

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**

**ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**ФАКУЛЬТЕТ РАДІОФІЗИКИ, ЕЛЕКТРОНІКИ ТА КОМП'ЮТЕРНИХ СИСТЕМ**

**кафедра фізичної електроніки**

До захисту допущено:

«На правах рукопису»

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_ Анатолій ВЕКЛИЧ

«\_19\_» червня 2023 р.

**БАКАЛАВРСЬКА РОБОТА**

на тему:

**«МОДЕЛЮВАННЯ УТВОРЕННЯ ТА ДИФУЗІЇ КЛАСТЕРІВ В**

**МАГНЕТРОННІЙ КАМЕРІ»**

**Виконав:**

студент 4-го курсу

денної форми навчання

спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

ОП «Прикладна фізика, наноелектроніка та комп'ютерні технології»

Демешко Олег Ігорович \_\_\_\_\_

**Науковий керівник:**

д к.ф.-м.н., доц. Кравченко Олександр Юрійович \_\_\_\_\_

**Рецензент:**

к.ф.-м.н., доц. Кельник Олександр Ігорович \_\_\_\_\_

Засвідчую, що у цій бакалаврській роботі  
немає заповзичень з праць інших авторів без  
відповідних посилань

Студент \_\_\_\_\_

Робота допущена до захисту в ЕК рішенням кафедри фізичної електроніки

від «15» червня 2023 р., протокол № 32.

Завідувач кафедри фізичної електроніки,

доктор фіз.-мат. наук, професор

Веклич Анатолій Миколайович \_\_\_\_\_

## ЗМІСТ

РЕФЕРАТ .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
ВСТУП.....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
РОЗДІЛ 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
1.1. Магнетронна камера .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
1.2. Розсіювання атомів металу.....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
1.3. Процеси нуклеації .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b>
1.4. Експериментальне виявлення кластерів .....	6
РОЗДІЛ 2. ОСНОВНА ЧАСТИНА .....	8
2.1. Фізична модель.....	8
2.2. Математична модель.....	8
2.3. Метод числового моделювання .....	<b>Ошибка! Закладка не определена.</b> 0
РОЗДІЛ 3. РЕЗУЛЬТАТИ.....	16
ВИСНОВКИ.....	20
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	21

## РЕФЕРАТ

Бакалаврська робота вміщує: 22с., 10 рис., 11 джерел.

МГАНЕТРОННИЙ РОЗРЯД, ДИФУЗИЯ, ПРОЦЕСИ НУКЛЕАЦІЇ, КЛАСТЕРИ,  
РІЗНИЦЕВИЙ МЕТОД, МОДЕЛЮВАННЯ

В даній роботі за допомогою числового моделювання досліджується утворення металевих кластерів в камері магнетронного розряду, заповненій аргонем при тисках  $p = 0.1 \div 1$  Торр. Для описання дифузії кластерів та атомів металу в камері використовуються двох-вимірні рівняння, які розв'язуються методом змінних напрямків. В результаті проведених розрахунків отримані стаціонарні просторові розподіли концентрацій кластерів різних розмірів, які свідчать про те, що ефективне утворення кластерів відбувається лише в деякій обмеженій області камери. Ширина цієї області зменшується, а концентрація кластерів збільшується при збільшенні тиску аргону. Також одержані розподіли кластерів за їх розміром при різних тисках газу. Показано, що при збільшенні тиску кількість великих кластерів по відношенню до сумарної концентрації кластерів збільшується.

## ВСТУП

Використання схрещених полів при протіканні струму у газах є основою технології магнетронного розпорошення. Електрони утримуються магнітним полем біля катоду, що спричиняє збільшення їх ефективної довжини пробігу та, відповідно, інтенсивну іонізацію газу. У той же час іони мають великий Ларморівський радіус і потрапляють на катод. Розряд у прикатодній області забезпечується емісією електронів під дією струму іонів. Така технологія забезпечує протікання розряду при тисках до 1 мТорр із типовими напругами від 250 до 500 В. Іони, маючи високу енергію у декілька сотень  $eV$  падають на катод та руйнують його, вибиваючи атоми металу з поверхні. Швидкі вибиті атоми металу розлітаються по камері та осідають тонкою плівкою на поверхні. Такий метод нанесення тонких плівок називається магнетронним розпорошенням і широко застосовується у виробництві.

Дослідницький інтерес представляють процеси в середині магнетронної плазми та можливість їх контролю. Збільшення концентрації буферного газу призводить до розсіяння атомів металу та утворення багато-атомних структур - кластерів. Кластери мають менший коефіцієнт дифузії, інші параметри та властивості, порівняно з вільними атомами металу та буферним газом. Вони представляють окрему газову підструктуру. Дослідження кластерів дозволяє краще зрозуміти процеси фазових переходів та самоорганізації в складних системах.

Експериментально важко відслідковувати розвиток концентрації кластерів із часом та розміру цих кластерів безпосередньо у камері, а теоретичні відомості є досить складними для точного аналізу. Іншим шляхом рішення проблеми є чисельне моделювання процесів, що проходять у магнетронній камері.

Метою роботи є дослідження дифузії атомів металу крізь камеру із буферним газом, а також утворення та дифузії кластерів у цьому процесі.

