



УДК 621.793.18

В. А. Тупик, Чу Чонг Шы, И. Стеблевска
Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина)

Моделирование и оптимизация функции качества технологических процессов формирования функциональных покрытий и пленок

Рассмотрено моделирование процессов формирования тонких пленок в установках магнетронного распыления. Моделирование основано на вероятностном подходе и интеграции точечных испарителей. При моделировании учитывались относительное распределение толщины тонких пленок и эффективность массопереноса частиц. Выполнено сравнение результатов компьютерного моделирования и эксперимента; решена обратная задача оптимизации процесса с использованием введенной функции качества, учитывающей равномерность синтезируемых тонких пленок, расход материалов и геометрию области распыления.

Тонкие пленки, магнетронное распыление, компьютерное моделирование, метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики, функция качества покрытия

Тонкие пленки и покрытия являются базовыми компонентами широкого класса устройств для микро- и нанoeлектроники, фотоники, сенсорной техники, создания "умных" материалов и материалов с модулируемыми свойствами и для других приложений [1]. Методы синтеза тонких наноразмерных пленок и покрытий интенсивно совершенствуются и развиваются. Одним из ведущих методов получения тонких пленок является метод магнетронного распыления (МР), который позволяет получать нанослои [2], [3]. Во многих случаях тонкие пленки, наносимые с помощью магнетронных распылительных систем (МРС), обеспечивают выполнение тех же функций, что и более толстые покрытия, получаемые другими методами, поэтому МР все чаще используется для нанесения упрочняющих, износостойчивых, защитных, декоративных и других видов покрытий на разнообразную основу [1]–[3].

Экспериментальные результаты, получаемые МР-методом, хорошо изучены, однако, как отмечено в [2], теория разрядов в МРС и методы расчета их технологических и конструктивных параметров до настоящего времени проработаны слабо. Сложность заключается в том, что в этих системах используются неоднородные скрещенные электрическое и магнитное поля, причем элек-

трические параметры разряда в значительной степени зависят от рабочего давления, величины и конфигурации магнитного поля, а также от конструктивных особенностей распылительной системы. Все это делает практически невозможным точное аналитическое описание явлений, проходящих в разряде магнетронной системы.

Основными показателями качества тонких пленок являются равномерность, степень адгезии между разными фазами, пористость, минимальная толщина при заданных пористости и равномерности, стойкость (физическая и химическая), экономичность (эффективность), технологичность и некоторые другие параметры. Эти физико-химические и технологические свойства (качества) получаемых пленок во многом зависят от таких факторов, как морфология, топология поверхности, структура кристаллизации, дефекты и многих других [1], [3], [4].

В настоящей статье рассмотрен и проанализирован для последующей оптимизации конструкции и технологических параметров процесс массопереноса и роста тонких пленок без детализации процессов образования газоразрядной плазмы и бомбардировки мишени. При разработке модели для компьютерного эксперимента использованы два хорошо известных метода моделирования – метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло.

В [5] показано, что, рассматривая процессы массопереноса при достаточно большой скорости распыления частиц, влиянием взаимосвязи между частицами распыляемого материала в рабочем пространстве можно пренебречь, поскольку вероятность столкновения частиц в процессе распыления незначительна. Действительно, при магнетронном методе формирования пленок распыляемые частицы получают весьма значительную энергию, что обеспечивает достаточно высокий уровень адгезии пленок [2]. Для разработки модели массопереноса можно предположить, что частицы двигаются с определенным угловым законом распыления непосредственно к подложке и осаждаются на ней без миграции с равномерной плотностью. В рамках этой модели параметры тонкой пленки могут быть получены интеграцией результатов действия точечных источников распыления. Угловой закон распыления частиц можно получить разными способами, в том числе для равнонаправленного потока можно показать, что частицы разлетаются от мишени, центр которой расположен в начале координат, с углами α и β (рис. 1). Плотности вероятности для указанных углов имеют вид

$$w(\alpha) = \sin \alpha, \quad \alpha = [0, \pi/2] \quad (1)$$

– по углу α ;

$$w(\beta) = 1/2\pi, \quad \beta = [-\pi, \pi]$$

– по углу β .

