitude do campo magnético é ajustada através de uma corrente continua de 5 A que percorre cada bobina.

A simulação é iniciada com o alvo imerso no plasma uniforme de nitrogênio, com densidade  $n_o = 0.5 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$  e temperatura eletrônica  $T_e = 1 \text{ eV}$ . Posteriormente, um pulso de alta tensão negativa com rampa linear de subida de 0,2 µs é aplicada no alvo até atingir uma amplitude máxima na faixa de -5,0 kV e -25,0 kV, logo depois a tensão é mantida constante durante toda a simulação.

#### 4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

campo magnético estático não uniforme produzido pelas bobinas foi ajustado em 25,0 G no centro da superfície do alvo (R = 1,6 cm, Z = 19,0 cm) como valor de referência.

Quando uma alta tensão negativa é aplicada no substrato, uma distribuição de linhas de campo elétrico é criado, como é mostrado na figura 1. A configuração dos campos presentes na câmara de vácuo (ver figura 1) produz o denominado sistema de campos cruzados ExB, onde as partículas carregadas são forçadas a realizar um movimento de deriva, com

velocidade  $\vec{v_d}$ . Na aproximação do centro guiado, as partículas dentro do sistema  $E \times B$  giram com velocidade de deri-

va,  $\overrightarrow{v_d} = \frac{E \times B}{B^2}$ . Como podemos observar na figura 1, com a

exceção das bordas no alvo, o campo elétrico é radial. Supondo que o campo elétrico acima do centro do alvo é uniforme, então a velocidade de deriva da partícula numa posição radial fixa com direção azimutal é  $v_{\theta} = \frac{E}{B_z(z)}$ , onde  $B_z$  possui uma distribuição axial, semelhante à distribuição em uma garrafa magnética. Desta maneira, a velocidade de deriva do elétron depende da coordenada axial z, atingindo um máximo justo na metade do alvo (Z = 19,0 cm) onde a amplitude do campo magnético tem seu valor mínimo.



Figura 1 - Representação do sistema investigado. 1-linhas do campo elétrico e magnético. 2-Bobinas magnéticas. 3-Alvo. 4-Câmara de vácuo.

As partículas orbitando o alvo com  $v_{\theta}$  são mostradas no espaço de fase nas figuras 2 e 3. Como se pode observar, a população de elétrons magnetizados possuem uma extensão de aproximadamente 4,0 cm e 12,0 cm e na direção radial e axial, respectivamente. Durante a órbita, os elétrons colidem e ionizam as moléculas de gás residual. Como conseqüência, os elétrons são capturados e confinados pelo campo magnético presente. Desta maneira a densidade de plasma local cresce (como é mostrado na figura 4) criando-se uma maior concentração na região onde os campos elétrico e magnético são perpendiculares. Por outro lado, pesquisa realizada para um sistema 3IP com campo magnético uniforme (onde as linhas de campo foram consideradas paralelas à superfície do alvo), a densidade do plasma quase não é alterada [19] (figura 5). Isso é devido ao fato que os elétrons orbitam em torno das linhas de campo, mas logo são perdidas na direção axial sem conseguir ionizar o gás, deixando a densidade de plasma praticamente inalterado. Desta forma, um campo magnético não uniforme confina os elétrons do plasma, contribuindo ao aumento na densidade de plasma.

A configuração espacial do plasma num tempo de 0,8  $\mu$ s é mostrada nas figuras 6 - 10, para tensões de -5,0 kV, -10,0 kV, -15,0 kV, -20,0 kV e -25,0 kV. Como podemos ver, regiões bem definidas de plasma com alta densidade na vizinhança do alvo são criadas, observando-se uma concentração maior acima da metade do alvo (Z = 19,0 cm). Por outro lado, a borda da bainha é mantida inalterada com a exceção da região do lado esquerdo do alvo onde é deslocada para dentro do plasma com o incremento da tensão. Pode-se também observar que a borda da bainha apresenta uma forma bem definida (entre 10,0 cm < Z < 30,0 cm) parecido à letra M, mantida praticamente inalterado para todas as tensões.



Figura 2 - Momento azimutal dos elétrons vs a distância axial para um tempo de simulação de 0,8 µs.



