

Simulación de un sistema de bombardeo de iones

Eric Fuentes Rico,^{*} Samir de la Cruz P.,[†] and **Supervisor:** Edgar Patiño[‡]

*Departamento de Física
Universidad de los Andes*

(Dated: June 20, 2023)

Se realizó una simulación para la ionización y neutralización que sucede entre los átomos neutros de argón y los electrones ionizantes durante los procesos de molienda por bombardeo de iones. Para ello se consideró al plasma de descarga (la mezcla consistente de los átomos neutros, los iones y los electrones) como un gas ideal que sigue las leyes de Richardson y de Child para el movimiento de cargas en el vacío y se modeló la fuente de iones KDC-10 de Kaufman, cuyos parámetros de trabajo están dados por el controlador KSC de Kaufman. Además de permitir observar el comportamiento cualitativo del sistema de molienda, la simulación también brinda el flujo de iones que llegan a la muestra y permite así relacionar los parámetros de entrada de la fuente (voltaje y corriente del cátodo, ánodo, haz, acelerador y neutralizador) con dicho flujo para tener así también un entendimiento cuantitativo del proceso.

I. INTRODUCCIÓN

La tecnología de haz de iones o bombardeo por iones fue desarrollada por la NASA en 1960 como tecnología de propulsión eléctrica (EP) para satélites y naves espaciales [1, 2]. Sin embargo, esta tecnología tiene numerosas aplicaciones adicionales como por ejemplo la introducción de defectos en la superficie del material contra el cual impacta el haz iónico, depositando así óxidos, carbono tipo diamante y otras sustancias con el fin de crear recubrimientos útiles en hardware mecánico y óptico [3]. También se ha utilizado para crear los cabezales lectura/escritura utilizados en discos duros de computación y filtros ópticos de película delgada para aplicaciones en telecomunicación [4].

El funcionamiento de una fuente de haz de iones consiste en producir iones y acelerarlos a altas velocidades hasta que golpeen una muestra trabajada. Dichos iones son dirigidos para formar un haz en el que estos sean mono-energéticos y se aumente su velocidad al orden de km/s [5]. Además, la fuente del haz de iones está compuesta de cinco elementos clave: Descarga, cámara, fuente de electrones, rejillas y neutralizador.

El bombardeo con iones de baja energía puede servir para crear láminas delgadas [6] (como las presentes en infinidad de objetos, desde pantallas táctiles hasta las cuchillas de afeitar) de forma más sencilla que con otras técnicas tradicionales y también se ha conseguido crear láminas muy finas con una alta calidad cristalina de un óxido a partir de otro óxido. Tras estos hallazgos, ahora se está probando con materiales distintos para investigar las nuevas e interesantes propiedades físicas que otros materiales puedan ofrecer. [6]

Estos procesos de milling (molienda) con bombardeo de iones no implican reacciones químicas con la muestra, pues se utilizan gases nobles como el Argón para crear el haz. Son procesos estrictamente mecánicos y es completamente análogo al proceso de sputtering (pulverización catódica).

Se ha probado el objetivo y eficacia de las fuentes de iones industriales al modelar y comparar los parámetros de entrada/descarga de voltaje y corriente en función del flujo del gas entrante y la corriente de neutralización. Se puede observar un extensivo trabajo sobre esto en [5], donde se encuentra una fuerte relación entre el voltaje del haz de descarga V_d y la corriente de emisión del filamento.

Hay muchas aplicaciones en las que esta optimización de los parámetros puede incursionar: nanodispositivos, circuitos electrónicos integrados, energía solar, naves espaciales, etc. Por este motivo se desarrolló la simulación de un sistema de bombardeo de iones para *Ion Milling*, buscando encontrar una relación entre los parámetros de entrada (voltaje y corriente) y el flujo del haz de iones hacia la muestra. Una buena simulación y la comprensión de cómo se relacionan dichos parámetros podría traducirse, pues, en un menor gasto de recursos en el laboratorio y un posible desarrollo de experimentos más complejos.

II. MONTAJE TEÓRICO Y EXPERIMENTAL

A. Equipo experimental y funcionamiento del cañón de iones

El bombardeo iónico es una técnica física que consiste en lanzar e impactar iones de alta velocidad contra la superficie de una muestra preparada, permitiendo así depositar y/o desprender material. En el laboratorio, este proceso se realiza dentro de una cámara de vacío (mostrada en la figura 1), donde en principio el haz

^{*} ef.fuentes@uniandes.edu.co

[†] sj.delacruz@uniandes.edu.co

[‡] epatino@uniandes.edu.co

de iones es generado a partir de una fuente de iones KDC-10 de Kaufman (mostrado en la figura 2) y luego dirigido hacia la muestra, realizando así el grabado y/o deposición.