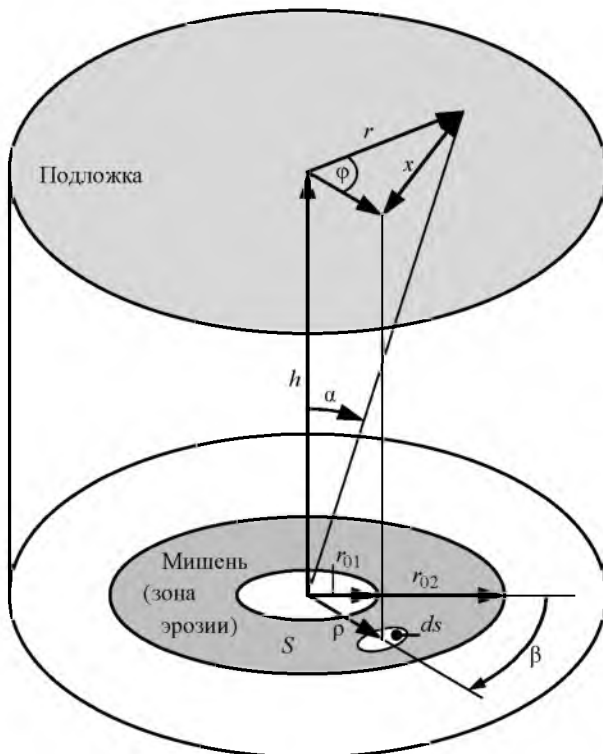


Рис. 1

В [5] на основании аппроксимации реальных экспериментальных данных по синтезируемым пленкам функция плотности вероятности углов разлета частиц аппроксимирована выражением

$$w(\alpha) = f(\alpha)/I, \quad (2)$$

$$\text{где } f(\alpha) = A \cos^n \alpha - B \cos^m \alpha; \quad I = \int_0^{\pi/2} f(\alpha) d\alpha,$$

причем A, B, n, m – подгоночные коэффициенты.

Из рис. 1 следует, что

$$\cos \alpha = h/\sqrt{r^2 + h^2}, \quad (3)$$

где r – расстояние от центра подложки; h – расстояние от подложки до мишени.

Из рис. 1 имеем $r = h \operatorname{tg} \alpha$, откуда

$$\alpha = \operatorname{arctg}(r/h).$$

Тогда

$$\frac{d\alpha}{dr} = \frac{1}{1 + (r/h)^2} \frac{1}{h} = \frac{h}{r^2 + h^2}. \quad (4)$$

Для определения плотности распределения частиц по радиусу r воспользуемся преобразованием для связанных случайных величин при известной плотности вероятности [6]:

$$w(r) = w[\alpha(r)] |d\alpha/dr|.$$

Из (2)–(4) получим:

$$w(r) = (1/I) \left[A \left(\frac{h}{\sqrt{r^2 + h^2}} \right)^n - B \left(\frac{h}{\sqrt{r^2 + h^2}} \right)^m \right] \left[\frac{h}{(r^2 + h^2)} \right]. \quad (5)$$

На основании (5) плотность распределения частиц по радиусу определяется следующим образом:

$$w_1(r) = \frac{2\pi r \iint \frac{1}{2\pi x} ds}{S} = \frac{2r}{S} \int_0^{\pi r_{02}} \int_{r_{01}}^x \frac{1}{x} w(x) \rho d\rho d\varphi, \quad (6)$$

где (рис. 1) $x = \sqrt{r^2 + \rho^2} - 2r\rho \cos \varphi$ (ρ, φ – цилиндрические координаты элементарного источника ds); S – площадь мишени; r_{01} и r_{02} – внутренний и внешний радиусы мишени.