## РОЗДІЛ 1

### ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

#### 1.1. Магнетронна камера

Розглядаємо стандартну конфігурацію магнетронної камери, описану в роботі [1]. Магніти розташовані таким чином, щоб утворювалась пастка, відповідно зона на катоді біля пастки є зоною із максимальною емісією атомів металу. Така постановка задачі дозволяє розглянути двовимірний переріз катоду та побудувати двовимірний розподіл концентрації.

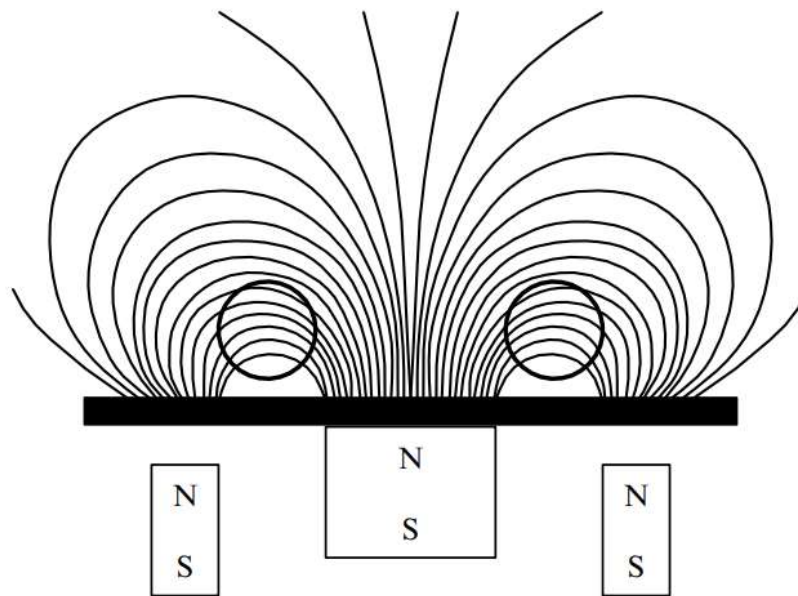


Рис. 1.1. Переріз катоду, магнітні силові лінії та пастки для електронів

#### 1.2. Розсіювання атомів металу

Коли важкі іони падають на катод вони вибивають з нього атоми металу, чим більше енергія іонів, тим менший кут вильоту атомів із катода, відносно нормалі, а також більше енергія цих атомів. Після вильоту атоми розсіюються на буферному газі за рахунок пружних зіткнень. При малій густині буферного газу атоми мають велику довжину вільного пробігу  $\lambda$  та швидко проходять область. У такому випадку утворення кластерів майже відсутнє. Якщо  $\lambda$  мала, то може йти мова про дифузію. Також при розсіюванні відбувається процес термалізації – атоми металу поступово втрачають свою енергію при зіткненнях та набувають температури буферного газу [3].

### 1.3. Процеси нуклеації

Збільшення концентрації буферного газу призводить до розсіювання атомів металу, при достатній концентрації (насичені) починають відбуватись процеси нуклеації [2]. У малій області починають утворюватись кластери шляхом зіткнень атомів металу із атомами буферного газу (конденсації). Також кластери захоплюють вільні атоми металу, збільшуючись при цьому. Утворення починається із 3 частинок (1.1), тому такий процес малоімовірний, але все рівно важливий для розгляду. Утворені кластери зростають, стикаючись із вільними атомами металу (1.2). На практиці такий процес проходить значно швидше, ніж утворення перших кластерів. Кластери можуть спонтанно випаровуватись (1.3). При малих температурах кластерів, низькій степені перенасичення, цей процес значно повільніший ніж наростання [3].



Більш складні процеси розпаду та коагуляції не дають значного внеску [1].

Кластери малих розмірів утворюються нормально, але при досягненні певного значення  $n_c$  їх процеси зменшення компенсують зростання [5]. При певних умовах кластери перестають взагалі наростати,  $n_{max}$  – критичний розмір, експериментально виявлено  $n_{max} \approx \frac{2}{5} n_c$  [3]. На рис. 1.2 видно, що розмір згустків досягає 50 нанометрів, цим розмірам відповідають кластери, що складаються із десятків атомів металу.

### 1.4. Експериментальне виявлення кластерів

Через те, що коефіцієнт дифузії кластерів малий, порівняно із атомами металу, їх легше захопити потоком буферного газу. Також можна надати кластерам певного заряду і керувати потоком за допомогою полів. Таким чином можна спрямувати потік кластерів у потрібну область, наприклад напилити їх на пластину. Далі дослідити отриману плівку та візуалізувати наявність кластерів. Дослідження таких об'єктів проводять за допомогою атомної мікроскопії,

рентгеноскопії, видимої, УФ та ІЧ спектроскопії. Кластери у потоці також можна розпізнати за допомогою маспектрометрів [1, 4].