FIG. 1. Cámara de vacío donde el proceso de bombardeo toma lugar. Imagen tomada de [7].

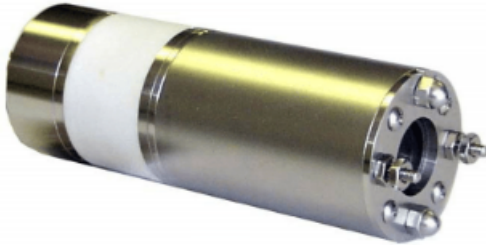


FIG. 2. Fuente de iones KDC 10. Imagen tomada de [8]

Para controlar el proceso se utiliza el controlador de fuente de Kaufman (KSC), el cual se muestra en la figura 3 y permite variar los parámetros de trabajo y la formación del haz de iones. Esta consola cuenta con tres controladores: el *KSC Auto Controller* (que selecciona el tipo de trabajo a realizar y mantiene el flujo de masa de gas hacia la fuente de iones), el *Kaufman Source Controller* (que modifica los parámetros de formación del haz de iones) y, finalmente, el *Mass Flow Controller*, que regula el flujo de masa de gas (argón de alta pureza de 99.999+ %) que entra al cañón y que funciona en conjunto con el controlador KSC.



FIG. 3. Controlador de fuente de alimentación KSC para CC cuadrado para fuente de iones KDC 10. Imagen tomada de [9]

La fuente KDC 10 es una fuente de iones con rejilla que usa una corriente de descarga para generar iones y tiene una forma cilíndrica con 39 mm de diámetro y 61 mm de alto (ver figuras 4 y 5) y genera una corriente de haz de iones de argón desde aproximadamente 100 eV hasta 1200 eV, inyectando 4 centímetros cúbicos estándar por minuto (SCCM) de flujo de gas para una eficiencia óptima de generación de iones. Los distintos componentes de la fuente son: un cátodo interno que se utiliza para generar electrones termo-emitidos por descarga directa y que ionizan el gas; un ánodo que se utiliza para elevar el potencial del haz; un sistema óptico que consta de dos rejillas de grafito y es utilizado para acelerar el haz de iones; y por ultimo, el neutralizador, utilizado para formar un haz de iones neutralizados que golpean la muestra.

1. Fuente de iones KDC 10

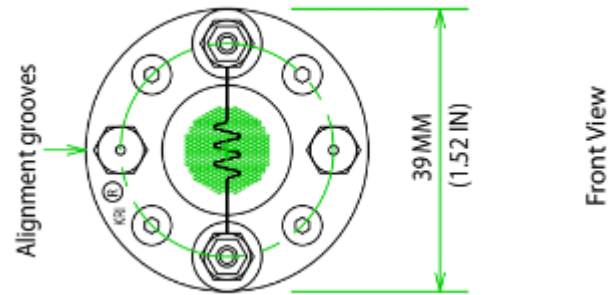


FIG. 4. Vista frontal de la fuente de iones KDC 10. Imagen tomada de [8]

Los parámetros de operación estándar para la fuente KDC 10 son:

Cathode: 6V, 20A.

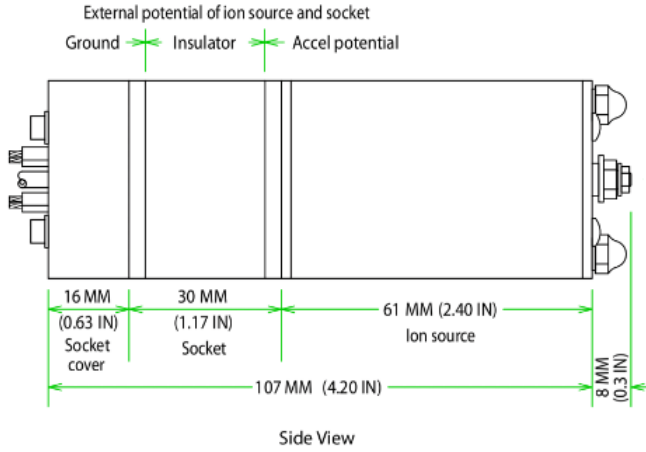


FIG. 5. Vista lateral de la fuente de iones KDC 10. Imagen tomada de [8]

