

ИЗУЧЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЫ И СКОРОСТИ НАНЕСЕНИЯ ТОНКИХ ТИТАНОВЫХ ПЛЕНОК ПРИ РАСПЫЛЕНИИ ЧАСТИЦ В МАГНЕТРОННОМ РАЗРЯДЕ ПОСТОЯННОГО ТОКА

© 2022 г. G. K. Sabavath^{a, *}, R. Swaroop^b, J. Singh^c, A. B. Panda^d,
S. Haldar^e, N. Rao^f, S. K. Mahapatra^b

^a Department of Physics, CMR Engineering College, Kandlakoya, Medchal, Hyderabad, Telangana, India

^b Department of Physical Sciences, Central University of Punjab, Bathinda, India

^c Department of Physics, Akal University, Talwandi Sabo, Bathinda, Punjab, India

^d Birupa College, Indupur, Kendrapara, Odisha, India

^e Hearne Institute for Theoretical Physics, Department of Physics and Astronomy,
Louisiana State University, Baton Rouge, Louisiana, United State of America

^f Department of Physics, St. Martins Engineering College, Secundrabad, Telangana, India

*e-mail: nayagopikishan@gmail.com

Поступила в редакцию 06.10.2021 г.

После доработки 21.01.2022 г.

Принята к публикации 25.01.2022 г.

Пространственные распределения плазменных параметров, таких как температура электронов (T_e) и их плотность (n_e), а также скорости нанесения тонких титановых пленок изучались количественно на установке, где распыление частиц было организовано с помощью магнетронного разряда постоянного тока. Значения T_e и n_e определялись на основе измерений электронного потока и энергетического распределения электронов системой зондов Ленгмюра. Распределение концентрации электронов также вычислялось методом частиц в ячейках при моделировании столкновений методом Монте-Карло (PIC-MCC). Согласно наблюдениям величины T_e и n_e уменьшались по мере удаления от центра катода по радиусу и вдоль оси системы. Скорость нанесения тонких титановых пленок вела себя с удалением от катода аналогичным образом. На основе полученных экспериментальных и расчетных данных был выполнен анализ влияния конфигурации магнитного поля и изменения параметров плазмы на скорость нанесения пленок.

Ключевые слова: плазма в магнетронном распылении, зонд Ленгмюра, тонкая титановая пленка, метод PIC-MCC, пакет программ “Comsol multiphysics”

DOI: 10.31857/S0367292122200124

1. ВВЕДЕНИЕ

Распыления частиц в магнетронном разряде постоянного тока широко используется для нанесения тонких пленок. Этот метод привлекает значительное внимание исследователей из-за высокой скорости осаждения пленок [1]. Увеличение скорости осаждения происходит благодаря совместному действию аксиального магнитного поля и радиального электрического поля. В цилиндрическом магнетронном разряде заряженные частицы движутся под влиянием скрещенных электрического и магнитного полей. Энергичные электроны захватываются во внешнем магнитном поле, что приводит к существенному увеличению эффективности ионизации. Вследствие этого достигается высокая скорость нанесения тонких пленок при малом давлении газа [2]. По-

ведение частиц в плазме магнетронного разряда постоянного тока определяется именно магнетроном. В 1930–1940 гг. магнетроны цилиндрической формы стали использоваться для нанесения пленок при распылении частиц [3, 4]. Без применения магнетрона возможности метода оказались ограничены из-за малой степени ионизации, низкой скорости нанесения напыления и неустойчивости плазмы [5]. Поэтому понимание закономерностей поведения частиц в магнетроне важно для технологий нанесения тонких пленок [6–10]. Температура и концентрация электронов, а также скорость нанесения покрытий, могут меняться в пространстве, как вдоль оси разряда, так и в поперечном направлении. В результате такая неоднородность в магнетроне влияет на качество образуемых тонких пленок. Поэтому в последнее

время внимание исследователей, интересующихся свойствами образующихся пленок, привлекает вопрос о распределении в пространстве параметров плазмы с учетом сложного распределения магнитного поля в плазменном столбе [11–17].

Знание пространственного распределения плазменных параметров позволяет оптимизировать плазмохимические реакции и процесс зарождения и роста тонких пленок. Для измерения характеристик плазмы используются различные методы. К ним относятся оптическая эмиссионная спектроскопия (OES), метод зондов Ленгмюра (LP), когерентное антистоксово комбинационное рассеяние (CARS), лазерно-индуцированная флуоресценция (LIF) и так далее [18–20]. В частности, метод LP позволяет измерять параметры плазмы в плазме низкого давления типа той, что используется в распылительных системах на основе магнетронного разряда постоянного тока [21–23].

В настоящее время ведутся измерения параметров плазмы с целью оптимизации процесса получения тонких пленок с заданными свойствами [24–26]. Однако взаимосвязь между параметрами магнетронного разряда постоянного тока, параметрами разрядной плазмы и скоростью нанесения пленок почти не исследовалась [27–32]. В [27] измерялись аксиальные распределения электронной температуры (T_e) и концентрации (n_e), которые менялись, соответственно, в диапазонах 1.5–2 эВ и 2.5×10^{11} – 4.5×10^{11} см⁻³ для систем с физическим осаждением паров (PVD) при магнетронном распылении. Но расчетные и экспериментальные результаты анализировались отдельно и не сопоставлялись друг с другом.

Исходя из сказанного, целью данной работы было определение радиальных и аксиальных распределений таких параметров плазмы, как T_e и n_e . Они находились методом зондов Ленгмюра, которые позволяли непосредственно измерять поток электронов на зонд (EF) и функцию распределения электронов по энергиям (EEDF). Конфигурация магнетрона и распределение магнитного поля в нем моделировались численно и сравнивались с реальным магнитным полем в установке. Пространственное распределение концентрации электронов вычислялось для реального распределения магнитного поля в магнетроне с помощью численного кода на основе метода частиц в ячейках с моделированием столкновений методом Монте Карло (PIC-MCC). Скорость осаждения (D_r) тонких титановых пленок при постоянном подводимом напряжении и заданном давлении газа определялась в тех же точках пространства, где проводились зондовые измерения. Результаты определения скорости осаждения сопоставлялись и анализировались

вместе с результатами расчетов и измерений параметров плазмы.