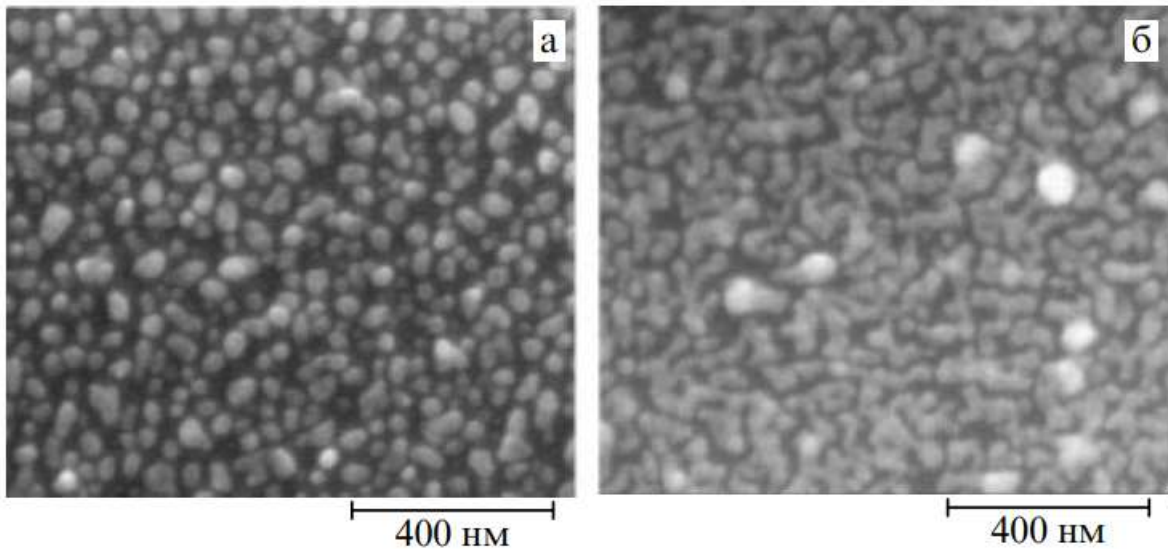


Рис 1.2. Атомна мікроскопія пластинок із нанесеними кластерами [1]

Також можливе дослідження плазми всередині самої магнетронної камери зондовими методами, але відслідкувати концентрацію та розміри саме кластерів потрібного розміру в таких умовах важко.

## РОЗДІЛ 2

### ОСНОВНА ЧАСТИНА

#### 2.1. Фізична модель

Прикатодна область симетрична (рис 1.1), тому має сенс моделювати лише половину. Розглядається прямокутна область розмірами 5 на 5 см., зона ерозії розташована  $2.1\text{см} < y < 3\text{см}$ . Область заповнена буферним газом – аргоном. Дослідження буде проводитись при тисках буферного газу 0.1, 0.5 та 1 Торр. Вважаємо, що температура атомів металу рівна температурі буферного газу (вони одразу термолізовані). Інжекція атомів металу в область задається у вигляді потоку  $G = 10e14 \text{ 1cm}^{-2} \text{ c}^{-1}$ , він визначається із сили магнетронного розряду і в роботі задається константою. Розповсюдження атомів металу по області має дифузійний характер. В залежності від кількості атомів металу в області утворюються кластери, які теж починають розповсюджуватись за рахунок дифузії. При потраплянні атомів металу чи кластерів на стінки камери вони зникають, а атоми буферного газу відштовхуються. Вважаємо, що температура кластерів мала і можемо знехтувати процесами випаровування, коагуляції та розпаду. Максимальний розмір кластерів вважаємо  $n_{max} = 30$ .

#### 2.2. Математична модель

Розповсюдження атомів металу кластерів будемо визначати відповідно до двувимірного рівняння дифузії

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \left( \frac{\partial^2 N}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 N}{\partial y^2} \right) D + S \quad (2.1)$$

$N$  – концентрація атомів металу чи кластераів певного розміру.  $D$  – коефіцієнт дифузії, Оскільки атоми термолізовані, то він сталий у просторі та часі.  $D$  можемо обрахувати у наближенні Чемпмена-Єнксого [3]:

$$D = \frac{3}{8\sqrt{2}\pi r_w^2 N_6} \sqrt{\frac{T}{m}} \quad (2.2)$$

$r_w$  – радіус Вінгера Зейтса.

$$r_w = \left( \frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3} \quad (2.3)$$

$T$  – температура буферного газу,  $N_6$  – концентрація буферного газу. Будемо досліджувати систему в залежності від тиску  $p$ , тоді коефіцієнт дифузії є функцією  $N_6$ , а  $N_6$  визначається із тиску за формулою ідеального газу.

$$N_6 = \frac{p}{kT} \quad (2.4)$$

Відповідно до формули (2.2) коефіцієнт дифузії будемо вважати пропорційним розміру кластера:

$$D = \sim \frac{1}{n^3} \quad (2.5)$$

$S$  – доданок відповідний за утворення кластерів:

$$S = \int_3^{n_{max}} N_n n dn \quad (2.6)$$

Для атомів металу:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = -KN_6 N_1^2 - N_1 k_0 \sum_3^{n_{max}} N_n n^{\frac{2}{3}} \quad (2.7)$$

Перші кластери утворюються за рахунок 3-х частинкової взаємодії, тому для них окрема формула:

$$\frac{\partial N_1}{\partial t} = KN_6 N_1^2 - N_6 k_0 N_2 n^{\frac{2}{3}} \quad (2.8)$$