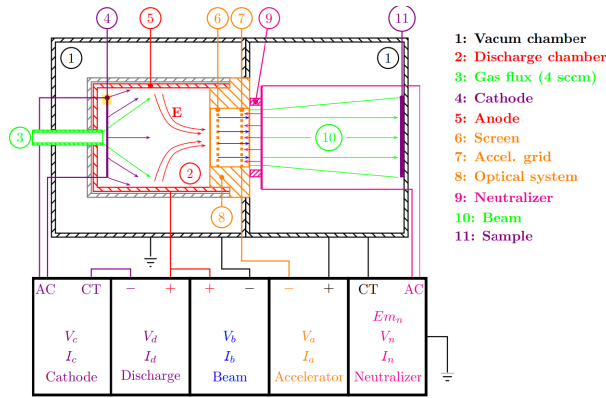


FIG. 6. Diagrama esquemático de una fuente de iones DC como la KDC-10 de Kaufman. Los iones son generados por una descarga dentro del dispositivo, para luego ser acelerados a través del sistema óptico, neutralizados y finalmente chocar con la muestra. Imagen tomada de [7].

Discharge: 100V, 1A.
Beam: 1000V, 100mA.
Accelerator: 500V, 100 mA.
Neutralizer: 18v, 20A.

El controlador automático KSC mantiene el flujo del gas a la fuente de iones y además proporciona control y secuenciación para todas las fuentes de alimentación. Al iniciar el funcionamiento, el argón neutral es suministrado a la fuente de iones a través de un controlador de flujo de masa (MFC). Debido a que el argón es un gas noble y sus átomos se encontraban previamente en un recipiente en reposo, el comportamiento de estos últimos puede modelarse por medio de la distribución de Maxwell-Boltzmann a la temperatura ambiente del laboratorio:

$$f(v) = \left[\frac{m}{2\pi kT} \right]^{\frac{3}{2}} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, \quad (1)$$

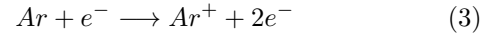
donde $T[K]$ es la temperatura del laboratorio, $k [\frac{J}{K}]$ es la constante de Boltzmann, $m [Kg]$ la masa de los átomos de argón y $v [\frac{km}{s}]$ sus velocidades.

Posteriormente, el módulo *Cathode* calienta el cátodo de tungsteno de la fuente KDC-10 hasta el nivel de emisión de electrones termo-iónicos. Debido a que todo el proceso sucede en el vacío, el efecto de carga espacial se vuelve importante y, por ende, la termo-emisión de iones (también conocida como "Efecto Edison") se rige por la ley de Richardson [10]:

$$J_R = (1 - r)A_0 T^2 e^{-\frac{\phi}{kT}}, \quad (2)$$

donde J_R es la densidad de corriente de Richardson, $\phi[J]$ es la función trabajo del tungsteno, $(1 - r)A_0 = 0.8 \times 10^6 [\frac{A}{m^2 K^2}]$ para el caso del tungsteno y la temperatura alcanzada por el cátodo es usualmente $T = 2500C = 2773, 15K$. [10]

Un potencial es entonces aplicado entre el ánodo y el cátodo por el módulo *Discharge* para agregar energía a los electrones termo-emitidos, generando que estos golpeen los átomos neutros del gas y les expulsan un electrón, formando así iones (la mezcla de estos electrones y los iones es denominada *plasma de descarga*) por medio de la reacción



Los electrones "sobrantes" producto de la ionización son atraídos y absorbidos por el ánodo, mientras que los iones positivos del plasma son atraídos por la pantalla, la cual se encuentra a un potencial V_b controlado por el módulo *Beam*. Estos iones de Ar^+ pasan a través de dicha pantalla de enfoque y son entonces acelerados por el voltaje negativo de la rejilla aceleradora (la segunda parte del sistema óptico de iones), la cual es controlada por el módulo *Acceleration*. Estas dos placas del sistema óptico, al estar cargadas, actúan como 2 placas paralelas que aceleran los iones siguiendo la ley de Child para el movimiento de cargas en el vacío:

$$J_c = \frac{4\epsilon_0}{9} \frac{V_0^{3/2}}{d^2} \sqrt{\frac{2eZ}{M}}, \quad (4)$$

donde $J_c [\frac{A}{m^2}]$ es la densidad de corriente de Child, $V_0[V]$ es el potencial entre las placas, $M [Kg]$ es la masa de los iones, ϵ_0 es la permitividad del vacío, $e[C]$ la carga fundamental, $Z = 1$ es el número de carga (o sea, cuántos electrones fueron ionizados del Ar neutral) y $d[mm]$ es la separación entre las placas, que tiene un valor de 2mm.

