

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

«_23_» травня 2023 р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

на тему:

«Моделювання утворення кластерів в плазмі магнетронного розряду»

Виконав:

студент 2-го курсу магістратури
денної форми навчання
спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали
ОП «Прикладна фізика та наноматеріали»
Абакуменко Олексій Юрійович

Науковий керівник:

к.ф.-м.н., доц. Кравченко Олександр Юрійович

Рецензент:

д.ф.-м.н., проф. Денисенко Ігор Борисович

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

Студент _____

Робота допущена до захисту в ЕК рішенням кафедри фізичної електроніки
від «17» травня 2023 р., протокол № 31.

Завідувач кафедри фізичної електроніки,
доктор фіз.-мат. наук, професор
Веклич Анатолій Миколайович

Зміст

1	Вступ	4
2	Огляд літератури	6
3	Фізична модель	11
4	Математична модель	12
5	Методика числового моделювання	14
6	Огляд результатів	17
7	Висновки	29
8	Список літератури	30

Реферат

Звіт вміщує 31 ст., 16 рис., 12 джерел.

МАГНЕТРОННИЙ РОЗРЯД, ПЛАЗМА, МОДЕЛЮВАННЯ, КЛАСТЕР, КОНЦЕНТРАЦІЯ

В роботі було розроблено модель утворення та дифузії кластерів в камері магнетронного розряду. Показано, що при заданому потоці атомів металу з зони ерозії на катоді в камері відбувається утворення кластерів титану. На основі цієї моделі була створена програма для моделювання кластерів в плазмі магнетронного розряду на мові C++. За допомогою цієї програми були проведені розрахунки утворення і дифузії кластерів в камері магнетронного розряду при різних тисках буферного газу та потоках кластерів з зони ерозії на катоді. Одержані просторово-часові розподіли концентрації кластерів та атомів в камері. Досліджено вплив тиску та величини потоків атомів металу на концентрації атомів та кластерів в камері.

1 Вступ

Метод магнетронного розпилення – метод, який дозволяє напилювати тонкі плівки на поверхню шляхом розпилення мішені в магнетронній плазмі. Моделювання магнетронного розряду є доволі привабливим, оскільки дозволяє зменшити витрати на налаштування. Основною витратою, для користувачів магнетронів, є монтаж. Можливість підібрати такі параметри установки, які забезпечать велику пропускну здатність, яка відповідає таким специфікаціям, як необхідна швидкість нанесення, однорідність, відтворюваність або термін служби, до того як вона буде створена може значно зменшити час, а отже і витрати, на монтаж [1]. Моделювання також дозволяє завчасно зрозуміти, чи буде взагалі схема працювати чи ні. Також дуже привабливим є можливість оптимізації параметрів розпилення без фактичного проведення експерименту, що скорочує грошові затрати та час на проведення експериментів в реальному житті.

В магнетронному розпилювачі наявні два схрещених поля – електричне та магнітне [2]. За рахунок зовнішнього магнітного поля плазма утримується перед катодом. Під дією вторинної емісії катод випускає електрони, які рухаються під впливом на них цих полів. Електричне поле рухає електрон до анода в той час, як за рахунок магнітного поля виникає сила Лоренца, спрямованої перпендикулярно швидкості. Сумарна дія цих сил змушує електрон рухатися паралельно поверхні мішені за складною замкнутої траєкторії, близькій до циклоїди. Електрон буде рухатись по замкнутій траєкторії поки він не зіткнеться з атомами буферного газу. В результаті такої взаємодії електрон іонізує газ. Витративши енергію, за рахунок дифузії, електрон переміститься до аноду. Через те, що електрон рухається по замкнутій траєкторії, суттєво збільшує ймовірність його зіткнення з атомами буферного газу. В наслідок цього потрібні нижчі тиски для утворення плазми. Це дозволяє отримувати плівки чистішим за своїм складом ніж, наприклад, в методі магнетронного розпилення [3]. Також цей метод дозволяє розмістити плазму прямо перед мішенню, що дає більшу інтенсивність бомбардування мішені робочим газом, а, отже, швидкість напорошення плівки буде більша, ніж в інших методах. Також даний метод дозволяє напилювати плівки на матеріали з малою термостійкістю.

Магнетрони також є поширеним методом для утворення кластерів. Кластери утворені за допомогою магнетрона використовують для створення тонких плівок на поверхні матеріалів, а також для створення наноструктур. Все більш широке застосування кластерів на пра-

ктиці [4] дає новий поштовх до вивчення цих об'єктів і процесів, що відбуваються з ними і з їх участю. окрім того, кластери цікаві і самі по собі [5], оскільки мають властивості, не типові для макроскопічних образків. Процеси, що відбуваються при перетворення атомів металу в кластери, визначають швидкість та ефективність цього перетворення, окрім цього, вони також визначають властивості кластерів. Відповідно, детальне вивчення процесів кластеризації дозволить, з одного боку, проводити пошук найбільш ефективних режимів роботи магнетронних розрядів в якості джерела кластерів, а з іншого боку, - дозволить передбачати властивості отримуваних кластерів.

Практично всі методи генерації кластерів оснований на тому факті, що кластери є проміжною стадією між газовою та конденсованою фазою для даного матеріалу [6]. Одним з найбільш ефективних методів генерації вважається генерація кластерів в кластерній плазмі. Плазма для генерації кластерів є сумішшю з слабо-іонізованого буферного газу і парів атомів матеріалу, з яких і будуть утворюватись кластери. Пари металу можуть бути отримані різними методами. Якщо температура пару металу (і відповідно плазми) буде нижче критичної, і, крім того, пар буде перенасичений, то при цих умовах слід очікувати конденсації пару.

В даній роботі запропонована модель для генерації кластерів та розроблена комп'ютерна програма, яка дозволяє моделювати утворення кластерів в плазмі магнетронного розряду при різних вхідних параметрах.

2 Огляд літератури

Розглянемо принцип дії магнетронного розряду проілюстрований в роботі [7]. Класична принципова схема магнетронного розряду наведена на рис.1. Два магніти створюють над катодом магнітне поле з максимальною силою в області між магнітами. Електрони, захоплені магнітним полем, знаходяться в області максимальної напруженості, а їхні Ларморівські радіуси дуже малі. Вплив магнітного поля на іони настільки слабкий, що ним можна знехтувати. Іони бомбардують цільовий катод і генерують вторинні електрони, які іонізують атоми буферного газу. Під дією електричного і магнітного полів електрони дрейфують у напрямку, перпендикулярному до цих полів. Це видно з рівняння швидкості електронів Ньютона. Варто відзначити, що при віддаленні від катода магнітне поле різко зменшується, тому область сильного магнітного поля зосереджена біля катода.

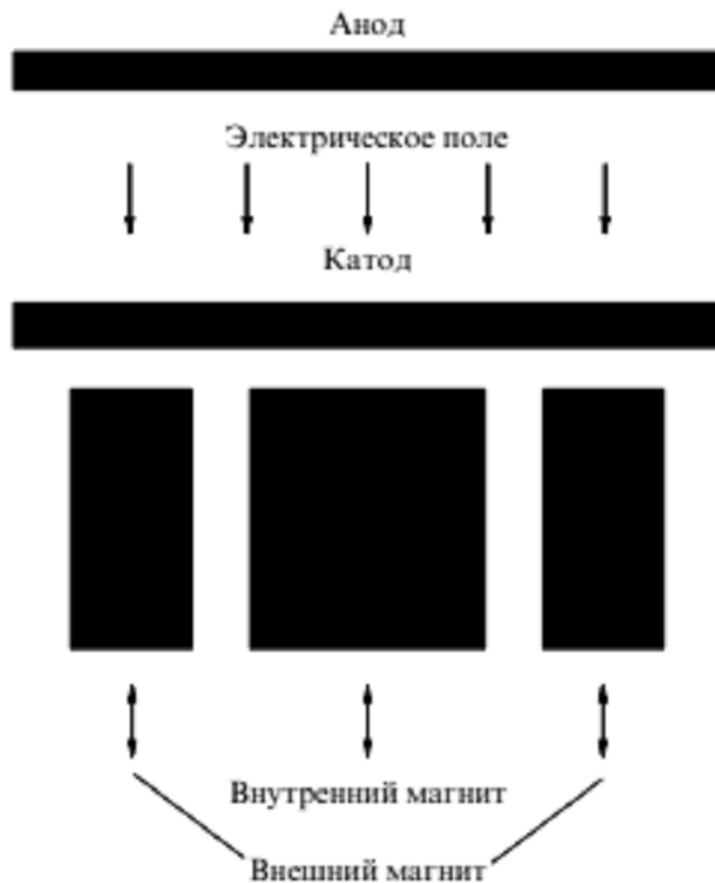


Рис. 1: Типова схема магнетронного розряду

Загалом магнетронний розряд можна розділити на 3 області: область поблизу катода, область підвищеного магнітного поля та область між "пастковою" зоною та стінками [7]. У магнетронному розряді іони отри-

мують енергію переважно в області біля катода. Прикатодна область — це вузький проміжок між катодом і зоною «пастки». Саме тут іони прискорюються і бомбардують катод. Ця область містить більшу частину напруги розряду. Оскільки ця область менша за довжину вільного пробігу іонів, буферний газ повинен мати низький тиск. У областях, де магнітне поле посилене, електрони захоплюються полем, і в результаті теплові іони притягуються до області та компенсують заряд електронів. В результаті плазма в цій області характеризується високою концентрацією частинок і високою електропровідністю. Крім того, іони з цієї області бомбардують катод. Оскільки друга область має форму тора, ми отримуємо корозію на катоді, як показано на рис.2. Найчастіше розрядною камерою є циліндр. Для зниження тем-

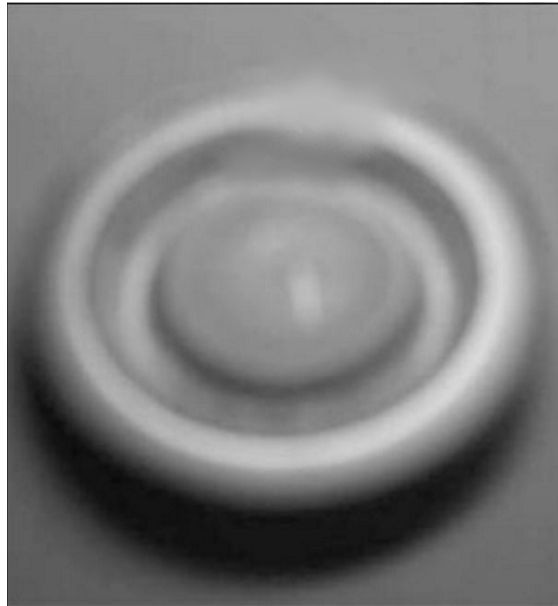


Рис. 2: Приклад ерозії катода

ператури стінки камери охолоджуються рідким азотом або водою.