Кластери усіх інших розмірів утворюються за рахунок 2-х частинкової взаємодії:

$$\frac{\partial N_n}{\partial t} = N_6 k_0 \left( N_{n-1} (n-1)^{\frac{2}{3}} - N_n n^{\frac{2}{3}} \right) \quad (2.9)$$

$N_n$  – концентрація кластерів розміру  $n$ ,  $k_0$  – характеризує швидкість зіткнень кластерів, для титану  $k_0 = 3.3e-11 \text{ cm}^3 \text{ c}^{-1}$ .  $K$  – константа швидкості 3-х частинкової взаємодії, для титану  $K = 2.5e-33 \text{ cm}^6 \text{ c}^{-1}$ .

$$k_n = \sqrt{\frac{8T}{\pi m}} \pi r_w^2 \quad (2.10)$$

Швидкість зіткнення визначається перерізом розсіювання пружних зіткнень, тобто пропорційна розміру  $n^2$ , цей множник винесено окремо, а відповідні константи позначені як  $k_0$ .

### 2.3. Метод числового моделювання

Для розрахунку задачі використаємо метод скінчених різниць, для цього розглянемо прикатодний простір у вигляді сітки [50x50], де координата кожного елемента  $N_{xyt}$  характеризує концентрацію атомів металу у точці із певними координатами  $x$  та  $y$  у момент часу  $t$ . Сітку записуємо у двовимірний масив. Посередині вісі  $y$  зона, у якій фігурує потік атомів металу ( $21 \leq y \leq 30$ )

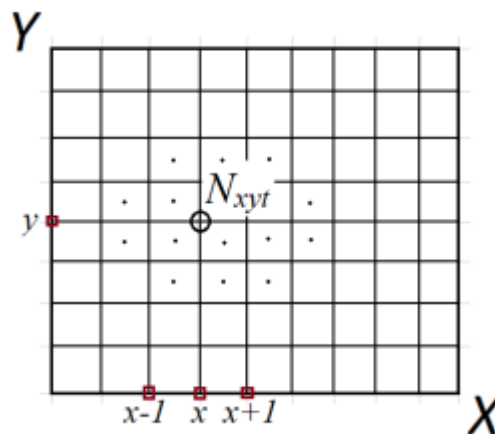


Рис. 2.1. Розбиття області моделювання на сітку

Розраховувати концентрацію будемо за допомогою двовимірного рівняння дифузії (2.1). Розпишемо його компоненти за різницевою схемою.

$$\frac{\partial^2 N}{\partial x^2} = \frac{N_{x+1,y,t} - 2N_{x,y,t} + N_{x-1,y,t}}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2 N}{\partial y^2} = \frac{N_{x,y+1,t} - 2N_{x,y,t} + N_{x,y-1,t}}{h^2}$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{N_{x,y,t+1} - N_{x,y,t}}{\Delta \tau}$$

Оберемо неявну схему розв'язку задачі, для цього використаємо метод змінних напрямків, відповідно до нього розпишемо рівняння на нвпівцілому:

$$\begin{aligned} & \frac{N_{x,y,t+1/2} - N_{x,y,t}}{\Delta\tau} + D \frac{N_{x+1,y,t+1/2} - 2N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2}}{h^2} \\ & + D \frac{N_{x,y+1,t} - 2N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t}}{h^2} = 0 \end{aligned}$$

$$A_{x,y}N_{x+1,y,t+1/2} - B_{x,y}N_{x,y,t+1/2} + C_{x,y}N_{x-1,y,t+1/2} = F_{x,y} \quad (2.11)$$

та цілому кроці:

$$\begin{aligned} & \frac{N_{x,y,t+1} - N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} + D \frac{N_{x+1,y,t+1/2} - 2N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2}}{h^2} \\ & + D \frac{N_{x,y+1,t+1} - 2N_{x,y,t+1} - N_{x,y-1,t+1}}{h^2} = 0 \end{aligned}$$

$$A'_{x,y}N_{x,y,t+1} - B'_{x,y}N_{x,y,t+1} + C'_{x,y}N_{x,y,t+1} = F'_{x,y} \quad (2.12)$$

Кожен з виразів (2.11) та (2.12) представляють собою лінійну систему рівнянь.

Розв'яжемо їх методом прогонки.

$$N_{x,y} = \alpha_{x+1}N_{x+1} + \beta_{x+1}$$

$$\alpha_{x+1} = \frac{A_x}{B_x - \alpha_x C_x}$$

$$\beta_{x+1} = \frac{C_x \beta_x - F_x}{B_x - \alpha_x C_x}$$

$$\alpha_0 = 0, \beta_0 = 0$$

Величини  $A$ ,  $B$ ,  $C$  та  $F$  позначають константи на напівцілому кроці.  $A'$ ,  $B'$ ,  $C'$  та  $F'$  - їх аналоги на цілому. Ці константи визначаються відповідно до крайових умов:

Для  $2 \leq x \leq 49$ ,  $2 \leq y \leq 49$ . Стандартний випадок.