A la salida de la cámara aceleradora, los iones de Ar^+ son neutralizados por los electrones previamente emitidos por el neutralizador por medio de la ley de Richardson (ecuación 2). Es debido a esto que la rejilla de aceleración es puesta a un potencial negativo, puesto que así se garantiza que el haz de Ar^+ sea atraído y acelerado hacia el neutralizador, mientras que los electrones del neutralizador permanecen así alejados y por fuera de la cámara de descarga del cañón KDC-10.

Para que el haz de iones sea totalmente neutralizado, se requiere que la magnitud de la corriente de neutralización que sale del neutralizador sea igual a la magnitud de la corriente del haz (I_b) que pasa por el sistema óptico, la cual está dada por la ecuación 4. Esto se puede lograr gracias al botón *Emission mAmps* del módulo *Neutralizer* del controlador KSC, el cual ajusta porcentualmente la corriente de termo-emisión del neutralizador en proporción a I_b de tal manera que un valor de 100 es el valor adecuado para dicho módulo (puesto que equivale a decir que la magnitud de la corriente negativa del neutralizador sea el 100 % de la del haz de iones positivos). Además, en caso de que esta corriente de emisión se baje de cierto umbral programado por el usuario, el controlador KSC también posee un LED que advierte de ello.

Finalmente, los átomos neutros de Ar siguen su trayecto e impactan la muestra de trabajo, la cual está conectada a tierra para facilitar dicho proceso. Todo el procedimiento es netamente mecánico gracias a la neutralidad de los átomos del gas y, en teoría, el flujo de iones y la densidad de iones que llega a la muestra están dados, respectivamente, por las ecuaciones [11]:

$$\Gamma_b = \frac{4I_b}{\pi e Z D^2} \left[\frac{\text{iones}}{m^2 s} \right] \quad (5)$$

$$n_b = \frac{4\epsilon_0 V_0}{9e Z d^2} \left[\frac{\text{iones}}{m^3} \right] \quad (6)$$

donde $D[\text{mm}]$ es el diámetro con el que el haz de iones sale de la rejilla aceleradora y las demás variables y constantes son como ya se había definido antes para las demás ecuaciones.

III. RESULTADOS (SIMULACIÓN)

Los plasmas son gases y, por ende, consisten de un gran número de átomos que interactúan constantemente mediante interacciones electrostáticas, químicas y colisiones. Debido a que el argón es un gas noble y a que el campo eléctrico de los iones es despreciable en comparación al de los componentes del cañón, al interior de la cámara de descarga las principales interacciones son únicamente las colisiones, las cuales a su vez se clasifican

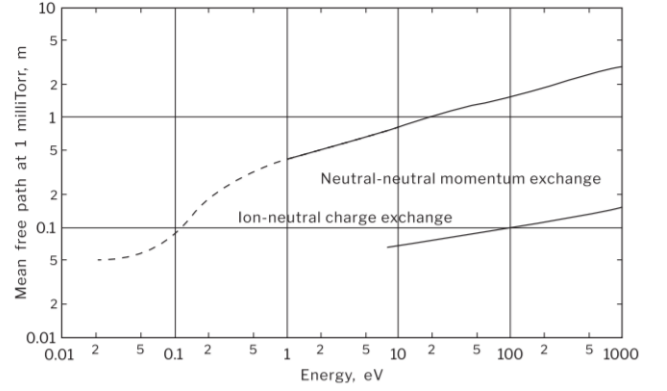


FIG. 7. *Mean free path* de los iones de argón para una presión de 1 mTorr.

en tres tipos: recombinación de carga, intercambio de carga e intercambio de momentum; de las cuales la simulación únicamente modela los dos primeros tipos mediante los procesos de neutralización e ionización, respectivamente.