2. ТЕОРИЯ И ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

2.1. Функция распределения электронов по энергиям (EEDF)

Концентрация электронов (n_e) и электронная температура (T_e) вычислялись на основе функции распределения электронов по энергиям, которая определялась по вольтамперной (I – V) характеристике зонда Ленгмюра согласно соотношению [33, 34]

$$f(\epsilon) = \frac{4}{Ae^2} \sqrt{\frac{m}{2e}} x \frac{d^2 I_e}{dV_p^2}, \quad (1)$$

где $d^2 I_e / dV_p^2$ – вторая производная измеренного тока на зонд по напряжению, V_p – напряжение на зонде относительно плазменного потенциала, A – площадь поверхности зонда, e – заряд электрона, m – его масса. Потенциал плазмы – это напряжение, при котором вторая производная кривой I – V обращается в ноль [35]. Выражения для определения концентрации электронов и ее температуры записываются в виде

$$n_e = \int_0^{\epsilon_{\max}} f(\epsilon) d\epsilon, \quad (2)$$

$$T_{\text{eff}} = \frac{2}{3n_e} \int_0^{\epsilon_{\max}} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon, \quad (3)$$

где значение $\epsilon_{\max}$ соответствует границе диапазона энергий, в котором измеряется функция распределения.

2.2. Метод электронного потока (EF)

Концентрация электронов и электронная температура также определялись по кривым I – V методом электронного потока. В этом случае температура электронов находилась из наклона кривых I – V с помощью соотношения

$$\frac{d \ln(I)}{dV} = \frac{1}{T_e}, \quad (4)$$

где I – ток на зонд, а V – его напряжение. Концентрация электронов оценивалась согласно боровской теории приповерхностного слоя [36, 37]

$$n_e = \frac{I_{\text{es}}}{eA\sqrt{T_e/2\pi m_e}}, \quad (5)$$

где I_{es} – электронный ток насыщения в зависимости I – V . Эти подходы являются классическими в отношении определения параметров плазмы на основе зондовых измерений. Причем метод элек-

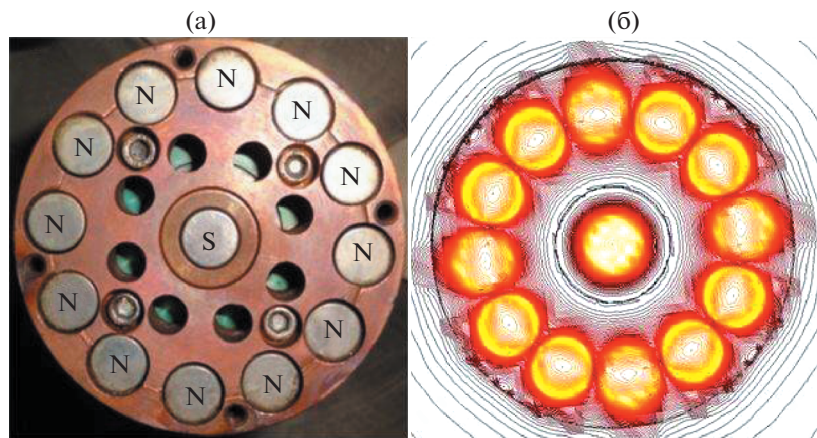


Рис. 1. Схема магнитов в магнетроне (а) и распределение магнитного поля (б).

тронного потока и метод функции распределения электронов по энергиям, как объяснялось ранее, отличаются друг от друга [38, 39].

2.3. Детали численного моделирования

Распределение магнитного поля в магнетроне моделировалось с помощью пакета программ COMSOL Multiphysics. Магнетрон диаметром 6 см состоял из 13 магнитов D63, имеющих одну и ту же высоту h и радиус r . Один из магнитов (южный полюс) находился в центре системы и был окружен двенадцатью другими магнитами (северные полюса), как показано на рис. 1а. Конструкция реального магнетрона (см. рис. 1) отображалась в среде COMSOL с помощью решения уравнений $x^2 + y^2 = r^2$ и $y = x \tan \theta$, где x, y — координаты каждого магнита, r — радиус магнетрона, а $\tan \theta$ — угловой коэффициент. Концентрация плазмы в магнетроне постоянного тока вычислялась с помощью метода частиц в ячейках (PIC). Ионизация и другие столкновения моделировались в рамках метода Монте Карло (МСС). Профиль концентрации электронов определялся вдоль оси z при рассмотрении стабильной плазмы в магнитном поле магнетрона. Тепловые скорости вдоль осей x и y находились согласно максвелловскому распределению по скоростям. Подробная информация по алгоритмам метода PIC—МСС приведена в приложении.

3. ДЕТАЛИ ЭКСПЕРИМЕНТА

Схема системы распыления вещества в магнетронном разряде постоянного тока приведена на рис. 2. Она представляет собой цилиндрическую камеру из нержавеющей стали диаметром 27 см и длиной 23 см. Установка включает в себя оборудование для подвода постоянного напряжения

(а), средства измерения, позволяющие снимать вольтамперную характеристику (б), разъемы компании Wilson (в), верхний фланец (г), цилиндрическую камеру из нержавеющей стали (д), пушку для магнетронного распыления (е), мишень (ж), систему зондов Ленгмюра (з), вакуумный насос (и), держатель подложки (к) и нижний фланец (л). На верхнем фланце устанавливаются магнетронная система распыления и зондовая система, а к нижнему фланцу крепится держатель подложки. Схема всей системы приведена в прежних публикациях [40, 41].