В роботі [8] було розглянуто кластери в магнетронній плазмі, механізми їх росту а також підходи до моделювання кластерів в плазмі магнетронного розряду. Кластери - системи скінченного числа зв'язаних атомів, які розглядаються як окремий фізичний об'єкт. Утворення кластерів починається з тричастинкового процесу утворення димерів(кластер, що складається з двох атомів):



Далі ріст кластерів можна описати наступною схемою:



Існує 3 механізми росту кластерів: прилипання, коагуляція та коалесценція (рис. 3) [8]. При описі кластерів використовується два підходи для їх моделювання: кінетичний та дифузійний. Перший використовують для опису кластерів розмірами порядку атомів, другий для кластерів значно більших за розміри атомів.

Для комп'ютерного моделювання кластерів використовують дві моделі: модель рідкої краплі та модель твердих сфер. Модель рідкої краплі описує внутрішню структуру кластера, в той час як модель твердих сфер використовується для опису зіткнень кластерів з атомами та іншими кластерами.

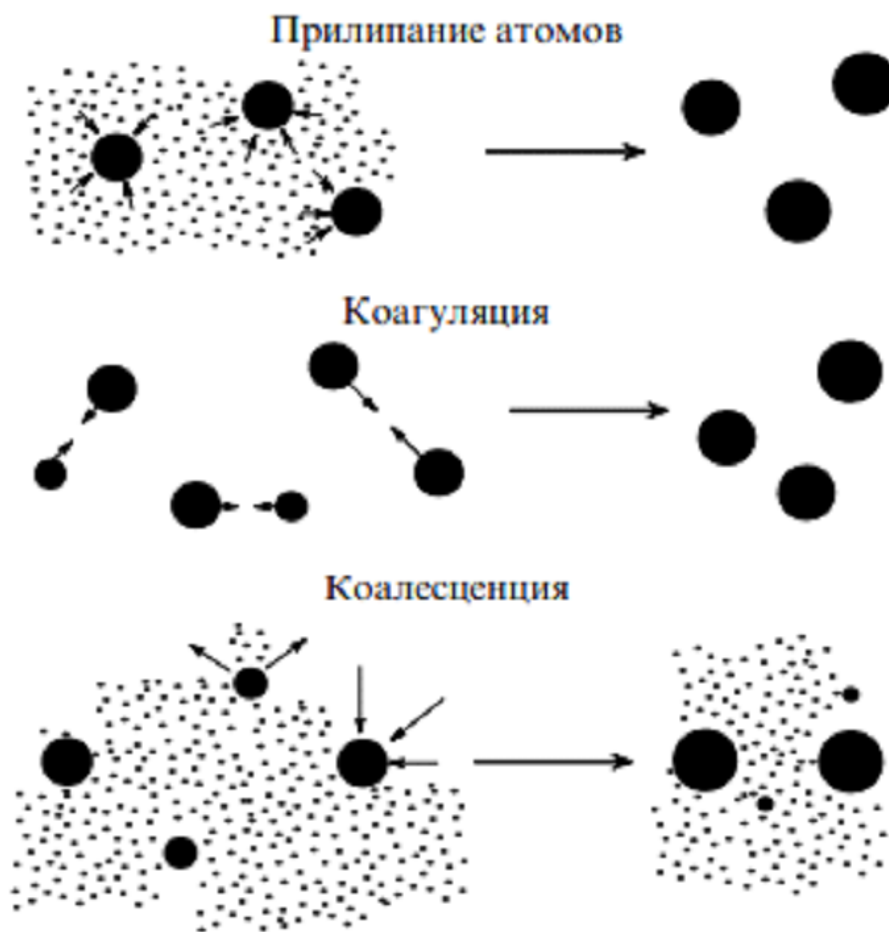


Рис. 3: Механізми росту кластерів

В роботі [5] моделювання ділять на 2 стадії. Перша - це процес релаксації за енергіями. На другій стадії відбувається процес утворення та росту кластерів в ході дифузії вільних теплових атомів металу. Атоми, що були вибиті з поверхні катоду, мають велику енергію, але в наслідок розсіяння на атомах буферного газу відбувається релакса-

ція атомів металу за енергіями. Рівняння для зміни енергії має вигляд [7]:

$$\frac{dE}{dt} = 2 \frac{\mu}{M + m} E v N_a \sigma(E) \quad (3)$$

де M, m - маси атомів металу та буферного газу відповідно,
 $\sigma(e)$ - переріз зіткнень вибитих атомів з атомами буферного газу
 E - енергія вибитого атома
 v - швидкість атома металу
 N_a - концентрація буферного газу

Використовуючи рівняння (3) можна дізнатись час за який енергія вибитого атому падає до теплової. В цій роботі вважають, що атоми вибиваються нормально з поверхні катоду. Це дозволяє вважати, що час релаксації по енергіям для всіх атомів буде однаковий. В загальному, еволюція по часу ймовірності виявити вибитий з поверхні катоді атом в деякій точці простору описується рівнянням [7]:

$$\partial_t w - \nabla(D(E)\nabla w) = 0 \quad (4)$$

w - ймовірність виявити атом в момент часу t в заданій точці,
 $D(E)$ - коефіцієнт дифузії атома з енергією E .

Основні втрати виникають за рахунок того, що кластери, при досягненні стінок, прилипають до них. При термалізації буферний газ буде розігріватись нерівномірно по всьому об'єму камери. Через це, потрібно проводити розрахунки встановлення температури в процесі релаксації атомів за енергіями. Для стаціонарного режиму горіння розряду даний процес можна описати рівнянням теплопровідності. Таким чином, в роботі [5] процеси релаксації за енергіями та установлення температури в камері є узгодженими: з однієї сторони, розподіл температури детермінується процесом релаксації вибитих атомів за енергіями, з іншого боку - процес релаксації обумовлений розподілом температури в камері.

На другій стадії йде моделювання процесу дифузії теплових атомів в камері магнетронного розряду, виникнення та ріст кластерів. Теплові атоми, що не зв'язані на кластерах, розповсюджуються в камері внаслідок дифузії, що в стаціонарному випадку описуємо за допомогою рівняння:

$$-\nabla(D\nabla N) = \Psi - Q \quad (5)$$

Тут N, D - відповідно густина та коефіцієнт дифузії вільних теплових атомів, Ψ, Q - джерело та стік. Всі величина в рівнянні 5 залежать від координат.

Функція стоку повинна описувати перехід вільних теплових атомів в зв'язаний на кластерах стан. Після термалізації поблизу катоду

виникає пар кластеризованого матеріалу. В області, де ступінь насичення цього пару набагато більша за одиницю, відбувається процес гомогенної нуклеації. В результаті трьох-частинкової взаємодії виникають димери.

Кластер може змінювати свій розмір під впливом трьох процесів: прилипання атомів до поверхні кластеру, випаровування та коагуляція. Для спрощення моделі можна знехтувати процесом коагуляції, оскільки в атмосфері буферного газу коефіцієнт дифузії швидко зменшується з ростом розміру кластеру:

$$D_n = \frac{D}{n^{2/3}} \quad (6)$$

D_n - коефіцієнт дифузії кластеру, який складається з n атомів,

D - коефіцієнт дифузії атомів металу,

n - кількість атомів в кластері.

Критичний розмір кластеру (тобто розмір, при якому швидкість росту та швидкість випаровування будуть рівні) можна визначити наступним чином [9]:

$$n_{cr} = \left(\frac{2A}{3k_b T \ln(S(T))} \right)^3 \quad (7)$$

В зонах сильно пересиченого пару швидкість випаровування атомів з поверхні кластерів по відношенню до швидкості прилипання дуже мала і ми можемо знехтувати нею.

3 Фізична модель

Є циліндрична камера довжиною $L = 3$ см та радіусом $R = 3$ см. Камера заповнена буферним газом - аргоном. Тиск газу змінюється від 0.1 Торр до 2 Торр. Катод має форму круглого диску і виготовлений з титану. Внаслідок бомбардування катоду іонами, виникає ерозія з якої емітуються атоми металу. Зона ерозії виникає при $1.2 \text{ см} < r < 1.8 \text{ см}$. В процесі руху атомів титану в магнетронній камері вони зіштовхуються з атомами буферного газу і, якщо концентрація атомів металу переважає концентрацію атомів насиченого пару, можуть утворюватись кластери. Далі ці кластери також будуть рухатись в цій камері за рахунок дифузії. Ми вважаємо, що процес розповсюдження атомів та кластерів в камері магнетронного розряду має дифузійний характер. При попаданні на стінки камери атоми металу та кластери зникають, тобто їх концентрація дорівнює нулю. В нашій моделі ми припускаємо, що температура кластера мала і це дає нам змогу знехтувати випаровуваннями атомів металу з поверхні кластеру.

4 Математична модель

Рівняння, що описують рух атомів металу та кластерів це рівняння дифузії. Для металу воно буде мати наступний вигляд:

$$\frac{\partial N}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(D \frac{\partial N}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D \frac{\partial N}{\partial r} \right) = S \quad (8)$$

Тут N - концентрація атомів металу

D - коефіцієнт дифузії атомів металу

S - витрати атомів металу на утворення кластерів

$$S = \int_2^{n_{max}} N_n n dn \quad (9)$$

Для кластерів

$$\frac{\partial N_n}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_n \frac{\partial N_n}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r D_n \frac{\partial N_n}{\partial r} \right) = S_n \quad (10)$$

Де N_n - концентрація кластерів, що складаються з n атомів,

D_n - коефіцієнт дифузії для кластера розміром n , визначається з рівняння (6),

S_n - швидкість утворення кластерів.