Figura 3 - Momento azimutal dos elétrons vs a distância radial para um tempo de simulação de 0,8 µs.



Figura 4 - Distribuição da densidade de elétrons em presença de um campo magnético não uniforme para V = -10,0 kV.

Formações de pequenas regiões de elétrons confinados no lado superior esquerdo do alvo são observadas nas figuras 6

- 8. A formação dessas regiões pode ser relacionada com a figura 1. Como pode ser deduzida, a convergência das linhas do campo elétrico no canto esquerdo do alvo produz um campo elétrico intenso. Desta maneira o sistema de campos cruzados ExB criado nessa região confinam os elétrons magnetizados que por sua vez colidem com as moléculas do gás residual, produzindo uma ionização eficiente. Por outro lado, essas formações não são observadas em tensões maiores que –15,0 kV (figuras 9 e 10). Isso é devido ao fato que o campo elétrico é bem mais intenso e, portanto o campo magnético não consegue capturar e confinar aos elétrons com alta velocidade, deixando-as fugir para dentro do plasma.



Figura 5 - Distribuição da densidade de elétrons em presença de um campo magnético uniforme para V = -10,0 kV.



Das figuras 6 - 10 observamos que o aumento de tensão no alvo incrementa a espessura de bainha (a espessura da bainha é definida como a distância entre a borda da bainha e a superfície do alvo), assim como também, formações de regiões com alta densidade de plasma. Este comportamento é analisado na figura 11, onde é mostrado o gráfico da densidade máxima de plasma em função da tensão. O cálculo foi realizado na região acima do centro do alvo (Z = 19.0 cm). Como podemos ver, um aumento de tensão no alvo em cinco vazes, resulta em um aumento da densidade do plasma em aproximadamente duas vezes.



Figura 7 - Distribuição espacial dos elétrons para V = -10 kV e tempo de simulação de 0.8 μs.



Figura 8 - Distribuição espacial dos elétrons para V = -15,0 kV e tempo de simulação de 0,8 μs.



Figura 9 - Distribuição espacial dos elétrons para V = -20,0 kV e tempo de simulação de 0,8 μs.

Na figura 12 comparamos o comportamento da espessura da bainha em função da variação de tensão para um sistema 3IP, com e sem campo magnético. Como pode ser analisado a partir das figuras 6 - 10, a presença de um campo magnético não uniforme confina o plasma, gerando regiões com alta densidade onde o campo elétrico e magnético são perpendiculares. O aumento da densidade devido à aplicação do campo magnético em redor do alvo reduz de maneira significativa o processo de expansão da bainha.



Figura 10 - Distribuição espacial dos elétrons para V = -25,0 kV e tempo de simulação 0,8 μs.



Figura 11 - Densidade de plasma vs tensão medido no centro do alvo (Z = 19.0 cm) para um tempo de simulação de 0,8 µs.

Na figura 13(a) é mostrada a distribuição da densidade de corrente ao longo do alvo para quando a tensão foi variada entre –5 kV e –25 kV. A simulação mostra que a densidade de corrente aumenta de forma monótona com o incremento da tensão. Sem embargo, é observada que a distribuição não é uniforme, registrando-se uma maior concentração no seu centro. Isso pode ser relacionado com a alta concentração de plasma formado na região central da câmara de vácuo, de onde os íons são acelerados pelo campo elétrico em direção ao alvo. Adicionalmente, na figura 13(b) comparamos a distribuição de densidade de corrente para tensões de -10 kV e -20 kV em presença de duas configurações diferentes de campo magnético, conseguido através de uma disposição

adequada das bobinas mostradas na figura 1. A primeira configuração a ser considerada é a mesma usada para a obtenção da distribuição da densidade de corrente mostrada na figura 13(a). Enquanto a segunda foi obtida considerando um arranjo tipo bobina de Helmholtz, o qual fornece um campo magnético uniforme. Como pode ser deduzida a partir da figura 13(b), em presença de B não uniforme a dose de corrente iônica implantada é maior em relação a B uniforme. Quantitativamente, o aumento encontrado foi de aproximadamente 50 %, mostrando uma distribuição não uniforme com maior concentração no centro do alvo. Certamente, a diferença desse aumento é devido ao fato da presença dos espelhos magnéticos que conseguem confinar o plasma na região onde o campo magnético possui seu valor mínimo, enquanto num campo magnético uniforme os elétrons orbitam em torno das linhas de campo sendo posteriormente perdidas em direção axial.