Многозондовая система (MLP) использовалась для измерения вольтамперных характеристик. Радиус Дебая был равен 1×10^{-4} м. Толщина приповерхностного слоя плазмы примерно равна удвоенному радиусу Дебая и составляла 0.2 мм, в то время как диаметр зонда Ленгмюра был равен 0.5 мм. Поскольку этот диаметр гораздо больше толщины слоя, то расстояние между зондами выбиралось равным 0.5 см, что позволяло снимать зондовые вольтамперные характеристики. При этом выполнялось условие того, что радиус зонда (0.25 мм) был много больше радиуса Дебая ($\lambda_D = 0.1$ мм). Система зондов состояла из 4 цилиндрических зондов Ленгмюра, которые были изолированы друг от друга, располагались на кварцевой пластине и обозначались буквами А, В, С и D. Зонд А соответствовал центру катода, в то время как зонды В, С и D соответствовали радиальному сдвигу относительно центра на 0.5, 1 и 1.5 см. Все зонды были подключены к измерительной системе (Keithley 2410, 1100 В). Система зондов могла двигаться вверх и вниз без нарушения вакуума посредством разъемов компании Wilson. Пять различных позиций (с 1-й по 5-ю) соответствовали удалению от катода на 2.5, 3, 3.5, 4 и 4.5 см, соответственно. В каждый момент измерений система зондов располагалась на заданном расстоя-

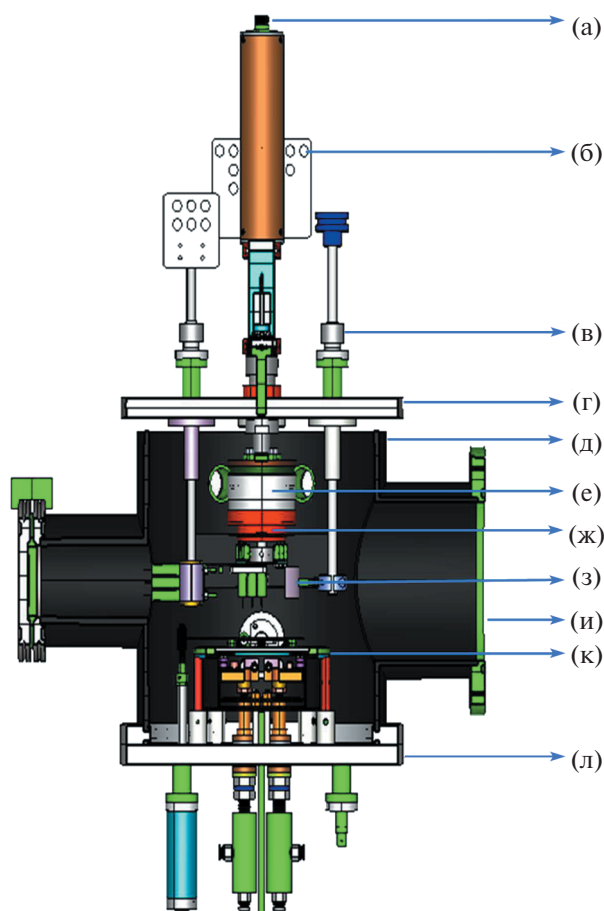


Рис. 2. Схема системы распыления на основе магнетронного разряда постоянного тока: (а)–(л) разные части системы с пояснениями в тексте.

нии по оси и позволяла проводить исследования в четырех разных точках по радиусу плазменного столба. Вольтамперные характеристики снимались одновременно для каждого зонда. Измерения повторялись для пяти разных расстояний от катода, что в итоге давало информацию о вольтамперных характеристиках для 20 разных точек в пространстве. Значения n_e и T_e в этих точках получались из обработки измеренных характеристик.

Камера откачивалась центробежным и диффузионным насосами до давления 5×10^{-6} мбар. Рабочее давление составляло 6×10^{-3} мбар и контролировалось во время эксперимента. Рабочим газом был аргон, которым наполнялась камера со скоростью $20 \text{ см}^3/\text{мин}$ при стандартных условиях. Для распыления использовалась титановая мишень диаметром 5.08 см и толщиной 3 мм , которая для этого помещалась в магнетронную систему. Силиконовые подложки размером $5 \times 5 \text{ мм}^2$ и толщиной 0.5 мм перед нанесением пленок очищались с помощью разбавленной фтороводород-

ной кислоты, после чего на протяжении 15 минут производилась их обработка ультразвуком. Далее подложки высушивались при комнатной температуре. Эти подложки могли устанавливаться в тех же четырех различных положениях по радиусу и пяти различных положениях по оси, что и зонды, с помощью которых снимались вольтамперные характеристики. Зондовая система сдвигалась, а на ее место помещались подложки во время напыления титановых пленок. В этом режиме подводимая мощность составляла 16 Вт ($320 \text{ В} \times 0.05 \text{ А}$). Для оценки скорости нанесения пленок (D_p) измерялся вес подложки до и после осаждения пленки. Измерения производились с помощью аналитических приборов фирмы Mettler-Toledo (производство Германии). Скорость D_p определялась как отношение разницы весов подложки после и до осаждения к времени осаждения. Толщина осажденной пленки анализировалась с помощью прибора для измерения профиля поверхности.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 3 представлены распределение силовых линий магнитного поля в магнетроне (а) и радиальные распределения этого поля для трех различных расстояний в направлении по оси от магнетрона: (б) 0 см , (в) 1 см и (г) 2 см . Из рисунка следует, что с удалением от катода вдоль оси магнитное поле уменьшается.

При удалении от оси в радиальном направлении магнитное поле сначала растет, а потом падает. Этот вывод подтверждается природой магнитного поля, представленного на рис. 4, где приведены его измерения с помощью флюксометра. На рис. 4а представлены радиальные профили поля для пяти различных расстояний от магнетрона. Видно, что с удалением от него максимальные значения магнитного поля снижаются. Согласно рис. 4а радиальные распределения магнитного поля симметричны относительно центра катода. На рис. 4б приведено вычисленное распределение магнитного поля магнетрона. Наблюдается согласие между расчетными данными и результатами измерений магнитного поля.