Для того, щоб визначити праві частини рівнянь (8) та (10) ми використовуємо рівняння, які описують утворення кластерів в наслідок зіткнення атомів металу та атомів аргону [7, 10]. Процес утворення кластерів починається з утворення димерів. Цей процес описується наступним рівнянням:

$$S_2 = \frac{dN_2}{dt} = K N_a N^2 - k_2 N N_2 \quad (11)$$

Тут: K - швидкість трьох-частинкового процесу, яка для аргону рівна $5.5 * 10^{-33} \text{cm}^6 \text{c}^{-1}$ [11],

N_a - концентрація атомів аргону,

N - концентрація атомів титану,

k_n - швидкість прилипання атомів металу до кластеру, який містить n атомів:

$$k_n = k_0 n^{2/3}, \quad k_0 = \sqrt{\frac{8T}{\pi m}} \pi r_w^2 \quad (12)$$

T - температура газу

m - маса атома титану

r_w - радіус Вігнера-Зейтца. Радіус Вігнера-Зейтца визначається наступною формулою:

$$r_w = \left(\frac{3}{4\pi n}\right)^{1/3} \quad (13)$$

Для атомів титану $r_w = 1.67 \text{ \AA}$ [11]

$$S_n = \frac{dN_n}{dt} = k_n N_{n-1} N - k_{n+1} N N_n \quad (14)$$

5 Методика числового моделювання

Для моделювання кластерів спочатку треба визначити концентрацію атомів металу в робочій камері. Розіб'ємо наш простір на умовну сітку розміром N на N .

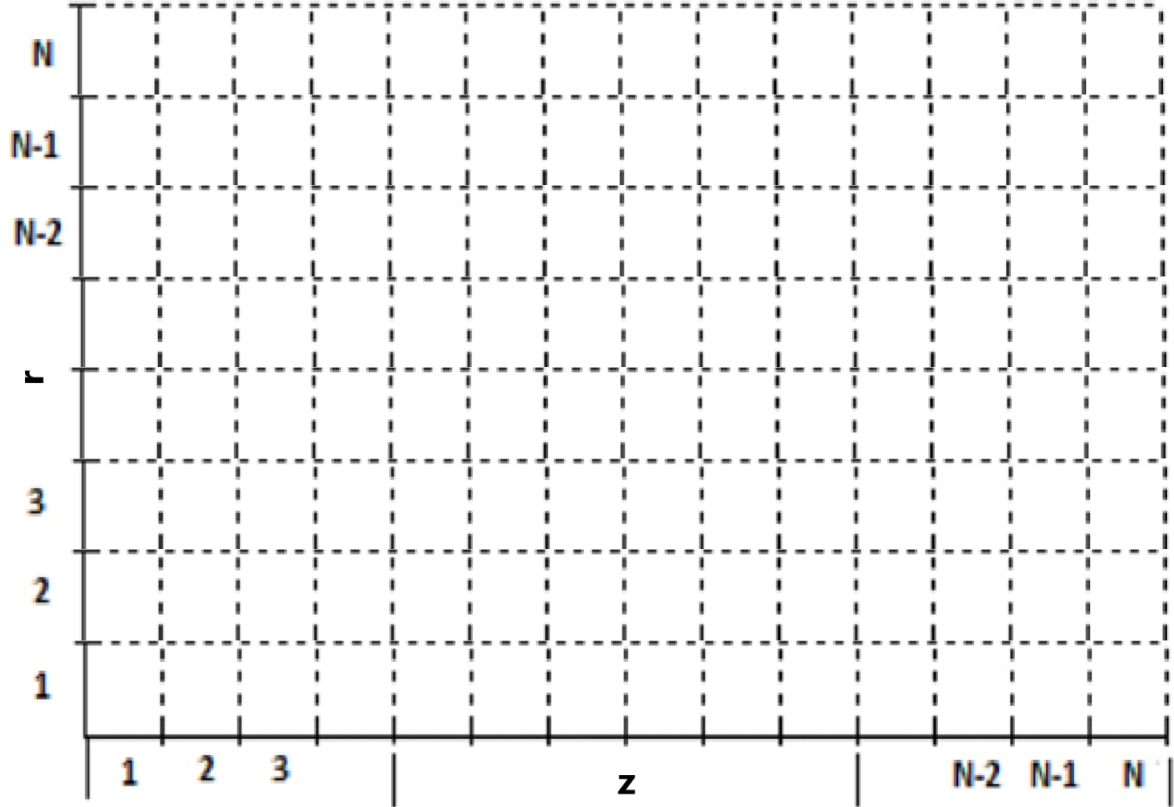


Рис. 4: Приклад розбиття простору на сітку

Для знаходження концентрації атомів металу в камері магнетронного розряду використаємо формулу (8). Апроксимуємо дане рівняння кінцево-різницевиими рівняннями. Побудуємо різницеву схему і для розв'язку скористаємось методом змінних напрямків [12]. Для початку потрібно розв'язати рівняння на часовому кроці $k + 1/2$. Тоді (8) набуває вигляду:

$$\frac{N_{i,j}^{k+1/2} - N_{i,j}^k}{\Delta t} - D \left(\frac{N_{i+1,j}^{k+1/2} - 2N_{i,j}^{k+1/2} + N_{i-1,j}^{k+1/2}}{h^2} \right) - D \left(\frac{N_{i,j+1}^k - 2N_{i,j}^k + N_{i,j-1}^k}{h^2} \right) - \frac{D}{r_j} \frac{N_{i,j+1}^k - N_{i,j}^k}{h} = S \quad (15)$$

Тут i - номер вузла по осі z ,
 j - номер вузла по осі r ,

k - номер часового кроку.

$$S = \sum_2^{n_{max}} N_n n \quad (16)$$

Розв'язок даного рівняння будемо шукати методом прогонки. Прогонку робимо по осі z (зміна індексу i).

$$A_{i,j} N_{i+1,j}^{k+1/2} - B_{i,j} N_{i,j}^{k+1/2} + C_{i,j} N_{i-1,j}^{k+1/2} = F_{i,j} \quad (17)$$

З рівняння (15) знаходимо коефіцієнти A , B , C , F та шукаємо прогонні коефіцієнти α та β за формулами:

$$\alpha_{i+1,j} = \frac{A_{i,j}}{B_{i,j} - \alpha_{i,j} C_{i,j}} \quad (18)$$

$$\beta_{i+1,j} = \frac{C_{i,j} \beta_{i,j} - F_{i,j}}{B_{i,j} - \alpha_{i,j} C_{i,j}} \quad (19)$$

Далі знаходимо концентрацію на проміжному часовому кроці за формулою:

$$N_{i,j}^{k+1/2} = \alpha_{i+1,j} N_{i+1,j}^{k+1/2} + \beta_{i+1,j} \quad (20)$$

Після того, як буде знайдено значення концентрації на часовому кроці $k + 1/2$ потрібно знайти концентрацію на $k + 1$ часовому кроці. В даному випадку прогонка буде здійснюватись по осі r (зміна індексу j). Згідно методу змінних напрямків, різницєва схема рівняння (8) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} & \frac{N_{i,j}^{k+1} - N_{i,j}^{k+1/2}}{\Delta t} - D \left(\frac{N_{i+1,j}^{k+1/2} - 2N_{i,j}^{k+1/2} + N_{i-1,j}^{k+1/2}}{h^2} \right) - \\ & D \left(\frac{N_{i,j+1}^{k+1} - 2N_{i,j}^{k+1} + N_{i,j-1}^{k+1}}{h^2} \right) - \frac{D}{r_j} \frac{N_{i,j+1}^{k+1} - N_{i,j}^{k+1}}{h} = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

Рівняння (17), (18), (19) зміняться відповідним чином:

$$A'_{i,j} N_{i,j+1}^{k+1} - B'_{i,j} N_{i,j}^{k+1} + C'_{i,j} N_{i,j-1}^{k+1} = F'_{i,j} \quad (22)$$

$$\alpha_{i,j+1} = \frac{A'_{i,j}}{B'_{i,j} - \alpha_{i,j} C'_{i,j}} \quad (23)$$

$$\beta_{i,j+1} = \frac{C'_{i,j} \beta_{i,j} - F'_{i,j}}{B'_{i,j} - \alpha_{i,j} C'_{i,j}} \quad (24)$$

Тоді значення концентрації на $k + 1$ кроці матиме вигляд:

$$N_{i,j}^{k+1} = \alpha_{i,j+1} N_{i,j+1}^{k+1} + \beta_{i,j+1} \quad (25)$$

Схема утворення кластерів описана в рівнянні (1) та (2). Для моделювання концентрації кластерів скористаємось формулами (11) та (14). Для початку потрібно визначити концентрацію атомів металу в камері. Після цього вже можна визначати концентрацію кластерів різних розмірів. Запишемо різниці схеми для рівнянь (11) та (14)

$$\frac{N_2^{k+1} - N_2^k}{\Delta t} = K N_a N_2^{k^2} - k_2 N_2^k N_2^k \quad (26)$$

$$\frac{N_n^{k+1} - N_n^k}{\Delta t} = k_n N_{n-1}^k N_n^k - k_{n+1} N_n^k N_n^k \quad (27)$$

Тоді концентрацію димерів будемо шукати за допомогою наступного рівняння:

$$N_{2i,j}^{k+1} = N_{2i,j}^k + \Delta t N_a K N_{i,j}^{k^2} - \Delta t k_0 N_{i,j}^k N_{2i,j}^k 2^{2/3} \quad (28)$$

Для знаходження концентрації кластерів скористаємось наступною формулою:

$$N_{ni,j}^{k+1} = N_{ni,j}^k + \Delta t k_0 N_{i,j}^k N_{n-1i,j}^k (n+1)^{2/3} - N_{i,j}^k N_{ni,j}^k (n+2)^{2/3} \quad (29)$$

6 Огляд результатів

Нижче наведено результати отримані в ході моделювання. Моделювання проводилось для камери з параметрами: довжина $L = 3$ см та радіус $R = 3$ см. Зона ерозії на катоді виникає при $1.2 \text{ см} < r < 1.8$ см. Потік атомів з катоду був $G_0 = 10^{14} \text{ м}^{-2}\text{с}^{-1}$.