Figura 12 - Espessura da bainha em função da tensão medida no centro do alvo (Z = 19.0 cm) para um sistema 3IP com e sem campo magnético.



Figura 13(a) - Densidade de corrente incidente no alvo para diferentes tensões em função da distância Z.



Figura 13(b) - Densidade de corrente incidente no alvo para tensões de -10,0 kV e -20,0 kV com campo B uniforme e não uniforme em função da distância *Z*.

#### 5. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi estudado mediante simulação numérica o efeito da tensão no processo 3IP com um campo magnético externo. Com o incremento da tensão desde -5,0 kV até - 25,0 kV a simulação mostrou que a presença de um campo magnético não uniforme confina o plasma, estabelecendo-se regiões com alta densidade na vizinhança do alvo. Por outro lado, foi encontrado que o aumento da densidade de plasma influi no incremento da corrente de implantação em aproximadamente 50 % em relação a um sistema 3IP com campo magnético uniforme. Finalmente, foi observado que a alta densidade de plasma também influencia na distribuição de corrente, tornando-a não uniforme sobre a superfície do alvo, com maior concentração em seu centro.

# REFERÊNCIAS

- HOCHMAN, R.F., "Ion Implantation" Metals Handbook, 9<sup>th</sup> Edition, New York, 1980.
- CONRAD, J.R.; RADTKE, J.L.; DODD, R.A; WORZALA, F.J.; TRAN, N.C., Journal of Applied Physics 62 (1987) 4591.
- PELLETIER, J.; ANDERS, A., *IEEE Transactions on Plasma* Science 39 (2005) 1944.
- 4. CONRAD, J. R.; BAUMANN, S.; FLEMING, R.; MEEKER, G.P., Journal of Applied Physics 65 (1989) 1707.
- ANDERS, A., Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation & Deposition, John Wiley & Sons, New York, 2000.
- 6. SHERIDAN Jr., T.E.; GORRE, J.A., *IEEE Transactions on Plasma Science* 17 (1989) 884.
- 7. CONRAD, J.R., Journal of Applied Physics 62 (1987) 777.
- 8. LIEBERMAN, M.A., Journal of Applied Physics 66 (1989) 2926.
- KONSTANTIN, K.G.; BARROSO, J.J., *IEEE Transactions on Plasma Science* 34 (2006) 1127.
- REJ, D.J.; WOOD, B.P.; FAEHL, R.J.; FLEISCHMANN, H. H., Journal of Vacuum Science and Technology B 12 (1994) 861.
- 11. FAEHL, R.; De VOLDER, B.; WOOD, B., Journal of Vacuum Science and Technology 12 (1994) 884.
- MIYAGAWA, Y.; NAKADATE, H.; TANAKA, M.; IREYAMA, M.; MIYAGAWA, S., Surface and Coatings Technology 186 (2004) 2.
- CORNET, C.; KWOK, D.T.K.; BILEK, M.M.M.; McKEN-ZIE, D.R., Journal of Applied Physics 96 (2004) 6045.
- KELLER, G.; PAULUS, M.; MANDAL, S.; STRITZER, B.; RAUSCHENBACH, B., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 148 (1999) 64.
- BRIEHL, B.; URBASSEK, H.M., Surface and Coatings Technology 156 (2002) 131.
- BRIEHL, B.; URBASSEK, H.M., Surface and Coatings Technology 160 (2002) 259.
- 17. TARAKANOV, V.P. User's Manual for Code Karat, Berkeley Research Associates, Berkeley, VA, USA, 1994.
- SHAMIM, M.M.; SCHEUER, J.T.; FETHERSTON, R.P.; CONRAD, J. R., Journal of Applied Physics 70 (1991) 4756.
- KOSTOV, K.G.; HONDA, R.Y.; KAYAMA, M.E.; ALGATTI, M.A.; MOTTA, R.P.; PILLACA, E.J.D.M., 8<sup>th</sup> Brazilian Meeting on Plasma Physics. Niterói, RJ, Brasil, 2005.