Измеренные распределения этого поля использовались для расчета распределений концентрации электронов в плазме. На рис. 4в представлен вычисленный методом PIC-MCC профиль концентрации электронов, который сравнивается с фотографией плазмы (см. вставку к рис. 4в). Концентрация электронов, как ожидается, уменьшается с удалением по радиусу от центра катода и вдоль оси от его поверхности. Для наглядности распределение концентрации электронов представлено в виде цветных профилей [42, 43]. Профили не являются гладкими из-за огра-

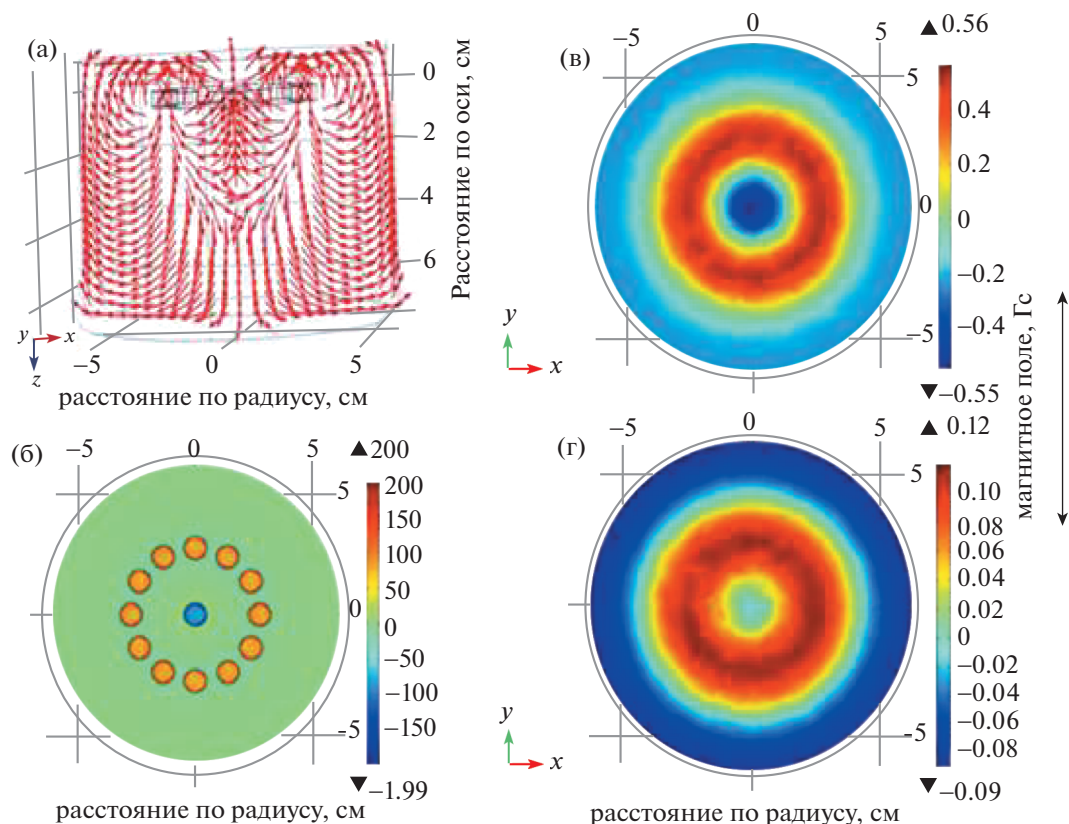


Рис. 3. Силовые линии магнитного поля (а) и радиальные профили магнитного поля при удалении от магнетрона на 0 см (б), 1 см (в) и 2 см (г).

ничений системы обработки данных на масштабах радиуса Дебая. Полученные расчетные данные согласуются с измерениями концентрации электронов, результаты которых приведены на рис. 5. Здесь представлены данные, полученные как методом EF, так и методом EEDF.

Из рис. 5 следует, что n_e снижается по мере удаления от центра катода, как вдоль оси, так и в радиальном направлении. В центральной области магнитное поле слабее по сравнению с внешней областью. Из-за этого электроны оказываются запертыми, и плазма фокусируется в центре. Поэтому выполняется сравнение концентрации электронов на оси и на расстояниях по радиусу вплоть до 1.5 см. Аналогичным образом, магнитное поле является большим около поверхности катода и слабеет при удалении от нее. Это вызывает изменение концентрации электронов с увеличением расстояния вдоль оси системы. Поэтому значения концентрации электронов около центра катода больше, чем на расстоянии 4.5 см от него в направлении оси. Распределение концентрации электронов в магнетронном разряде вычислялось на основе распределения магнитно-

го поля и ранее [44]. Эти данные согласуются с результатами настоящей работы.

На рис. 6а и 6б приведены результаты измерения температуры электронов методами EF и EEDF. Здесь T_e также снижается с удалением от центра катода по радиусу и по оси. Около катода при ионизационных столкновениях электронов с атомами рождаются новые электроны. Они приобретают высокую кинетическую энергию, поскольку в областях с сильным магнитным полем у катода температура T_e высокая. При удалении от катода по оси кинетическая энергия электронов снижается, возможно — из-за столкновений с распыляемыми атомами. Поэтому температура T_e снижается по мере удаления от поверхности катода. Около катода также возможна значительная потеря ионов и эмиссия вторичных электронов. Эти вторичные электроны ускоряются в электрическом поле слоя, но оказываются запертыми внешним магнитным полем. Локализация вторичных электронов может приводить к увеличению эффективности ионизации, что приводит к высоким значениям концентрации и температуры электронов перед катодной областью [45, 46]. Из анализа величин n_e и T_e , измеренных методами