En la simulación se representa al gas de argón como un gas ideal compuesto por un gran conjunto de partículas esféricas que inicialmente entran a la cámara con una distribución de velocidades de Maxwell-Boltzmann (ecuación 1) y que sólo interactúan con las paredes a través de colisiones perfectamente elásticas. El flujo real de argón que entra a la cámara es de 4 SCCM, lo cual equivale a aproximadamente a $1,08 \times 10^{12} \left[\frac{\text{átomos}}{s} \right]$ (o sea, un billón de átomos). El equivalente a este flujo dentro de la simulación son 20 átomos entrantes por segundo, de tal manera que se cumple la relación

$$1 \text{ Atomo}_{(\text{Simulación})} = 5,4 \times 10^{10} \text{ Atomos}_{(\text{Laboratorio})} \quad (7)$$

Para simular la ionización del gas se emiten electrones desde el cátodo por medio de la ley de Richardson. Para que se realice dicha emisión, el voltaje del cátodo tiene que superar un voltaje de umbral (que en el caso de esta simulación es 11V) y, adicionalmente, el voltaje de descarga acelera los electrones hasta que estos alcanzan el ánodo. Siguiendo la notación mostrada en la figura 6, el campo eléctrico dentro de esta cámara de descarga se modeló a través de la ecuación

$$\vec{E} = -c_1(V_d + V_b)(y - a) * \hat{j} + c_2 V_d * \hat{i}, \quad (8)$$

donde c_1, c_2 son constantes que se calibran para hacer entendible la simulación. Este campo genera una fuerza armónica respecto a $y = a$ (el eje axial de la cámara) y una fuerza constante hacia el sistema óptico.

La interacción entre los átomos de argón y los electrones tiene lugar cuando el electrón alcanza la órbita