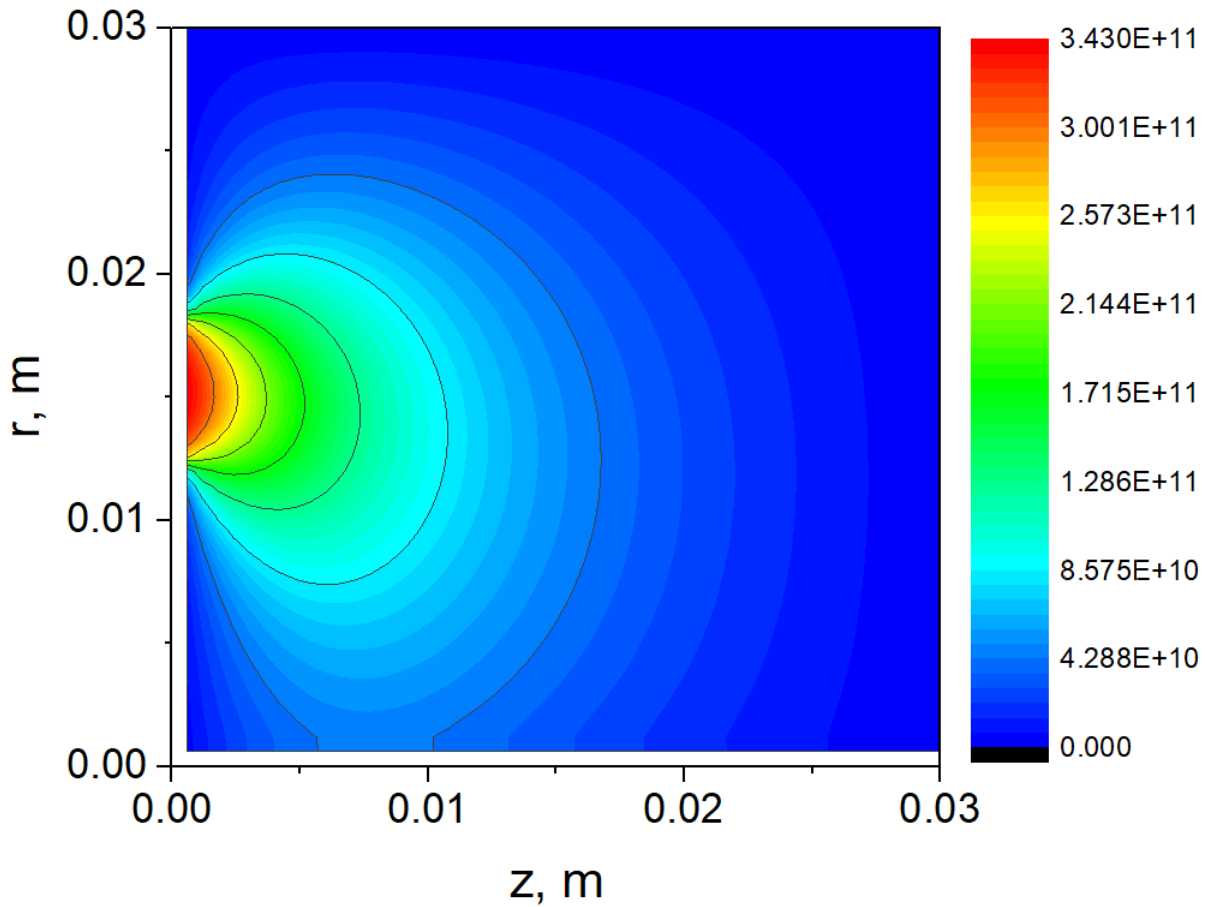


Рис. 5: Розподіл концентрацій атомів металу при тиску $p = 0.1$ Торр та потоку атомів $G_0 = 10^{14} \text{ м}^{-2}\text{с}^{-1}$

На рис. 5 представлено розподіл концентрації атомів металу при тиску $p = 0.1$ Торр. Можна побачити, що атоми металу зосередженні біля катоду напроти зони ерозії. Також можна побачити асиметрію в розподілі атомів відносно лінії, що проходить через центрі зони ерозії, більше атомів зосередженні ближче до вісі симетрії камери.

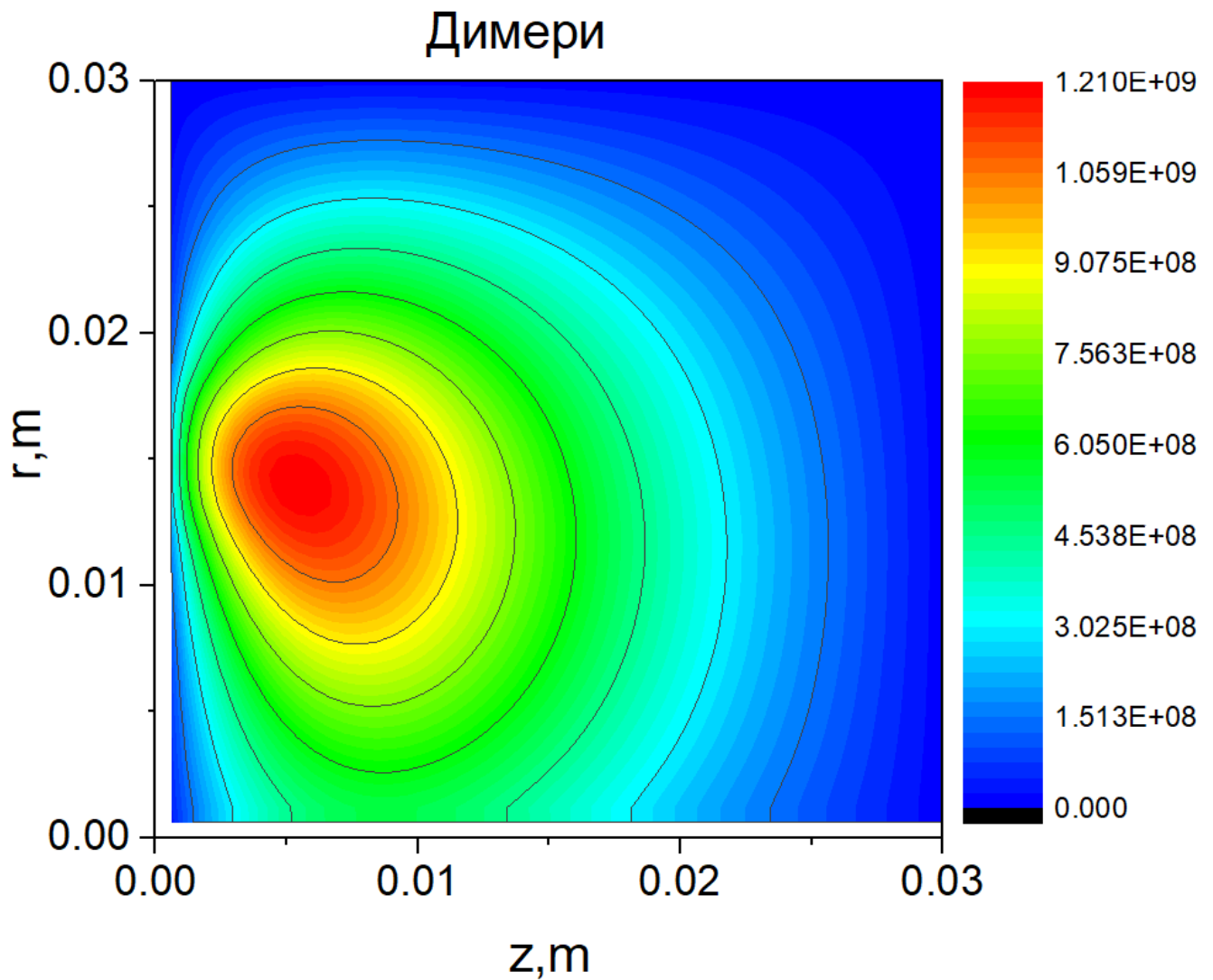


Рис. 6: Розподіл димерів при тиску $p = 0.1$ Торр та потоку атомів $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{c}^{-1}$

На рис. 6 зображено розподіл концентрації димерів. Видно, що максимум концентрації знаходиться на деякій відстані від зони ерозії, на відміну від атомів металу. Дане зміщення максимуму відбувається за рахунок дифузії димерів. Так само як для металу, присутня асиметрія в розподілі по радіусу.

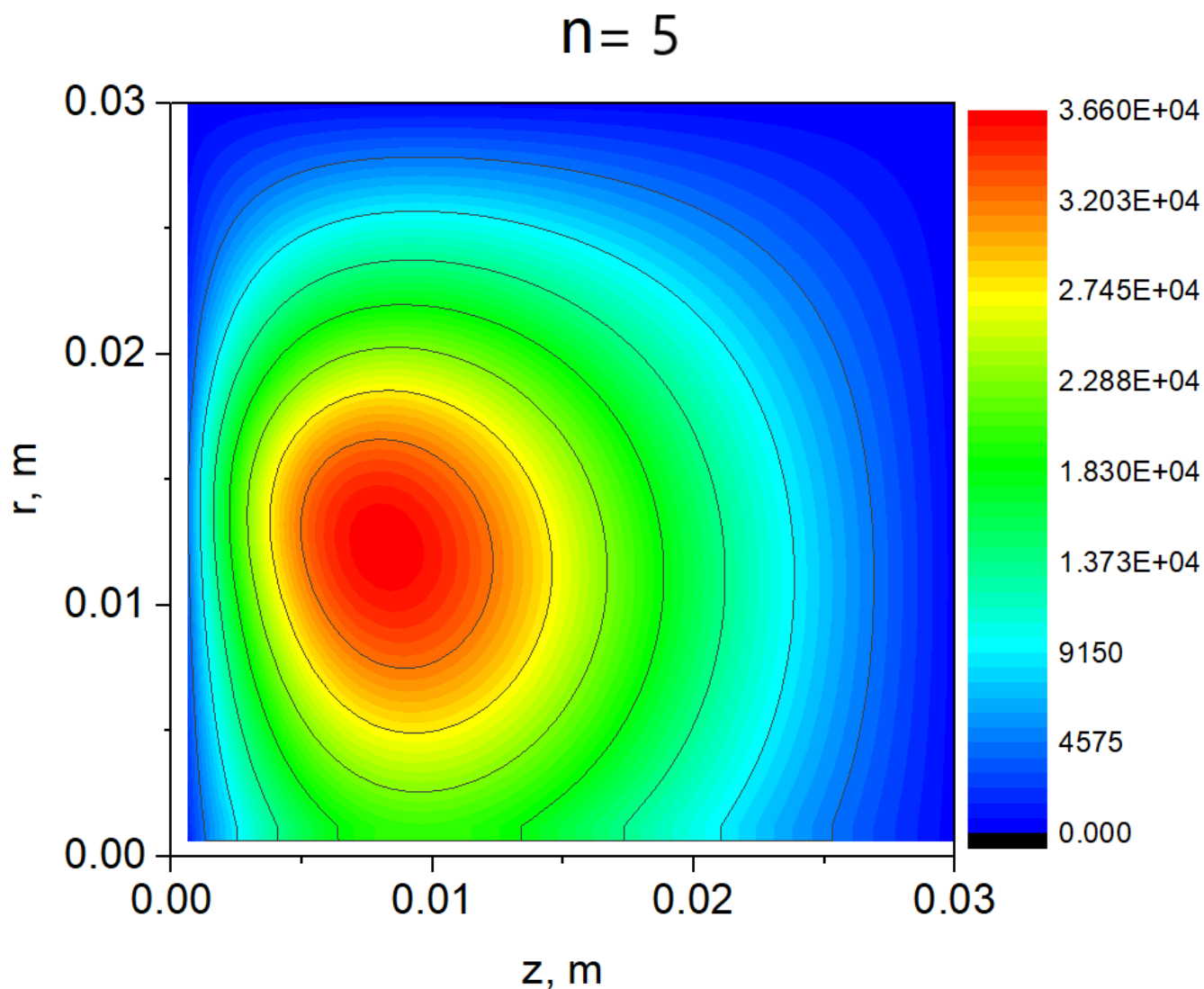


Рис. 7: Розподіл кластерів розміром $n = 5$ при тиску $p = 0.1$ Торр та потоку атомів $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{c}^{-1}$

На рис. 7 приведені просторові розподіли концентрації кластерів розміром $n = 5$. Можна побачити, що концентрація таких кластерів має максимум на деякій відстані від зони ерозії. Цей максимум зміщений не лише по осі z , а і по r .