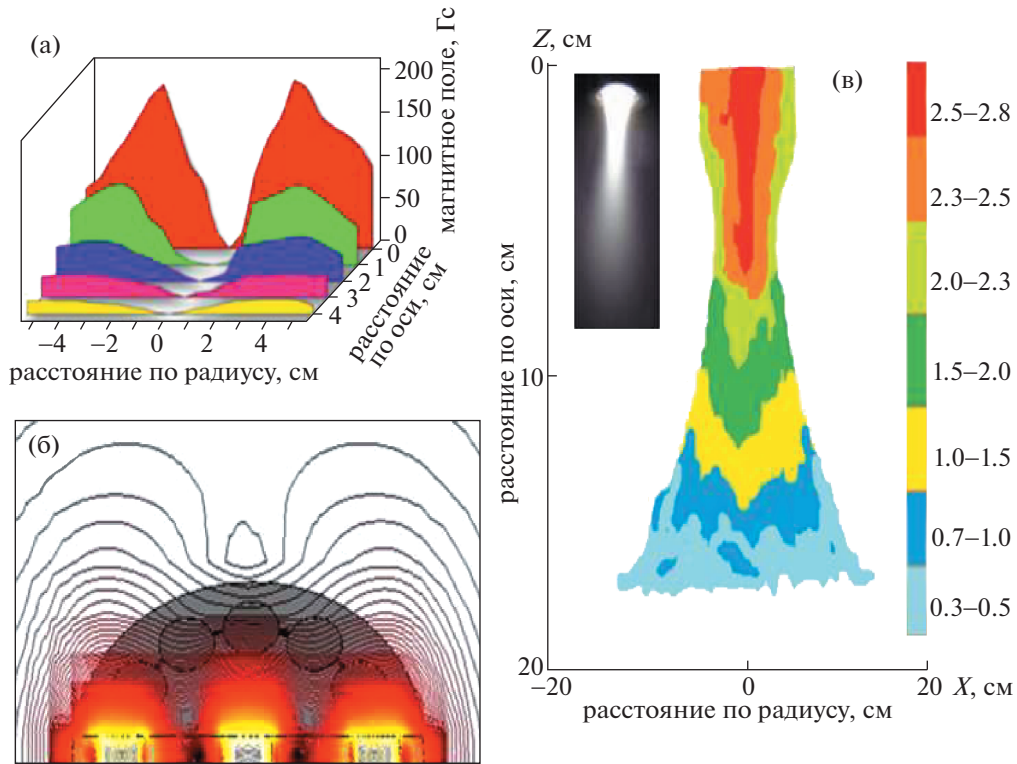


Рис. 4. Измеренные с помощью флюксметра радиальные профили магнитного поля для пяти разных положений по оси (а), распределение магнитного поля магнетрона, вычисленное с помощью пакета CST (б), распределение концентрации электронов в плазме магнетронного разряда постоянного тока, вычисленное методом PIC-MCC (на вкладке фото реальной плазмы) (в).

EF и EEDF, следует, что метод EF лучше подходит для случаев с немаксвелловским распределением электронов по энергиям, в то время как метод EEDF оправдан для случая, когда распределение максвелловское. Интересно наблюдать отличия в результатах измерения электронной температуры (ΔT_e) и электронной концентрации (Δn_e), полученных методами EEDF и EF. На рис. 7 приведены эти отличия, которые определялись по формулам (6) и (7)

$$\Delta n_e = n_e^{EEDF} - n_e^{EF}, \quad (6)$$

$$\Delta T_e = T_e^{EEDF} - T_e^{EF}. \quad (7)$$

Из рис. 7а следует, что максимальное отклонение по плотности электронов достигает $(0.35-0.74) \times 10^{15} \text{ м}^{-3}$ и наблюдается в областях, закрашенных на рисунке желтым, темно-красным и красным цветами (обозначены на рисунке штриховой линией). На рис. 5в область с максимальной концентрацией электронов отмечена аналогичными цветами (и линией с двумя стрелками) в левой нижней области рисунка. На рис. 7а в данной области различие между концентрациями, измеренными разными методами, существенно меньше — $0.08 \times 10^{15} \text{ м}^{-3}$ (область отмечена линией с

двумя стрелками). Отсюда следует, что в области с высокой концентрацией электронов различия между результатами измерений разными методами невелико.

Аналогичным образом, область с меньшей температурой электронов характеризуется наибольшим отклонением в ее измерениях разными методами на рис. 6в. Это также видно на рис. 7б при удалении от центра катода более чем на 0.4 см по радиусу и более чем на 3.5 см по оси. Таким образом, из рис. 7 следует, что в областях с пониженными значениями концентрации и температуры электронов наблюдаются наибольшие различия между их измерениями разными методами. Поэтому магнитное поле приводит к эффективной локализации плазмы вблизи катода, где получается напыление тонких пленок с большими размерами зерен. Скорость напыления D_r измерялась в тех же точках пространства, что и значения T_e и n_e . Для определения этой скорости использовалось уравнение