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x+1,y,t} - 2N_{x,y,t} - N_{x-1,y,t})$$

$$A'_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C'_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B'_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} \left( N_{x+1,y,t+1/2} - 2N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2} \right)$$

Для  $x = 1, 2 \leq y \leq 21, 30 \leq y \leq 49$ . На краях зони моделювання ( $x = 1$  та  $50, y = 1$  та  $50$ ) деякі константи обнуляються, що характеризує зникнення частинок на стінках камери.

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - 2N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t})$$

$$A_{x,y}^{\cdot} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y}^{\cdot} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y}^{\cdot} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x+1,y,t+1/2} - 3N_{x,y,t+1/2})$$

Для  $x = 1, 21 \leq y \leq 30$ . У зоні інжекції фігурує  $G = 10e14 \text{ } 1\text{cm}^{-2} \text{ c}^{-1}$  величина потоку атомів металу в область.

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - 2N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t}) + \frac{G}{H}$$

$$A_{x,y}^{\cdot} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y}^{\cdot} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y}^{\cdot} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x+1,y,t+1/2} - 3N_{x,y,t+1/2}) + \frac{G}{H}$$

Для  $2 \leq x \leq 49, y = 1$ .

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - N_{x,y,t})$$

$$A_{x,y}^{\cdot} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y}^{\cdot} = 0, \quad B_{x,y}^{\cdot} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} \left( N_{x+1,y,t+1/2} - 2N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2} \right)$$

Для  $2 \leq x \leq 49, y = 50$ .

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (3N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t})$$

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} \left( N_{x+1,y,t+1/2} - 2N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2} \right)$$

Для  $x = 50, 2 \leq y \leq 49$ .

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - 2N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t})$$

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} \left( -3N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2} \right)$$

Для,  $x = 1, y = 1$ .

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - N_{x,y,t})$$

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y}^{\cdot} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} \left( N_{x+1,y,t+1/2} - 3N_{x,y,t+1/2} \right)$$

Для  $x = 50, y = 1$ .

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{2D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x,y+1,t} - N_{x,y,t})$$

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (-3N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2})$$

Для  $x = 1, y = 50$ .

$$A_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad C_{x,y} = 0, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (3N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t})$$

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (N_{x+1,y,t+1/2} - 3N_{x,y,t+1/2})$$

Для  $x = 50, y = 50$ .

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (3N_{x,y,t} - N_{x,y-1,t})$$

$$A_{x,y} = 0, \quad C_{x,y} = -\frac{D}{H^2}, \quad B_{x,y} = -\frac{2}{\Delta\tau} - \frac{3D}{H^2}$$

$$F_{x,y} = \frac{2N_{x,y,t+1/2}}{\Delta\tau} - \frac{D}{H^2} (-3N_{x,y,t+1/2} - N_{x-1,y,t+1/2})$$

Оскільки кількість перерахунків по часу часто береться досить велика, то робити масив із значень для кожного моменту часу не раціонально, а значення поточного моменту не залежить від кількості промодельованих. Зробимо двовимірний масив  $x$  та  $y$  та будемо перезаписувати його значення кожен

наступний момент часу. Забезпечення збіжності методу потребує достатньо малого кроку по часу, в роботі  $\Delta\tau = 1e - 6$  с, час моделювання 40 000 кроків, цього достатньо для встановлення стаціонарного режиму.

За цими формулами розраховується дифузія атомів металу та кластерів, але для кластерів обнуляємо значення величини  $G$ , оскільки кластери фактично утворюються в області, а не заносяться потоком. Також вважаємо коефіцієнт дифузії пропорційним розміру (2.5).

### РОЗДІЛ 3

### РЕЗУЛЬТАТИ

На рис. 3.1 представлено розподіл атомів по області при  $p = 0.1 \text{ Torr}$  після встановлення стаціонарного режиму. Видно характерний пік біля зони інжекції, далі концентрація атомів стрімко зменшується. Розмірність  $N \text{ м}^{-3}$ ,  $X$  та  $Y$ , в  $\text{см}$

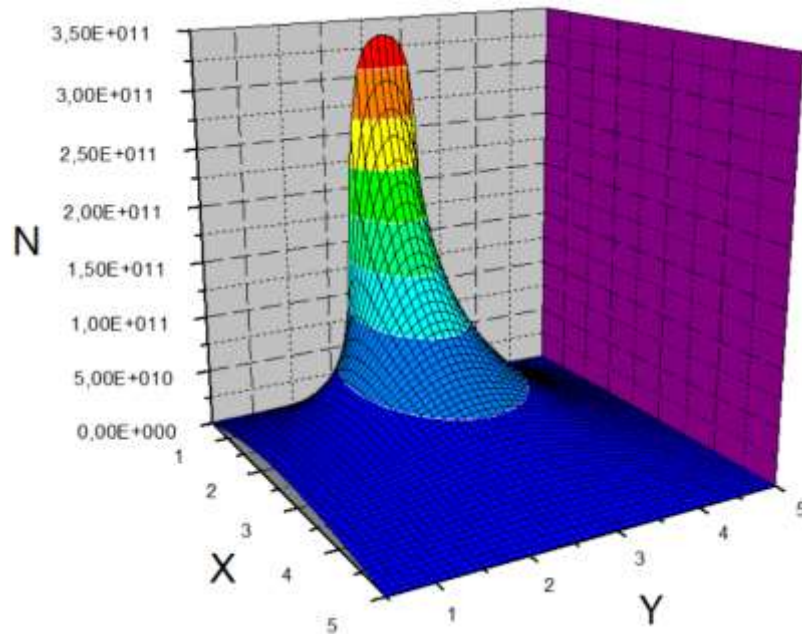


Рис. 3.1. Просторовий розподіл атомів металу при тиску 0.1 Торр

На рис. 3.2 представлено графік розподілу димерів в області. Видно, що пік знаходиться на деякій відстані від зони інжекції, тобто саме в цій області утворюється більша частина перших кластерів, після чого їх концентрація стрімко спадає.