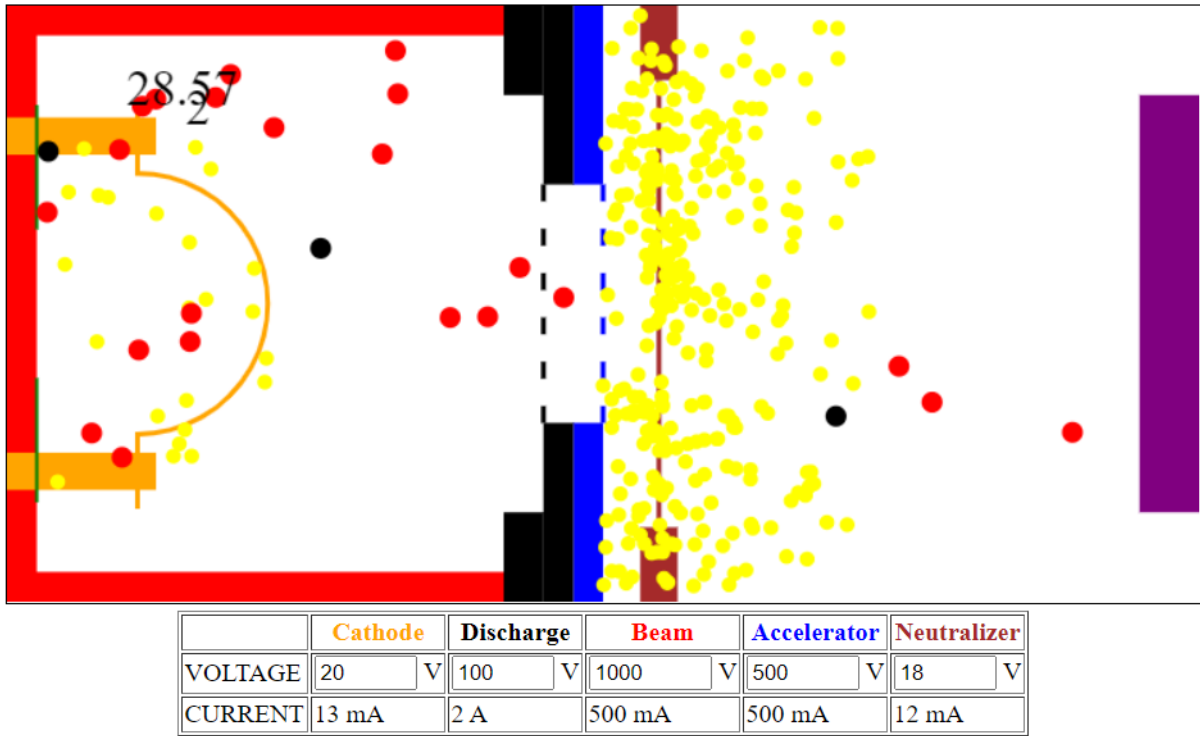


FIG. 8. Captura de pantalla de la simulación implementada para el cañón de iones. Las paredes rojas corresponden al ánodo, el arco naranja al cátodo, las rejillas negra y azul al sistema óptico, la línea vinotinto al neutralizador y la barra morada a la muestra a trabajar. Los electrones son los discos amarillos, los átomos neutros de Ar son los discos negros y los iones Ar^+ son los discos morados. El contador superior equivale al tiempo que lleva funcionando la simulación, mientras que el contador inferior equivale al flujo de átomos que golpea la muestra, dado por la ecuación 7.

del átomo debido a que, en la realidad, si la velocidad relativa entre el electrón y el átomo es suficiente, se romperá un enlace electrónico y el átomo quedará ionizado. En la simulación esto se modela haciendo que el estado de los átomos de argón cambie de "neutro" a "cargado positivamente" en el momento en el que la circunferencia del electrón toca cualquier punto de la circunferencia del átomo de argón.

En la etapa final, los iones positivos se aceleran utilizando el campo eléctrico entre la cámara, la rejilla y el neutralizador, el cual también emite electrones siguiendo la ley de Richardson. siguiendo la notación mostrada en la figura 6, el campo eléctrico dentro de las dos placas del sistema óptico es modelado por la ecuación

$$\vec{E} = c_3(V_b + V_a) * \hat{i}, \quad (9)$$

donde c_3 es una constante que se calibra para hacer entendible la simulación. Adicionalmente, el proceso mediante el cual se cambia el estado de los iones de Ar^+ de "cargado positivamente" a "neutro" es totalmente análogo al descrito anteriormente para la ionización del argón neutro.

Debido a que se está suponiendo que las colisiones con las paredes son perfectamente elásticas, el código utilizado hace uso de las ecuaciones cinemáticas de conservación de momentum para cambiar la dirección de movimiento de las partículas. Como las partículas de la simulación se asumen como puntuales, la única parte de los discos que realmente presenta interacciones es su centro, pues todo lo demás es meramente representativo. Así pues, cuando el centro de un disco (partícula) choca contra un muro, la componente de su velocidad que es perpendicular a dicho muro cambia de signo, generando así una colisión perfectamente elástica que conserva el momentum.

El resultado final del código de simulación implementado puede ser apreciado en la figura 8.

IV. DISCUSIÓN

A. Validez del modelo ideal

A diferencia de trabajos previos como el de [7] (y como ya se mencionó anteriormente), esta simulación no tuvo en cuenta las colisiones entre los átomos de argón y por ende recrea al gas como ideal. La validez de esta asunción

yace en la gráfica 7 proporcionada por el fabricante de la fuente KDC-10, en la cual se muestra que, para el caso del Argón, el *mean free path* que los átomos poseen a presiones inferiores a los 0.5 mTorr (justo las condiciones de la cámara de vacío) es de aproximadamente 10 cm. Teniendo en cuenta lo anterior y que la dimensión más grande de la cámara del cañón es de apenas 6.1 mm, se puede ver que asumir el gas como ideal es una buena aproximación.

B. Modelado de las corrientes

Las corrientes del cátodo y del neutralizador fueron modeladas con la ley de Richardson (ecuación 2) de manera incompleta ya que se tuvo que asumir que los filamentos de tungsteno en todo momento se mantienen a una temperatura constante de 2773,15 K, cosa que en la práctica no es cierta debido a que dicha temperatura es función tanto del voltaje como de la corriente que circula por los filamentos. Debido a ello, una posible mejoría para futuras simulaciones radicaría en estudiar la relación que hay entre el voltaje, la corriente y la temperatura de un filamento de tungsteno, para poder así programar adecuadamente el comportamiento de las corrientes a medida que los parámetros de la simulación se varían.

Por otro lado, como se había mencionado anteriormente, la corriente que acelera el haz iónico dentro de la rejilla aceleradora fue modelada con la ecuación 4. Un problema que tiene la simulación en este caso es que en el cañón real la distancia que separa las rejillas es de 2mm, lo cual es un espacio bastante grande para acelerar los iones y corresponde a aproximadamente 1/30 de la longitud total del cañón (61mm). Esa misma proporción fue imposible de recrear en los píxeles de la simulación debido a que entonces el tamaño de los iones sería imposible de ver por su diminuto tamaño, resultando así en que los iones de la simulación presentan un tamaño demasiado grande que no refleja bien ni las dimensiones reales del cañón ni el tiempo que realmente pasan dentro de la rejilla aceleradora los iones. Así pues, una simulación futura debe tener esto en cuenta y buscar alguna estrategia para compensarlo, como por ejemplo programar el sistema óptico para que le otorgue una mayor aceleración a los iones mientras se encuentren dentro del sistema óptico.