Эффективность переноса частиц:

$$Q(r) = \int_0^r w_1(y) dy, \quad (7)$$

а распределение толщины тонких пленок:

$$z(r) = \iint_S \frac{1}{2\pi x} w(x) ds = \int_0^{r_{02}} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi x} w(x) \rho d\rho d\varphi. \quad (8)$$

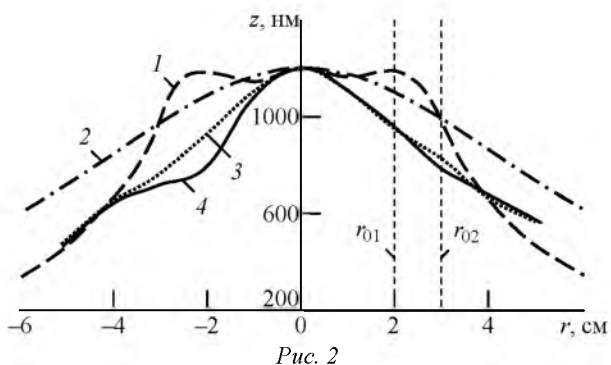
Если известен закон распределения скорости распыления частиц по радиусу $v(\rho)$, он должен быть введен множителем в (5).

Подстановкой (5) в (6)–(8) получим три основных показателя для моделирования функции качества: $w_1(r)$, $Q(r)$ и $z(r)$.

В [7] использован другой подход для получения распределения толщины тонких пленок в различных магнетронных системах, но при этом решена только задача определения параметров тонких пленок в МРС заданной конструкции. Подход, представленный в настоящей статье, позволяет решить и обратную задачу: определить конструкцию и параметры МРС исходя из требуемых параметров пленок.

Для проверки адекватности модели промоделирован процесс синтеза системы ZnO:Ga по технологическим и геометрическим параметрам МРС [8]. На рис. 2 показаны распределения толщины пленок по поверхности подложки при МР. Кривая 1 отображает результаты моделирования при угловом законе распределения (2) для Zn (параметры взяты в [7]), кривая 2 – для синусоидального закона (1). Кривая 3 представляет экспериментальные результаты, полученные в МРС со скрещенным электромагнитным полем [8]; кривая 4 – результаты, полученные в этом же МРС под действием дополнительного магнитного поля, создаваемого катушкой (ток в катушке $I = 1$ А).

Из рис. 2 следует наличие различий в экспериментальных (кривые 3, 4) и модельных (кривые 1, 2) результатах. Причинами этих различий, по-видимому, являются различия материалов распыления (Zn и (Zn, Ga) в реактивном распылении) и модель, не учитывающая параметры, характеризующие влияние подложки на процесс конденсации. Однако в целом предложенная модель на



основе интеграции точечных испарителей хорошо описывает достигаемое при МР распределение толщины пленок по поверхности подложки. На основании указанной модели может быть решена и актуальная обратная задача: определение геометрии устройства распыления (расстояния "подложка–мишень" h , внутреннего (r_{01}) и внешнего (r_{02}) радиусов мишени), обеспечивающей оптимальный результат, т. е. достижение максимальной равномерности относительной толщины пленки при минимальных расходах материала и максимальной области равномерного распыления. При этом также учитывается распределение скорости распыления по радиусу мишени, которое аппроксимируем функцией сдвоенной полуГауссоиды [9].