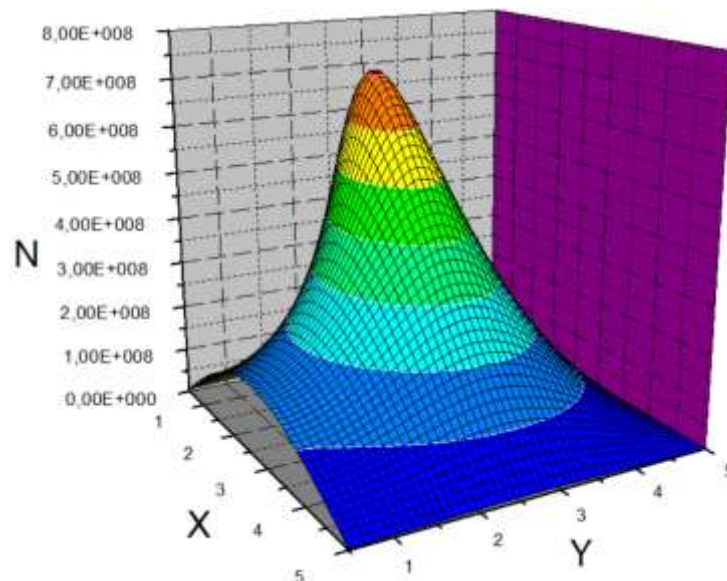


Рис. 3.2. Просторовий розподіл димерів при тиску 0.1 Торр

На рис. 3.3 приклад формування димерів в часі навпроти зони інжекції ( $T$  у кроках моделювання  $\Delta\tau = 1e - 6$  с). Видно, що графіки для 3000 та 35000 моментів часу майже тотожні, тобто вже встановився стаціонарний режим. Стаціонарний режим відповідає умовам, коли в область інжектується стільки ж частинок, скільки втрачається на стінках, тобто їх загальна кількість і розподіл майже не змінюються.

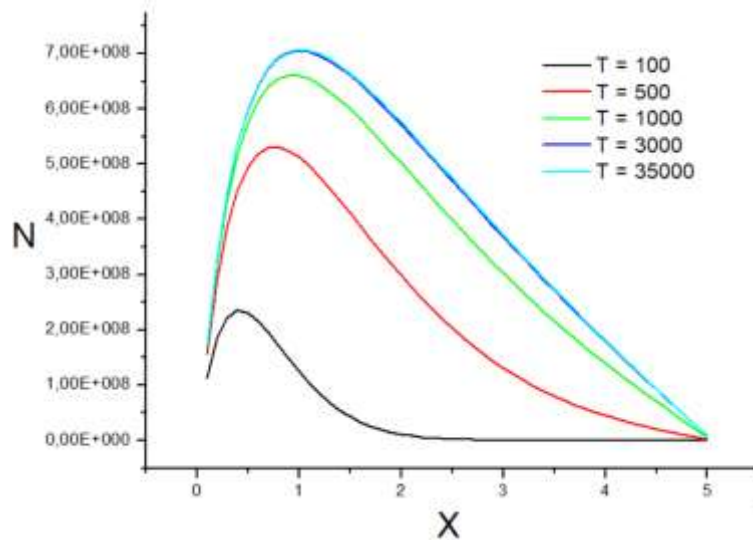


Рис. 3.3. Формування розподілу димерів в часі при тиску 0.1 Торр

На рис. 3.4 розподіли димерів при різних тисках навпроти зони інжекції в стаціонарному режимі, але для пронормованої концентрації по її максимальному значенню (для наочності, оскільки її максимальне значення відрізняється на порядки). Видно, що при меншому тиску пік трохи деформується і віддаляється від зони інжекції.