C. Validez de las expresiones de campo eléctrico

Si bien la ecuación 8 es una aproximación que permite recrear el sistema que enfoca el haz de iones, esta ecuación considera que las paredes de la cámara de descarga son placas rectas, paralelas e infinitas, lo cual no es cierto para la cámara real de la fuente KDC-10, que consiste de un cilindro cargado finito. La solución a la ecuación de Laplace con las condiciones de frontera correspondientes a dicho cilindro no se puede hallar analíticamente, puesto que arroja ecuaciones elípticas que no son integrables. Así pues, una posible mejora para una simulación futura seguramente consistiría en otorgarle al ánodo de la cámara de descarga un campo eléctrico cuya solución sea actualizada punto a punto por medio de métodos numéricos.

V. CONCLUSIONES

1. Usando un modelo de colisiones elásticas fue posible hacer una descripción cualitativa del proceso de operación de una fuente KDC-10 de Kaufman para un proceso de *Ion Milling*.
2. Se pudo mejorar simulaciones previas del proceso de *Ion Milling* al considerar al plasma de descarga dentro de la cámara como un gas ideal debido a su mean-free-path más grande que la cámara misma.
3. Un factor en cuenta para futuras simulaciones es la relación entre los parámetros de corriente y voltaje y la temperatura de los filamentos, pues ello permitiría implementar adecuadamente la ley de Richardson para las nubes de carga eléctrica.
4. Otro factor en cuenta para futuras mejoras es que el campo eléctrico del ánodo de descarga en realidad está dado por ecuaciones elípticas no-integrables, por lo que una mejor aproximación a la realidad consistiría en resolver numéricamente dicho campo.
5. El código utilizado para realizar la simulación fue HTML, lo cual puede traer desventajas frente a otros lenguajes de programación orientada a objetos como *Java* o lenguajes de baja memoria como *C++*. Hacer uso de dichos lenguajes podría traer mayor memoria computacional, lo cual podría brindar la posibilidad de hacer una simulación más compleja y eficiente.

-
- [1] P. Wilbur, V. Rawlin, and J. Beattie, Ion thruster development trends and status in the united states, *Journal of Propulsion and Power* **14**, 708 (1998).
 - [2] S. Mazouffre, Electric propulsion for satellites and spacecraft: established technologies and novel approaches,

Plasma Sources Science and Technology **25**, 033002 (2016).

- [3] P. Karmakar, G. F. Liu, and J. A. Yarmoff, Sputtering-induced vacancy cluster formation on $\text{Tio}_2(110)$, *Phys. Rev. B* **76**, 193410 (2007).

- [4] A. Zheng, Optical interference filters: The key in high capacity optical systems, *Fiberoptic Product News* **N. 10**, pp. 18 – 24 (1999).
- [5] Hall-current ion sources, in *Industrial Ion Sources* (John Wiley Sons, Ltd, 2011) Chap. 1, pp. 1–27.
- [6] B. M. Pabón, J. Beltran, G. Sánchez-Santolino, I. Palacio, J. Sánchez, J. Rubio Zuazo, J. Rojo, P. Ferrer, A. Mascaraque, M. Muñoz, M. Varela, G. Castro, and O. Fuente, Formation of titanium monoxide (001) single-crystalline thin film induced by ion bombardment of titanium dioxide (110), *Nature Communications* **6**, 6147 (2015).
- [7] C. Rodríguez and J. Mateus, Ion milling internal process and ion beam simulation, (2020).
- [8] *KDC 10 Ion Source Manual* (Kaufman Robinson, Inc., 2012).
- [9] *KSC 1202 Power Supply Controller Manual* (Kaufman Robinson, Inc., 2012).
- [10] I. Langmuir, The effect of space charge and residual gases on thermionic currents in high vacuum, *Physical Review* **6**, 450 (1913).
- [11] *Industrial Plasma Engineering* (Inst. Phys. Publ., 2000).