$$D_r = \frac{w_2 - w_1}{t_2 - t_1}, \quad (8)$$

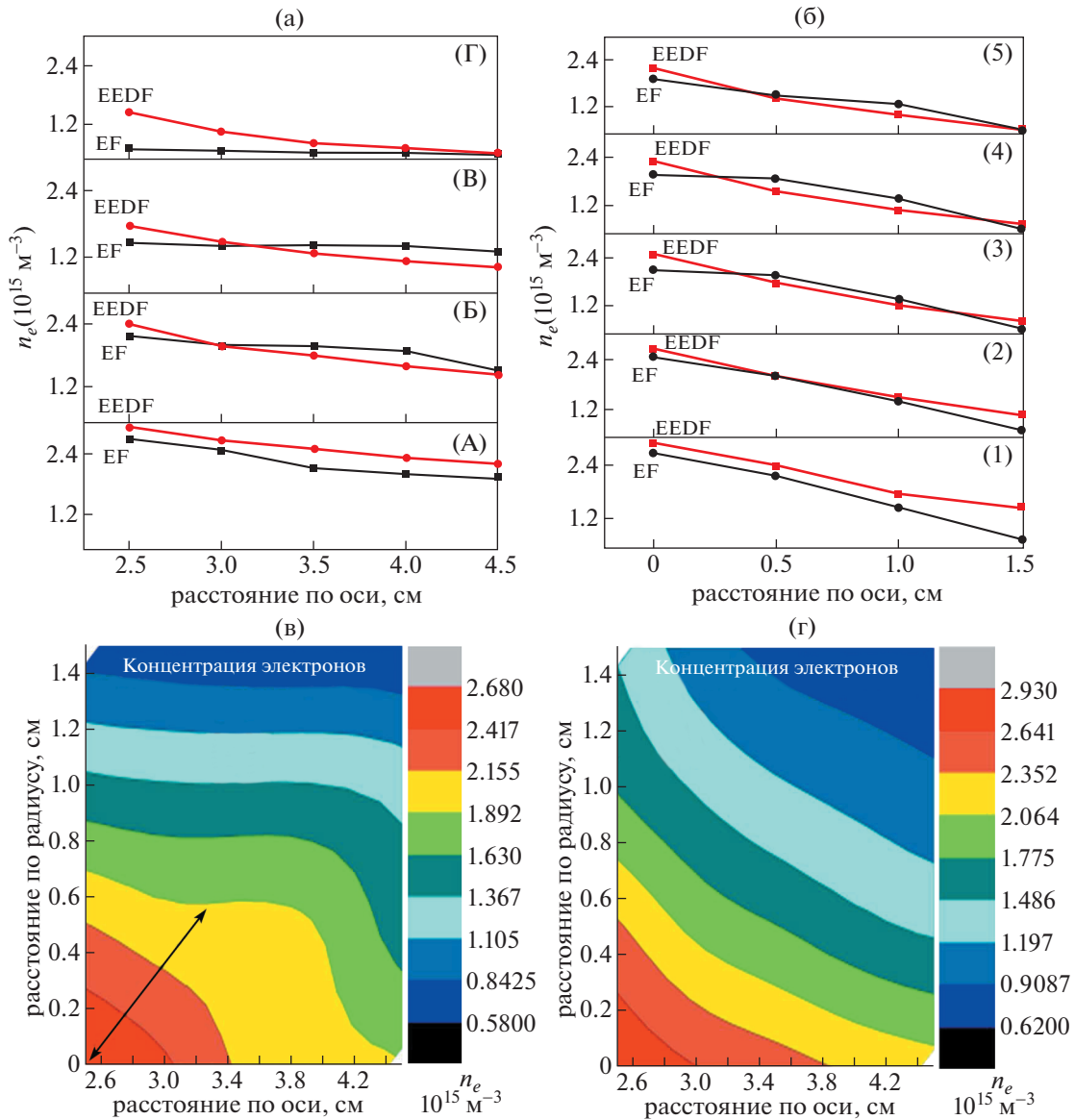


Рис. 5. Распределение концентрации электронов по оси для четырех (А, Б, В и Г) разных положений по радиусу (а) и по радиусу для пяти (1, 2, 3, 4 и 5) разных положений по оси (б); 2D-распределение концентрации электронов, вычисленное методом EF (в) и методом EEDF (г).

где w_1 и w_2 — вес силиконовой подложки до и после напыления, а t_1 и t_2 — время начала и окончания напыления, соответственно.

Рисунок 8 показывает, что значения D_r меняются в пространстве по аналогии со значениями n_e и T_e : скорость роста наибольшая около поверхности катода и уменьшается с удалением по радиусу и по оси. Об изменении скорости D_r с изменением магнитного поля также сообщалось ранее [47–49]; эти данные находятся в согласии с полученными в настоящей работе. На рис. 9 приведена измеренная толщина осаждаемых тонких пленок в зависимости от смещения вдоль оси и по

радиусу системы. Эти распределения подобны распределениям параметров плазмы и скорости напыления D_r . В основе процесса распыления лежит реакция $\text{Ar} + M \rightarrow M^+ + \text{Ar} + e$. В непосредственной близости к поверхности (на расстояниях порядка 0.5 см от нее) наблюдаются более высокие температуры электронов. В результате ускорение заряженных частиц приводит к нанесению тонких пленок с более крупными зернами. Повышенная концентрация электронов около поверхности способствует более высокой концентрации ионов и нейтральных атомов титана,