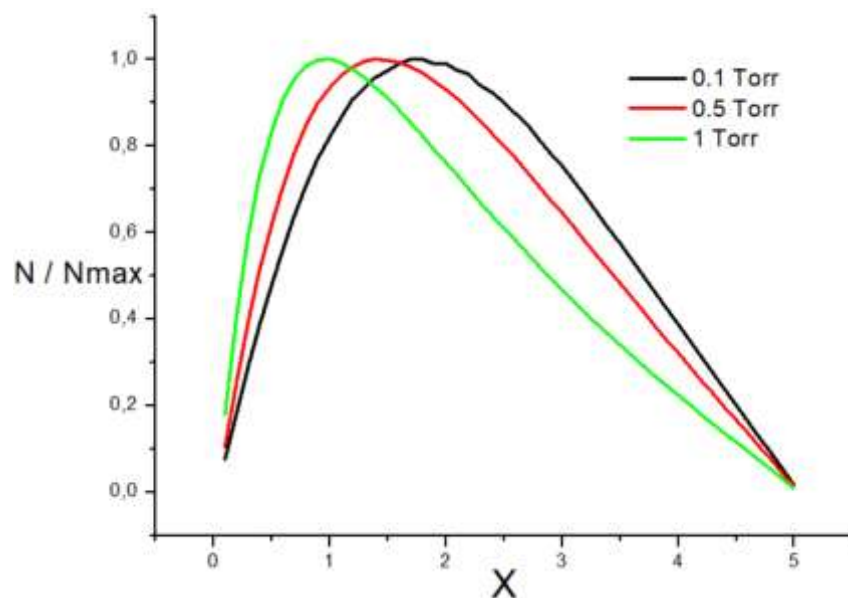


Рис. 3.4. Розподіл димерів при різних тисках

На рис. 3.7 представлені значення концентрації кластерів в залежності від їх розміру для різних тисків навпроти зони інжекції. Видно, що при меншому тиску зменшується відносна кількість великих кластерів. Наприклад при тиску 1 Торр кластери розміром 15 і більше майже відсутні.

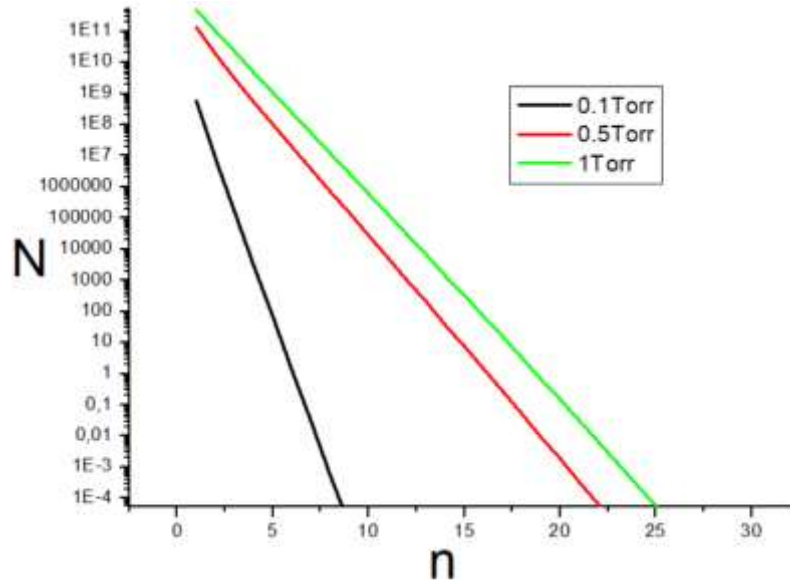


Рис. 3.7. Кількість кластерів в залежності від їх розміру у точці ( $x=0.5$  см;  $y=2.5$  см) для різних тисків

На рис. 3.5 та 3.6 концентрація просумована по всім вузлам (тобто кількість частинок в області) та пронормована по максимальному значенню. По вісі  $x$  час. Порівняні залежності для різних тисків та для різних розмірів кластеру. Дані графіки демонструють швидкість встановлення стаціонарного режиму, тобто коли кількість частинок в області перестає змінюватись. Видно, що стаціонарний режим встановлюється повільніше при менших тисках та для кластерів більшого розміру.

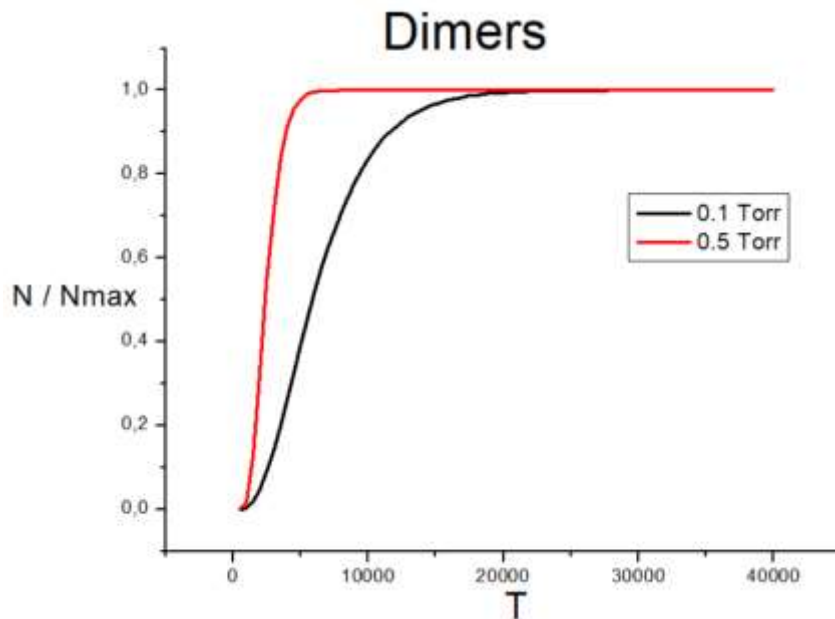


Рис. 3.5. Швидкість встановлення стаціонарного режиму розподілу димерів при різних тисках