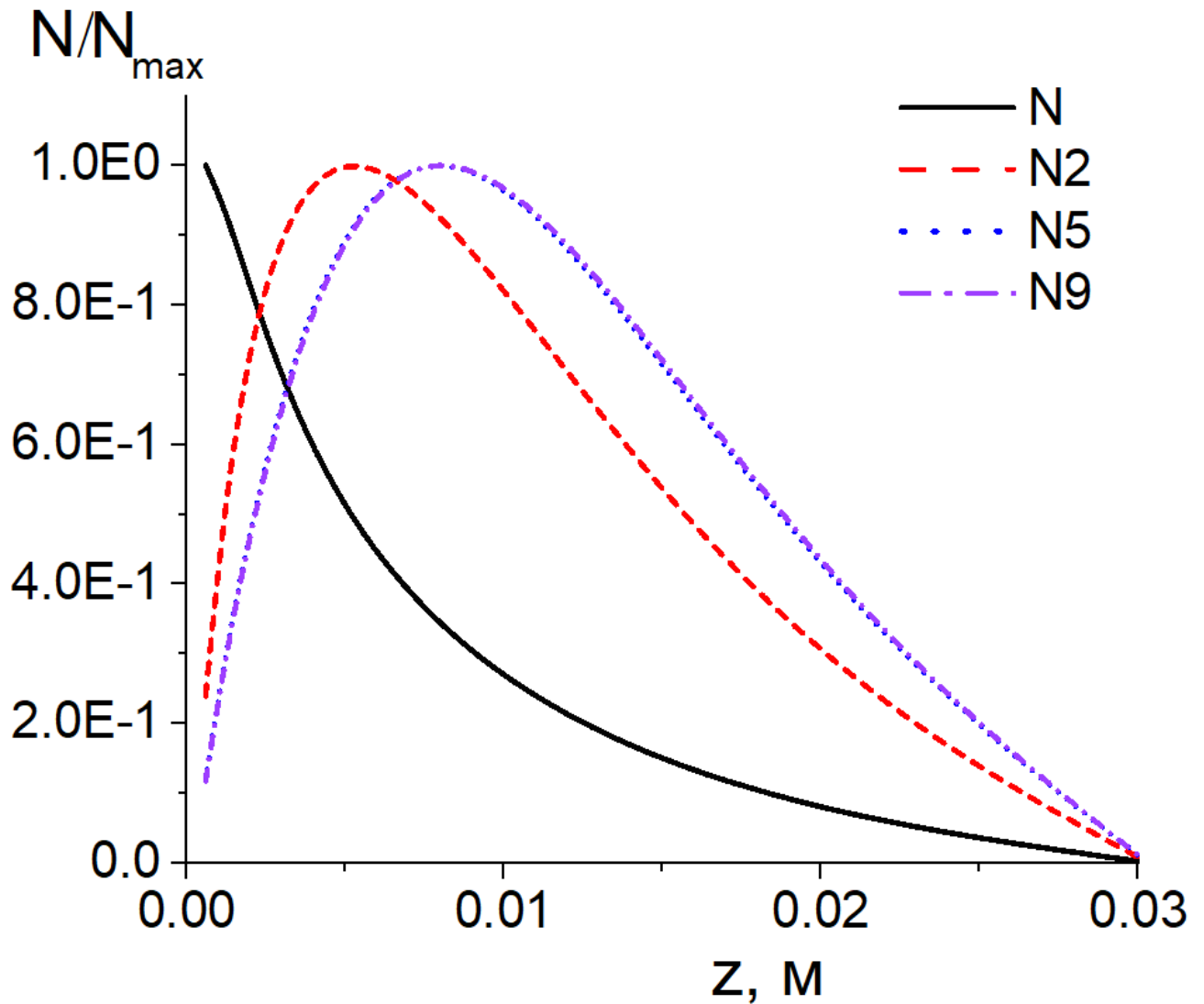


Рис. 8: Порівняння концентрацій для різних розмірів кластерів при $p = 0.1$ Торр та потоку атомів $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$

На рис. 8 приведено нормовані на максимальне значення розподіли кластерів по осі z . Видно, що чим більша розмірність кластера, тим далі знаходиться його максимум концентрації від зони ерозії, проте ця тенденція є вірною тільки до певних розмірів кластерів (в нашому випадку до $n = 5$).

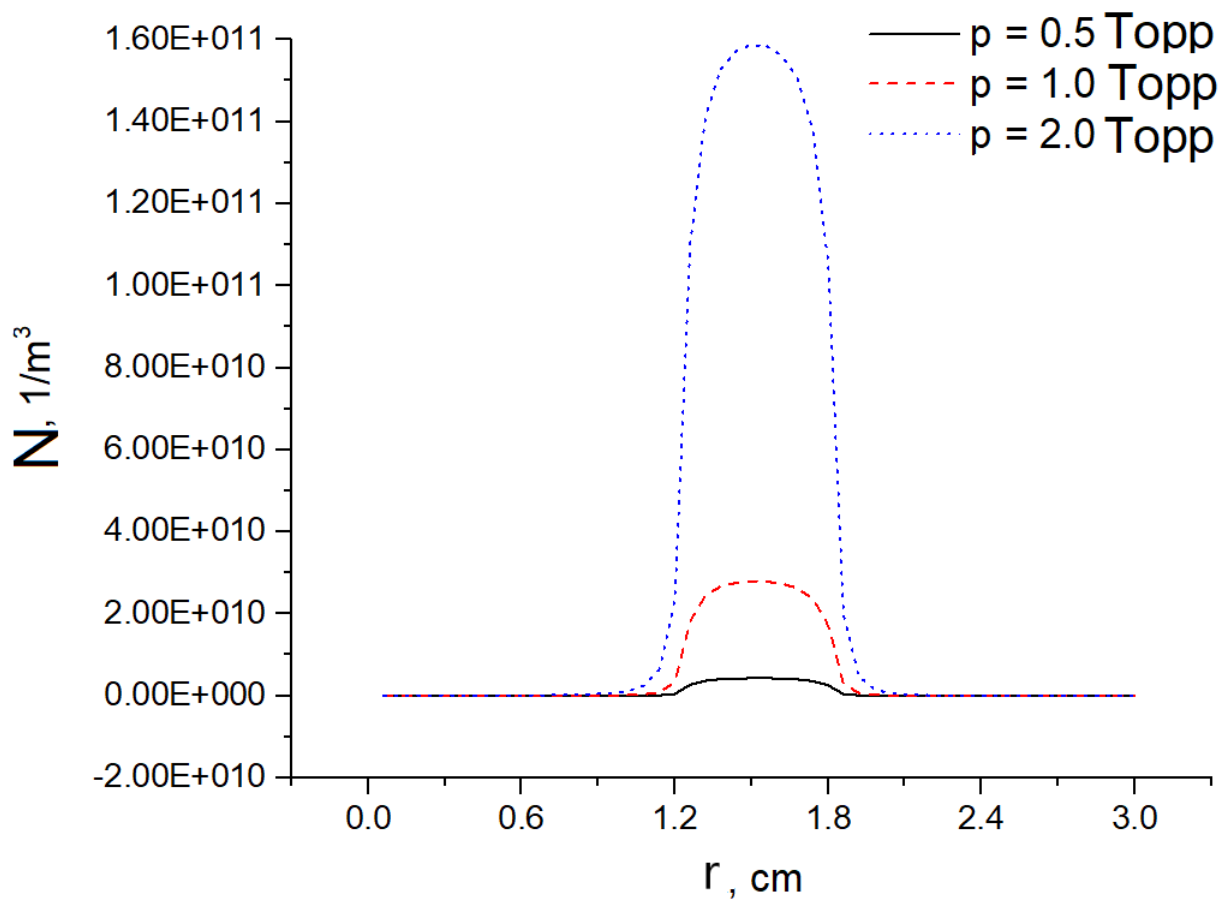


Рис. 9: Розподіл димерів при різних значеннях тиску по радіусу при $G_0 = 10^{14} m^{-2}c^{-1}$

Для того, щоб проілюструвати вплив тиску на концентрацію, на рис. 9 зображено радіальний розподіл концентрацій кластерів при різних тисках біля поверхні катоду. З рисунку видно, що при збільшенні тиску збільшується і концентрація кластерів в камері.