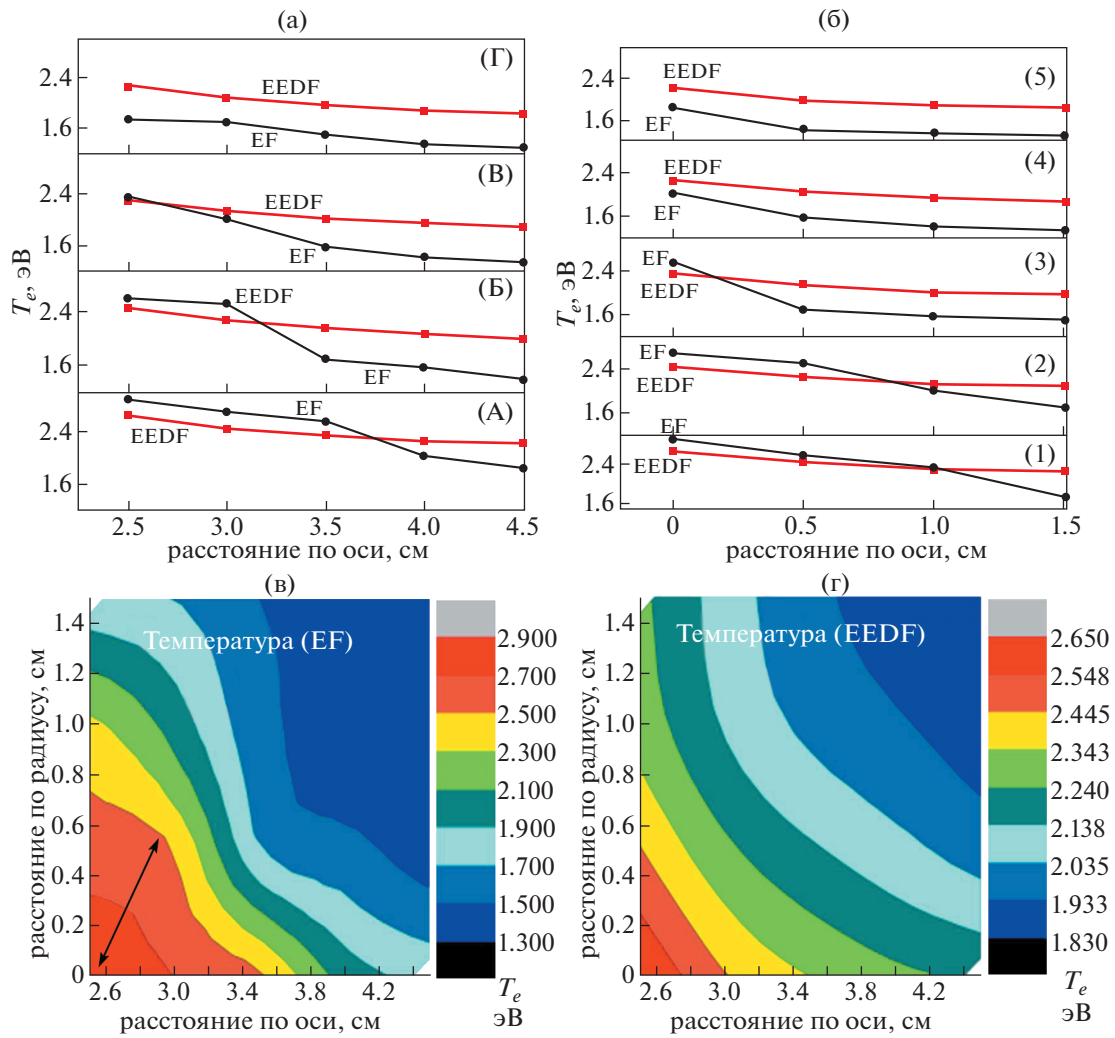


Рис. 6. Распределение температуры электронов по оси для четырех (А, Б, В и Г) разных положений по радиусу (а) и по радиусу для пяти (1, 2, 3, 4 и 5) разных положений по оси (б); 2D-распределение температуры электронов, вычисленное методом EF (в) и методом EEDF (г).

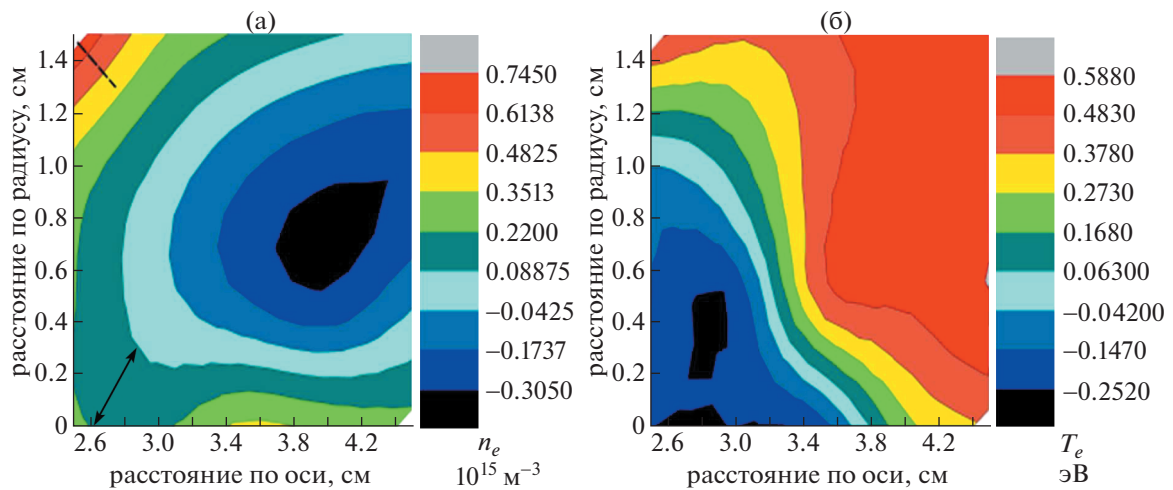


Рис. 7. Отличия в электронной плотности (а) и температуре (б), измеренных методами EEDF и EF.

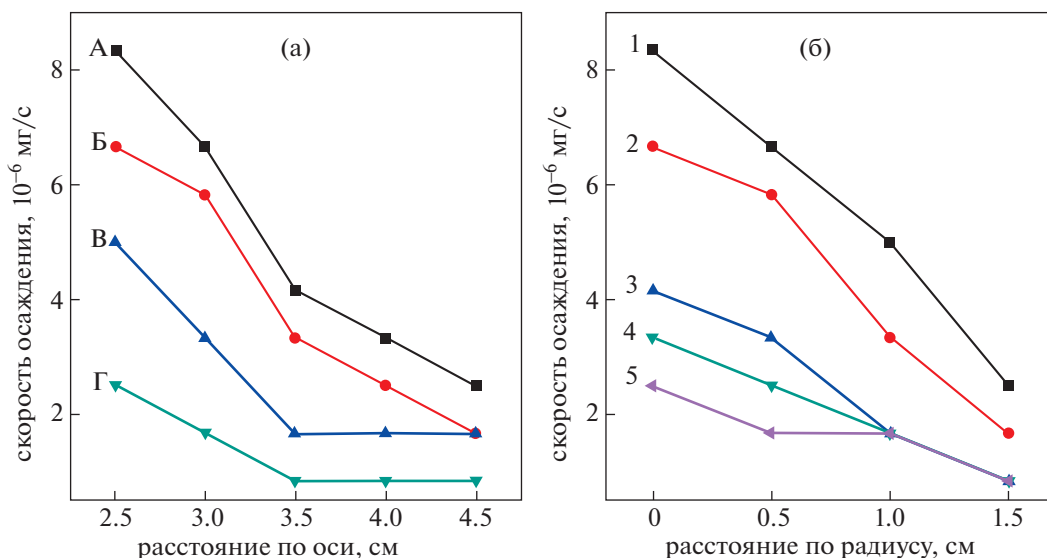


Рис. 8. Изменение скорости осаждения пленки по оси при четырех (А, Б, В и Г) разных положениях по радиусу (а) и по радиусу при пяти (1, 2, 3, 4 и 5) разных положениях по оси (б).