Функция качества, сформированная как компромиссное решение между равномерностью, расходом материала и шириной зоны распыления, имеет вид

$$H_2(h, r_{01}, r_{02}, m, n, r) = H_1 x_{\max}(H_1),$$

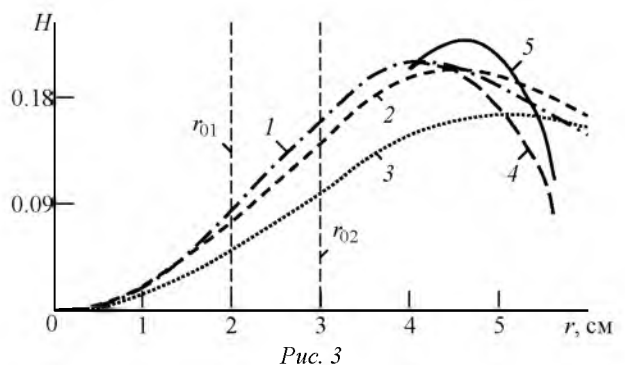
где

$$H_1 = \exp \left[- \int_0^r \frac{(z - \bar{z}) 2\pi r dr}{m} \right] Q^n(r) \quad (9)$$

– оптимизирующая функция равномерности и расхода материала; x_{\max} – радиус зоны распыления при максимальном значении функции H_1 , причем \bar{z} – среднее значение толщины тонкой пленки на интервале от центра подложки до расстояния r .

Во введенной функции качества факторы значимости можно регулировать с помощью коэффициентов значимости n и m в зависимости от технических требований.

Результаты оптимизации функции качества в зависимости от технических параметров приведены на рис. 3: кривая 1 – H_1 (9) при $h = 2$ см, кривая 2 – H_1 при $h = 4$ см, кривая 3 – H_1 при $h = 8$ см. Кривая 4 построена при совокупности



значений r и h , совместно доставляющих максимальные значения H_1 , а кривая 5 представляет функцию качества H_2 при тех же наборах r и h . Для всех кривых на рис. 3 $r_{01} = 2$ см, $r_{02} = 3$ см, $n = 1$ и $m = 15$.

Предложенная модель для формирования покрытий имеет некоторые ограничения. В частности, они могут использоваться только для моделирования процессов магнетронного нанесения слоев при рабочем давлении в зоне нанесения не более 1 Па, так как не учитываются эффекты термализации распыленного потока [2], [7]. Кроме этого в расчете не учитывался эффект адгезии, имеющий значение при большом расстоянии "подложка–мишень", так как в этом случае частицы теряют значительную часть кинетической энергии из-за неупругих столкновений. В то же время подход на основе задаваемых параметров и технологических характеристик эксперимента позволяет в ходе компьютерного моделирования получить описание макропараметров процесса получения покрытия в качестве первоначального приближения для анализа и оптимизации процесса. Введена и построена функция качества процесса, оптимальное значение которой является компромиссным решением между равномерностью, эффективностью массопереноса и шириной зоны распыления; при этом параметрами управления являются геометрические параметры конструкции МРС и другие технологические факто-

ры (плотность разрядного тока и характеристики распыляемого материала).