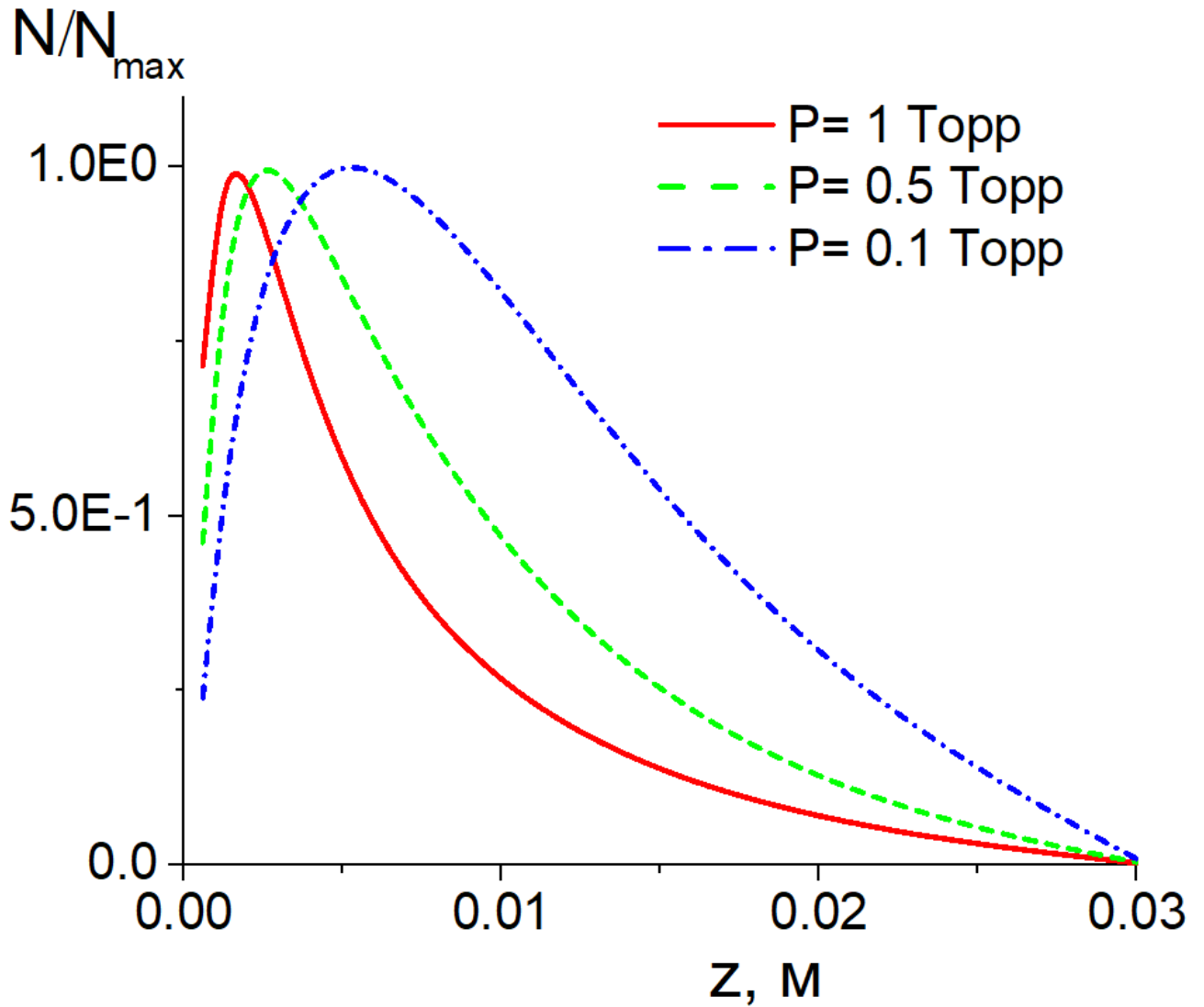


Рис. 10: Нормований розподіл концентрацій димерів при різних значеннях тиску по довжині $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{c}^{-1}$

На рис. 10 зображені нормовані на максимальне значення концентрації димерів при різних тисках. Видно, що при збільшенні тиску максимум концентрації зміщується ближче до катоду.

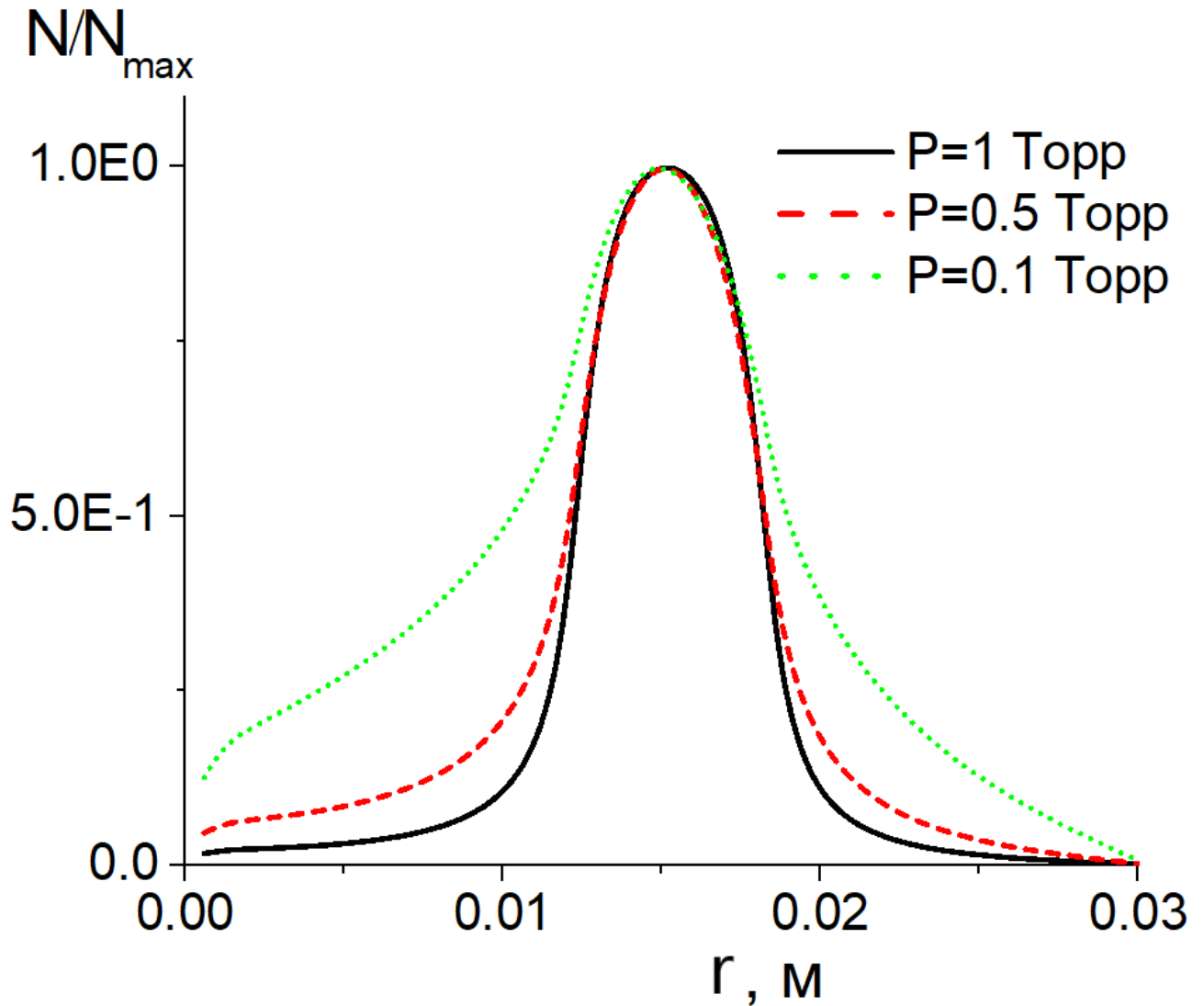


Рис. 11: Нормований розподіл концентрацій димерів при різних значеннях тиску по радіусу при потоці атомів $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$

На рис. 11 зображений розподіл димерів, що й на рис. 10 але по осі r біля катоду. З рисунку можна побачити, що максимум спостерігається біля зони ерозії атомів металу з катоду. Також видно, що чим менше тиск тим більш широкий розподіл концентрацій. З графіку добре видно асиметрію розподілу по радіусу.

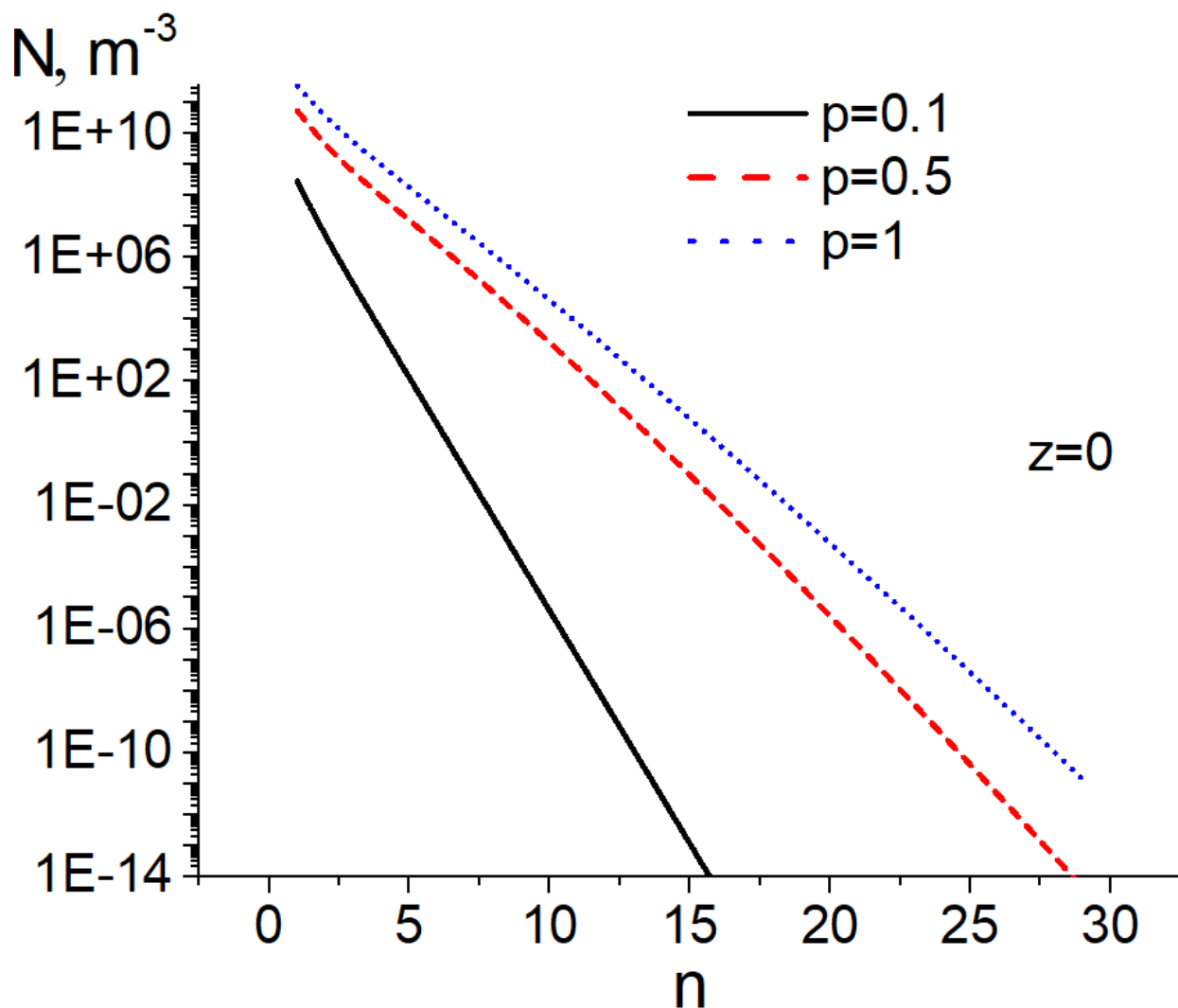


Рис. 12: Розподіл кластерів по розмірам в першій комірці біля зони ерозії при різних значеннях тиску при значеннях потоку $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2} \text{ c}^{-1}$

На рис. 12 приведено розподіли кластерів по розмірам біля катоду навпроти зони ерозії при різних значеннях тиску. З даного графіку видно залежність розподілу кластерів за розміром при різних значеннях тиску. Видно, що при збільшенні тиску збільшується концентрація кластерів більших розмірів. Наприклад, при тиску $p = 0.1$ Торр кластери розміром $n > 15$ взагалі відсутні.