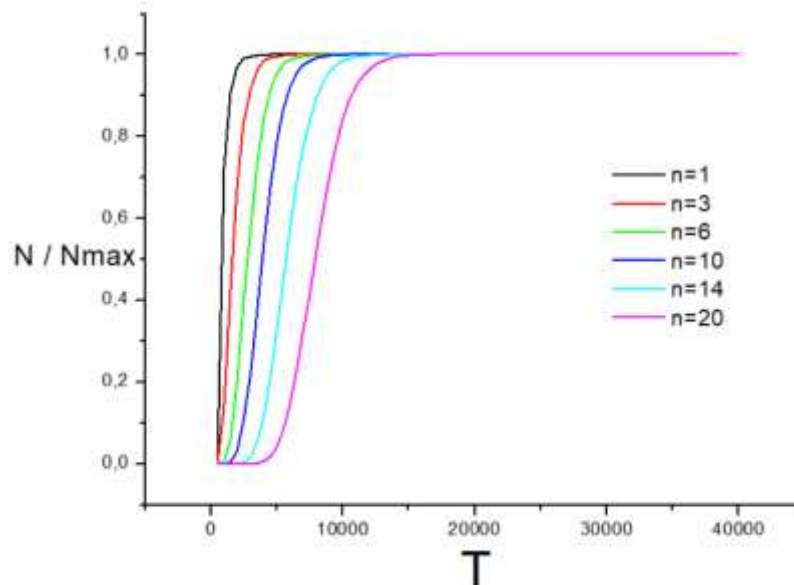


Рис. 3.6. Швидкість встановлення стаціонарного режиму для кластерів різного розміру при тиску 0.5 Torr

## ВИСНОВКИ

Проведене дослідження утворення та дифузії кластерів у камері магнетронного розряду, яка наповнена аргоном при тиску  $p = 0.1 \div 1$  Торр. На основі аналізу одержаних результатів встановлено:

- При збільшенні тиску буферного газу збільшується кількість утворених “зародків” кластерів і, як наслідок, збільшуються концентрації кластерів різних розмірів.
- При заданому потоці атомів металу з зони ерозії катоду в камері можна виділити область, де утворення кластерів є ефективним. Ширина цієї області зменшується, а концентрації кластерів в ній збільшуються при збільшенні тиску аргону.
- При збільшенні тиску газу в камері ширина розподілу кластерів по їх розмірам збільшується, тобто збільшується відносна кількість великих кластерів.

## СПИСОК ВИКОРИТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. P. V. Kashtanov. Magnetron plasma and nanotechnology / P. V. Kashtanov, B.M. Smirnov, R. Hipper // *Physics - Uspekhi* 50(5), –2007, –p. 455-488
2. B. M. Smirnov. Cluster and Small particles in Gases and Plasmas / B. M. Smirnov, R. Stephen Berry, J.L. Birman // *Graduate Texts in Contemporary Physics –1997-1999*, –p. 1-4, 44-161.
3. A. V. Goncharov Modeling of Cluster Formation and Growth under Atomic Vapor Condensation / A. V. Goncharov, P. V. Kashtanov // *High Temperature*, –V. 49, Issue 2, –2011, –p. 178–186.
4. Uwe Kortshagen. Nonthermal plasma synthesis of semiconductor nanocrystals / Uwe Kortshagen // *J. Phys. D: Appl. Phys.* -2009. -V.42. -P.11301-22.
5. J.W.P. Shmelzer. Shapes of Cluster Size Distribution Evolving in Nucleation-Growth Processes / J.W.P. Shmelzer, G. Repke, J. Shmelzer, V.V. Slezov // *Journal of Non-Crystalline Solids*, -2010, p. 2915-2922
6. B. M. Smirnov. Processes involving clusters and small particles in a buffer gas / B. M. Smirnov // *UFN*, 2011, –V. 181, –Number 7, –p. 713-745.
7. Oleksandr Polonskyi. Plasma based formation and deposition of metal and metal oxide nanoparticles using a gas aggregation source / Oleksandr Polonskyi, Amir Mohammad Ahadi, Tilo Peter // *The European Physical Journal D*, –V. 72, Article number 93, –2018.
8. E Quesnel. Modeling metallic nanoparticle synthesis in a magnetron-based nanocluster source by gas condensation of a sputtered vapor / E Quesnel, E Pauliac-Vaujour, and V Muffato // *Journal of Applied Physics* 107, –054309 – 2010.
9. В. П. Шкілев. Дифузія частинок із внутрішніми ступенями свободи в неупорядкованому середовищі / В.П. Шкілев, В.В. Лобанов, П.Е. Стрижак. // *Поверхность, УДК 541.3*, –Вип.14, –2008, –с. 101-107.

- 10.P. K. Kelly. Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications / P. K. Kelly, R. D. Arnell // Vacuum, –V. 56, –2000, –P.159-172.
- 11.Hippler R. Flow of nanosize cluster-containing plasma in a magnetron discharge / Hippler R, Shyjumon I, Smirnov B M // Phys. Rev. E - 2007. -V.75. 066402