В ходе подготовки компьютерного эксперимента разработана программа моделирования процесса массопереноса частиц методом молекулярной динамики для оценки степени само- и взаимосвязи частиц в рабочем объеме МРС на качество тонких пленок [10]. В результате моделирования процессов формирования тонких пленок с использованием разработанных алгоритмов и программ показано, что изменение технологических параметров процесса, в частности, геометрических параметров МРС, позволяет управлять функцией качества процесса напыления тонких пленок на макроуровне (равномерностью распределения толщины тонких пленок, эффективностью массопереноса и расходом материала, видом зоны распыления). Эти результаты являются основой для следующего важного шага – перехода на моделирование процесса формирования тонких пленок на микроуровне, где морфология и топология поверхности получаемых тонких пленок являются определяющими факторами их физико-химических свойств. Для исследований на этом уровне авторами разработаны программы моделирования процесса роста тонких пленок в потенциальном поле [11] и модель изменения структуры тонких пленок в процессе отжига [12], алгоритм которой основан на методе Монте-Карло при выборе частиц и квазиньютоновском методе при определении оптимального движения частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Основы синтеза наноразмерных частиц и пленок / В. И. Грачев, В. А. Жабров, В. И. Марголин, В. А. Тупик. Ижевск: Удмуртия, 2014. 480 с.
2. Кузьмичёв А. И. Магнетронные распылительные системы. Кн.1: Введение в физику и технику магнетронного распыления. Киев: Аверс, 2008. 244 с.
3. Грачёв В. И., Марголин В. И., Тупик В. А. Резонансные явления при магнетронном напылении металлических нанопленок в локальном поле на подложке // Радиотехника. Наносистемы. Информационные технологии. 2014. Т. 6, № 1. С. 18–29.
4. Чу Чонг Шы, Бабичев Д. А. Моделирование процессов массопереноса при термическом вакуумном напылении тонких пленок // 67-я науч.-техн. конф. профессорско-преподавательского состава СПбГЭТУ "ЛЭТИ" им. В. И. Ульянова (Ленина). 27 янв.–3 февр. 2014 г.: сб. докл. студентов, аспирантов и молодых ученых. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ "ЛЭТИ", 2014. С. 29–33.
5. Мартыненко Ю. В., Рогов А. В., Шульга В. И. Угловое распределение атомов при магнетронном распылении поликристаллических мишеней // Журн. технической физики. 2012. Т. 82, вып. 4. С. 13–18.
6. Пугачев В. С. Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Наука, 1979. 496 с.
7. Голосов Д. А., Завадский С. М., Мельников С. Н. Сквозное моделирование процессов нанесения покрытий при магнетронном распылении // Вестн. ПГУ. Сер. С. Фундаментальные науки / Полоцкий гос. ун-т. Полоцк, 2013. № 4. С. 75–82.
8. Характеристики плазмы несбалансированной магнетронной распылительной системы и их влияние на параметры покрытий ZnO:Ga / А. А. Соловьев, А. Н. Захаров, С. В. Работкин и др. // Физика и химия обработки материалов. 2009. № 2. С. 58–65.
9. Никоненко В. А. Математическое моделирование технологических процессов. Моделирование в среде MathLab: практикум / под ред. Г. Д. Кузнецова. М.: МиСиС, 2001. 48 с.
10. Свид. о гос. регистр. программы для ЭВМ № 2015610057. Компьютерное моделирование процесса термического вакуумного напыления методом молекулярной динамики (ТВН методом МД) / В. И. Марголин, Чу Чонг Шы. Зарег. 12.01.2015.

11. Свид. о гос. регистр. программы для ЭВМ № 2015610052. Компьютерное моделирование процесса роста тонких пленок в потенциальном поле (Рост тонких пленок) / В. И. Марголин, Чу Чонг Шы. Зарег. 12.01.2015.

12. Моделирование процесса роста тонких пленок при магнетронном распылении методом Монте-

Карло / В. А. Тупик, В. И. Марголин, Чу Чонг Шы, Чан Куок Тоан // Тр. 12-й междунар. конф. "Пленки и покрытия – 2015". 19–22 мая 2015 г. / под ред. д-ра техн. наук В. Г. Кузнецова. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2015. С. 148–150.

V. A. Tupik, Chu Trong Su, I. Steblevska
Saint Petersburg Electrotechnical University "LETI"

The simulation and the optimization of the quality function of the process of the nanoscale film's growth

The modeling of processes of formation of thin films in magnetron sputtering systems in the substrate potential field at different ratios of relations between the sprayed material and the substrate for various types of structures of the substrate is considered. Growth models of thin films point emitters integration method with the use of Monte-Carlo algorithms with accounting of the annealing are used. The comparison of results of computer simulation and experiment is executed; the inverse problem to optimization process using the quality function that takes into account the uniformity of the synthesized thin films, the flow of materials and the geometry of the spray is solved.

Thin films, magnetron sputtering, computer simulation, Monte-Carlo method, molecular dynamics method, quality function

Статья поступила в редакцию 8 сентября 2015 г.