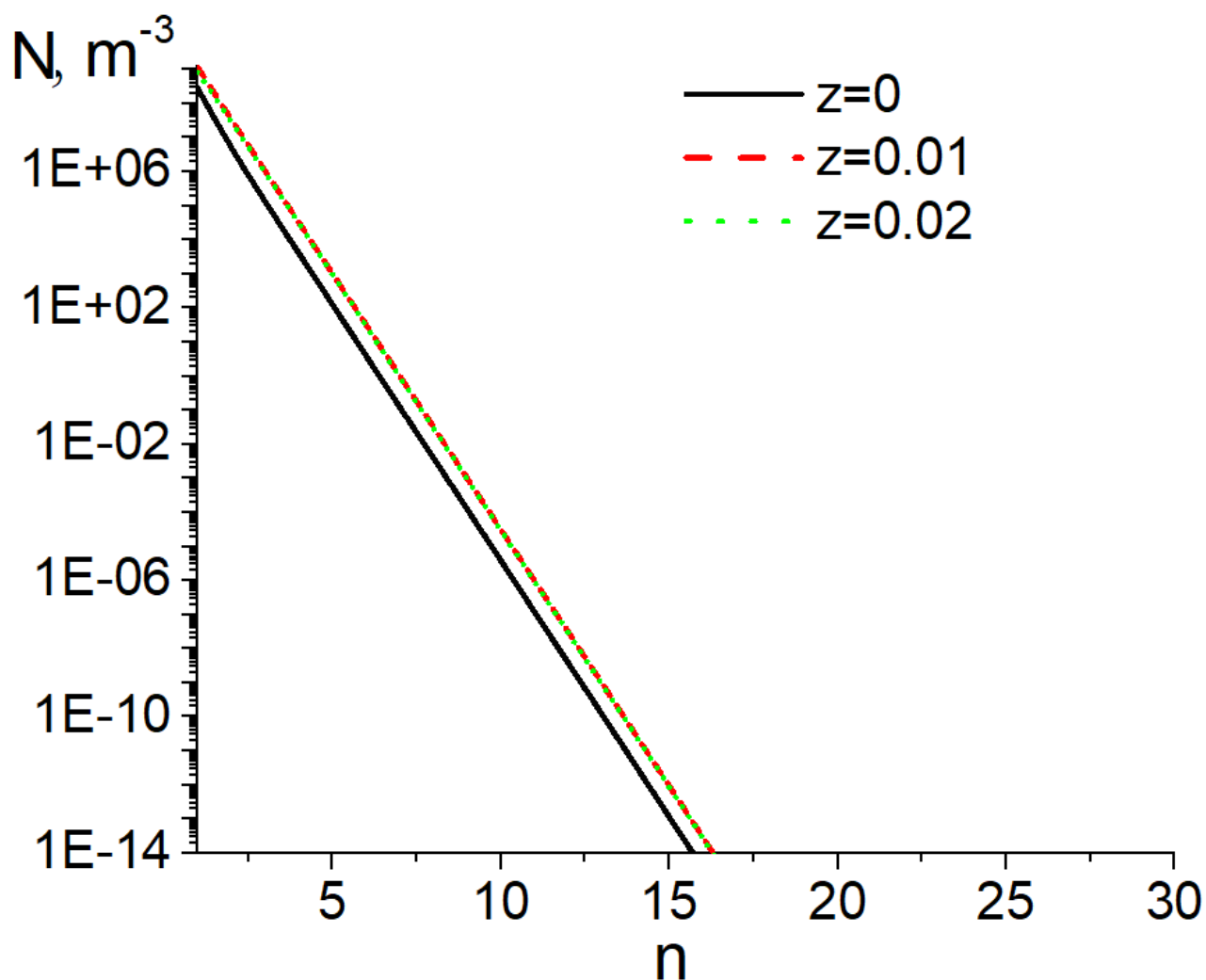


Рис. 13: Розподіл кластерів по розмірам при тиску $p = 0.1$ Торр та потоку атомів $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$

На рис. 13 показано розподіл кластерів по розмірам при тиску $p = 0.1$ Торр. Можна побачити, що розподіли кластерів по розмірам не залежить від відстані від катоду.

Розглянемо результати одержані при потоці атомів металу з зони ерозії $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$. Проведемо моделювання для тиску $p = 1$ Торр.

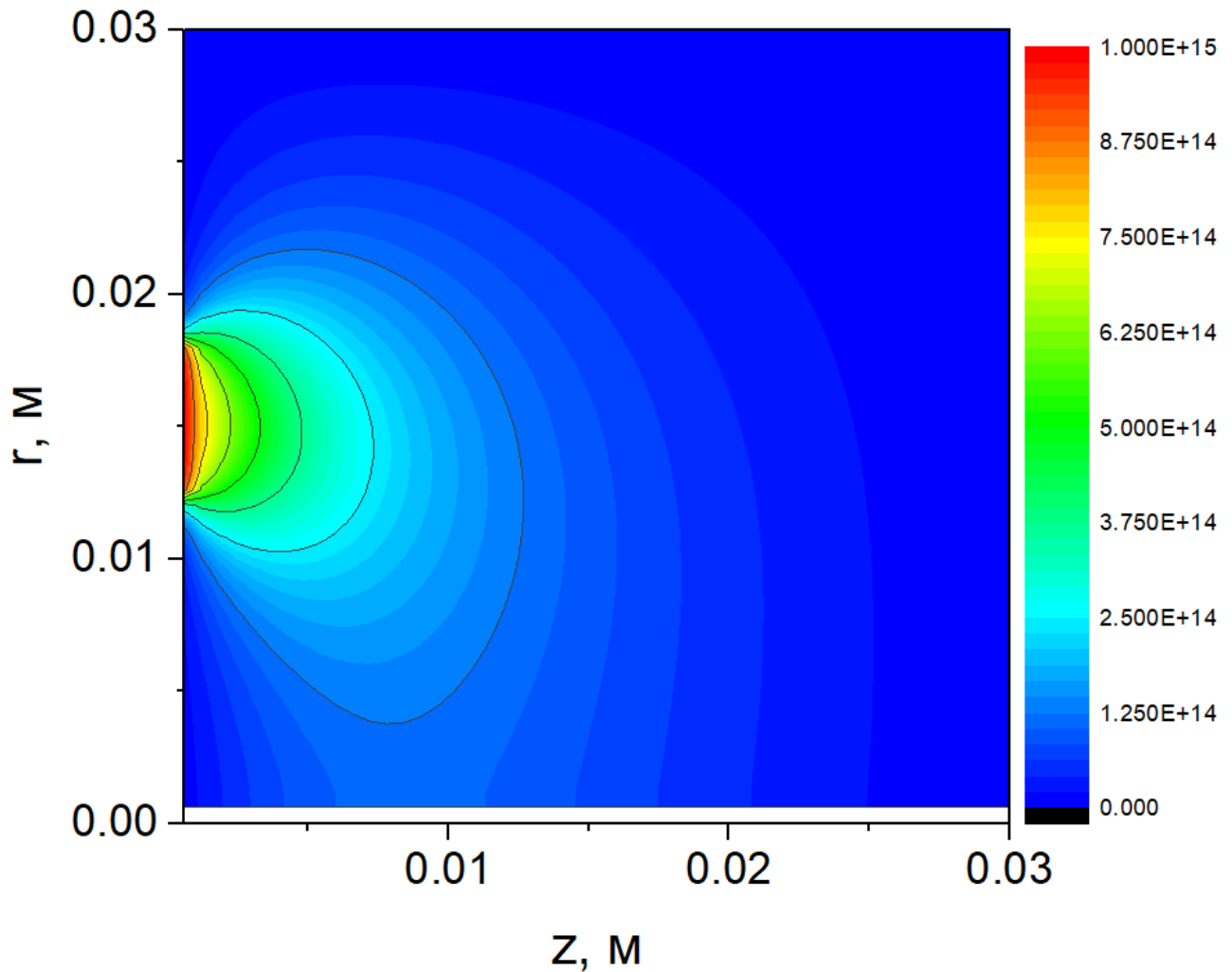


Рис. 14: Розподіл димерів при тиску $p = 1$ Торр та потоку $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$

На рис. 14 зображено розподіл димерів в камері магнетронного розряду при тиску $p = 1$ Торр та потоку $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$. З графіку видно, що при збільшенні значення G_0 , максимум концентрації димерів змістився ближче до катоду в порівнянні з димерами при $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ (рис. 6).

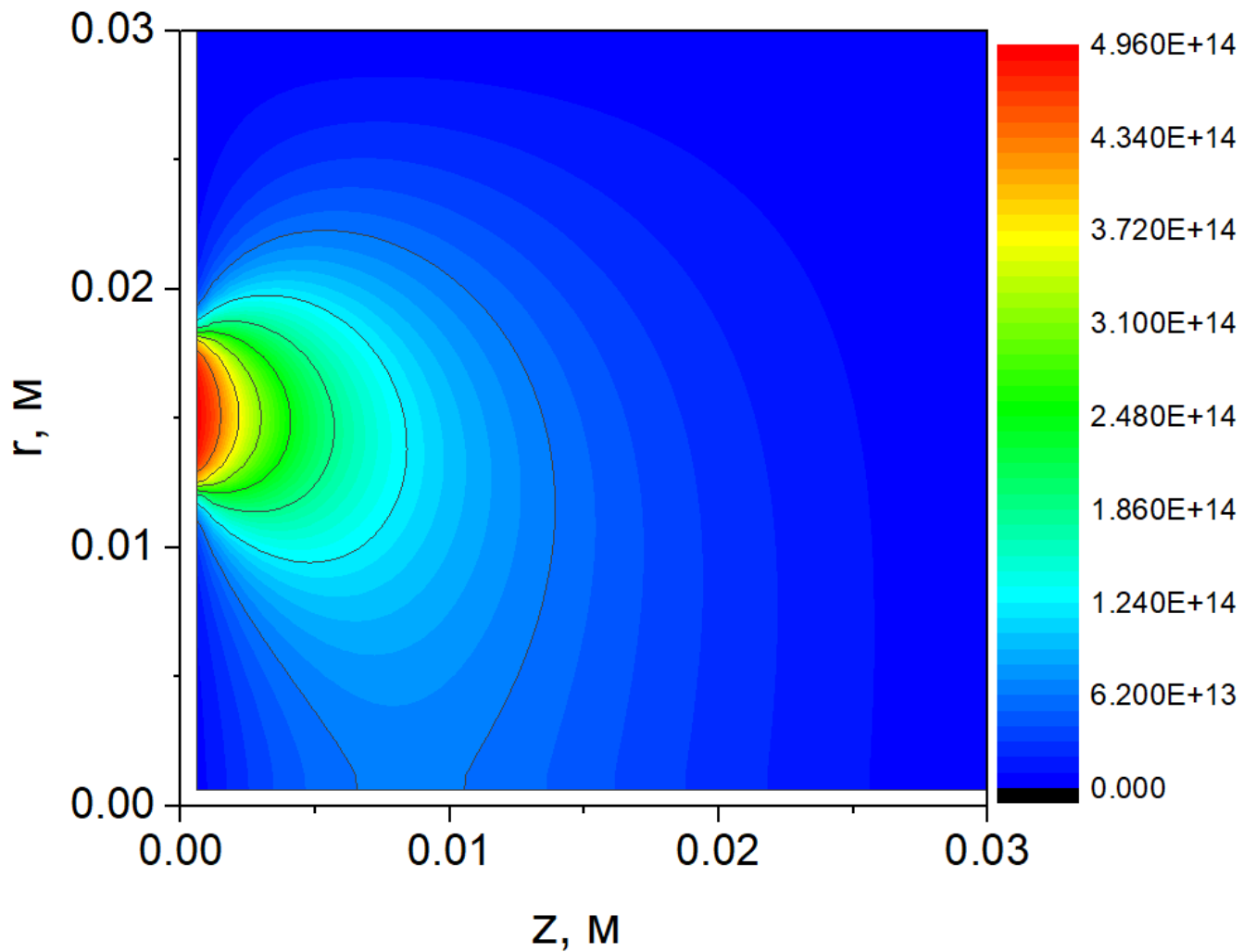


Рис. 15: Розподіл кластерів розміром $N = 5$ при тиску $p = 1$ Торр та потоку $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{c}^{-1}$

На рис. 15 представлено розподіл кластерів розміром $N = 5$ при $p = 1$ Торр та $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{c}^{-1}$. Так само як і для димерів, можна побачити, що максимум концентрації зміщений ближче до зони ерозії.

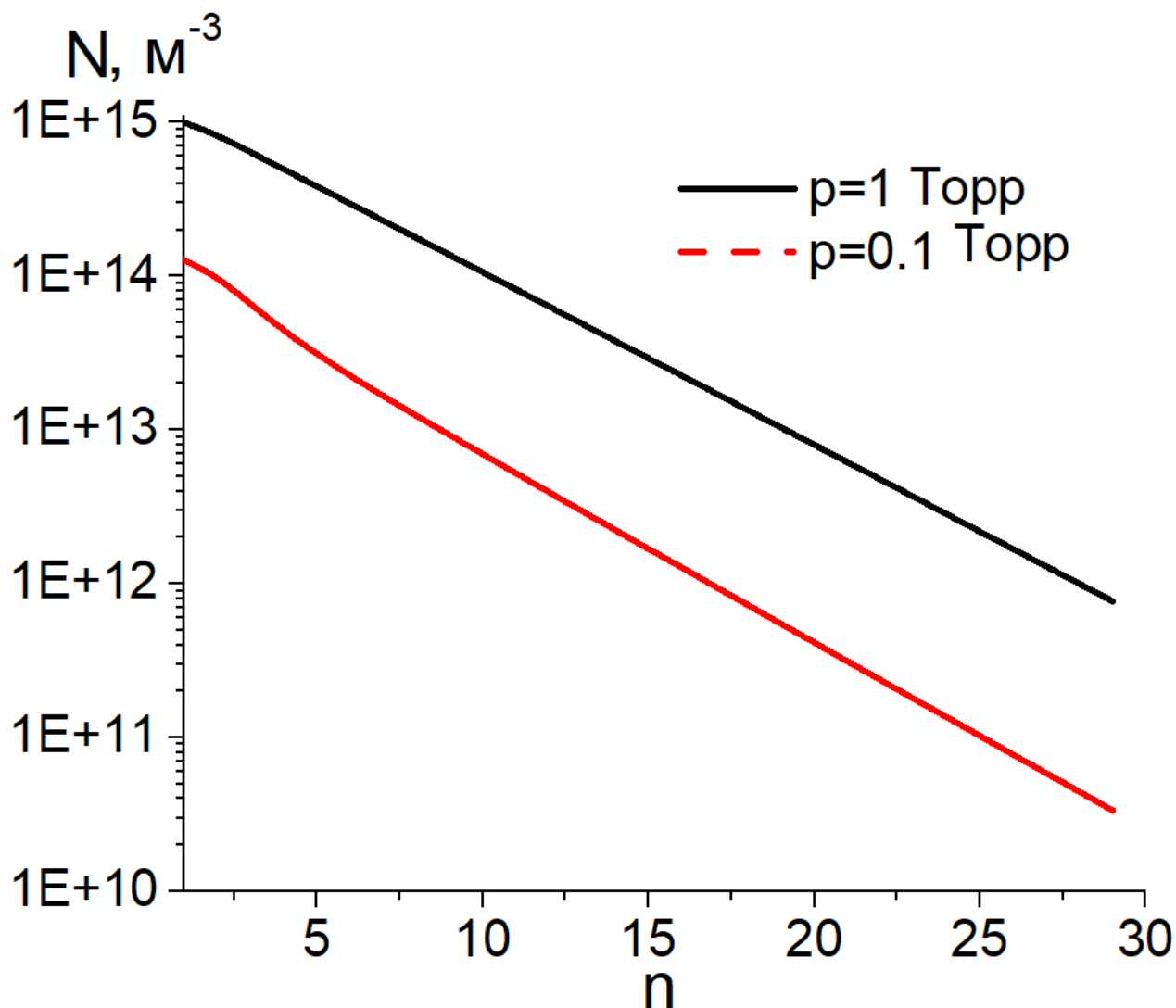


Рис. 16: Розподіл кластерів по розмірам в першій комірці біля зони ерозії при різних значеннях тиску при $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2} \text{ c}^{-1}$

На рис. 16 зображено розподіл кластерів за розміром в першій комірці біля зони ерозії при різних значеннях тиску та потоці $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2} \text{ c}^{-1}$. Порівнюючи графіки на рис.16 та рис. 12 можна зробити висновки, що збільшення значення G_0 призводить до збільшення концентрацій кластерів певних розмірів. Так при тиску $p = 0.1$ Торр, добре видно, що при більших значеннях G_0 можуть виникати кластери більших розмірів.

7 Висновки

За допомогою числового моделювання досліджено дифузію атомів металу, утворення кластерів та їх дифузію в камері магнетронного розряду. Одержані просторові розподіли концентрацій атомів і кластерів в різні моменти часу після початку емісії атомів з катоду. На основі одержаних результатів встановлено:

- Область максимальної концентрації кластерів в камері залежить від тиску буферного газу та потоку атомів металу з катоду. При $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ вона знаходиться на деякій відстані від зони ерозії, яка зменшується при збільшенні тиску газу. При $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ максимум концентрації кластерів реалізується безпосередньо біля зони ерозії;
- При збільшенні тиску буферного газу концентрації кластерів збільшуються, проте вони розподілені в меншій області камери внаслідок зменшення коефіцієнту дифузії;
- Розподіли кластерів по розміру описуються формулами $F_n \sim e^{-\gamma n}$, де n – кількість атомів, з яких складається кластер. При потоці $G_0 = 10^{14} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ коефіцієнт γ зменшується при збільшенні тиску буферного газу, а при $G_0 = 10^{18} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ практично не залежить від тиску.

8 Список літератури

Література

- [1] Thornton J. A. Thin Film Processes / J. A. Thornton, J. L. Vossen, W. Kern // Plasma Sources Sci. Technol. –1978. –V.171. –P.76.
- [2] Fiala. Two-dimensional, hybrid model of low-pressure glow discharges / Fiala, L.C. Pitchford, J. P. Boeuf // Center de Physique Atomique. –1994. –V.49, N.6. –P.5608-5622
- [3] Wasa K. Handbook of Sputter Deposition Technology: Principles, Technology and Applications / Wasa K. Hayakawa S. // Park Ridge, NJ: Noyes Publ. –1992. –P.304
- [4] Sasaki A. Ionized-cluster beam deposition / Takagi T, Yamada I, Sasaki A. // Journal of Vacuum Science and Technology. – 1975. – V.12. –P.1128-1134
- [5] А. В. Гончаров. Моделирование процессов образования и роста кластеров в магнетронном разряде / А. В. Гончаров, П. В. Каштанов // Физика. Математика. Информатика. УДК 533.9 –2007. –С.90-97
- [6] 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
- [7] P. V. Kashtanov. Magnetron plasma and nanotechnology / P. V. Kashtanov, B.M. Smirnov, R. Hipper // Physics - Uspekhi 50(5) –2007. –P.455-488
- [8] 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.
- [9] 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
- [10] Uwe Kortshagen. Nonthermal plasma synthesis of semiconductor nanocrystals / Uwe Kortshagen // J. Phys. D: Appl. Phys. -2009. -V.42. -P.11301-22.

- [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
- [12] А. А. Самарский. Численные методы / А. А. Самарский, А. В. Гулин // Учебное пособие для бузов. -М.:Наука. -1989. -С.432