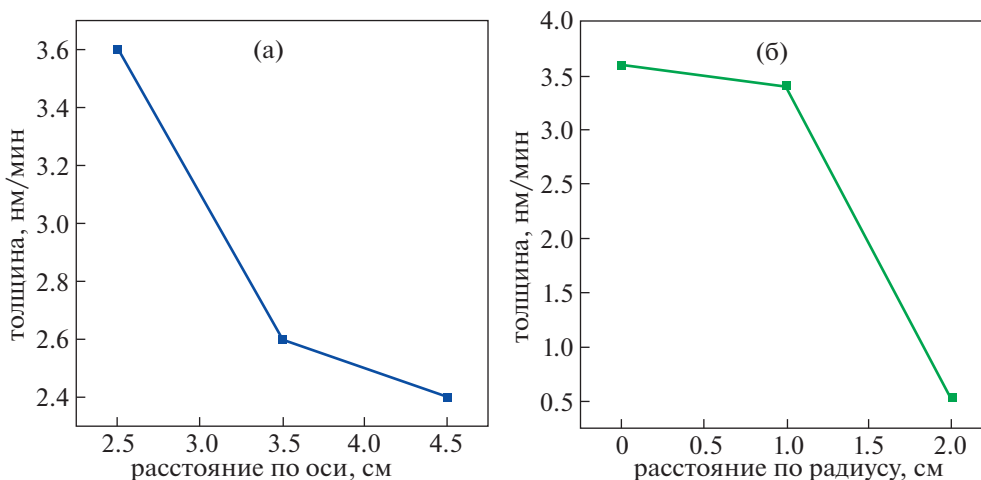


Рис. 9. Толщина нанесенной тонкой титановой пленки в зависимости от положения подложки вдоль оси (а) и по радиусу (б).

которые способствуют более быстрому росту тонких пленок [50].

ВЫВОДЫ

Пространственное распределение параметров плазмы и скорости осаждения пленок в описываемой магнетронной системе определяются пространственным распределением магнитного поля. Значения температуры и концентрации электронов уменьшаются с удалением от катода вдоль радиуса и по оси системы. Аналогичные закономерности наблюдаются и для распределения в пространстве скорости осаждения пленок. Маг-

нитное поле реальной системы измеряется с помощью флюксметра и моделируется с помощью пакета программ COMSOL-Multiphysics. Изменение в пространстве параметров плазмы влияет на пространственное распределение скорости нанесения пленок.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ОПИСАНИЕ РАСЧЕТОВ PIC-MCC

Модуль PIC

Перед началом моделирования создается расчетная сетка с ячейками в трехмерном простран-

стве, границы которых имеют цилиндрическую форму. В расчетах используется цилиндрическая система координат, чтобы максимально использовать азимутальную симметрию системы распыления в магнетронном разряде постоянного тока [42, 51].

Сначала вычисляются значения магнитного (B) и электрического (E) полей (при постоянном напряжении на границах) в предположении об отсутствии любых электрических зарядов. Величины невозмущенных полей определяются в узлах трехмерной сетки.

Уравнение Лапласа для электрического поля решается в цилиндрических координатах популярным методом конечных разностей [52, 53]. В этом методе осуществляется дискретизация уравнений, что позволяет их решать численно методом второго порядка при совместном использовании разностей вперед и назад:

$$\nabla^2 V = 0, \quad (1П)$$

$$\left(\frac{1}{r}\right) \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \left(\left(\frac{1}{r^2}\right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial \theta^2}\right) + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}\right), \quad (2П)$$

$$E_\theta = -\frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta}, \quad E_z = -\frac{\partial \phi}{\partial z}, \quad E_r = -\frac{\partial \phi}{\partial r}. \quad (3П)$$

При вычислении суммарного магнитного поля используется суперпозиция полей от каждого из магнитов (12 цилиндрических магнитов, размещенных по окружности в рассматриваемом здесь магнетроне) с учетом азимутальной симметрии системы диполей. Учет суперпозиции полей в вычислениях оказывается гораздо менее трудоемким и более эффективным, чем расчеты с использованием аналитических соотношений для поля.

Выражение для магнитного поля в сферических координатах от одиночного диполя хорошо известно и имеет вид

$$B_{dip}(R, \vartheta) = \frac{\mu_0 m}{4\pi R^3} (2 \cos \vartheta \hat{r} + \sin \vartheta \hat{\vartheta}) \quad (4П)$$

Это выражение было преобразовано для цилиндрической системы координат.

Все уравнения записываются в конечных разностях. Детали этой процедуры и других процедур, обычно используемых в методе PIC MCC (таких как учет ячеек с разными весами), здесь не приводятся, поскольку в литературе имеются детальные описания этих вопросов [54–56]. Из-за рождения ионов, электронов и кластеров происходит возмущение исходных полей. В данной работе ионные кластеры и нейтральные частицы рассматриваются как частицы для моделирования, а электроны выступают в качестве фона. Уравнение Пуассона не решается в явном виде. Вместо этого, чтобы упростить алгоритм при

описании пространственных сеток и временной динамики, используется метод возмущений.

Модуль MCC

Две модели применяются при описании ионизационных столкновений. Столкновения, в которых энергия частиц близка или больше потенциала ионизации, описываются в рамках томсоновской модели, а в случае, когда энергия меньше потенциала ионизации, применяется модель ступенчатой ионизации. В существующей литературе ради простоты ступенчатой ионизацией часто пренебрегают [57]. Поскольку температура в магнетронном разряде постоянного тока много меньше потенциалов ионизации большинства участвующих в процессе частиц, то оказывается, что эффективность ступенчатой ионизации гораздо больше, чем прямой ионизации [58].

1. В томсоновской модели для $T_e \approx J$:

$$K_{ion} = (K_0 \sqrt{z}) \frac{e^{-z}}{1+z}, \quad (5П)$$

где J – потенциал ионизации атомов аргона и $z = J/T_e$.

2. Для ступенчатой ионизации при $T_e \ll J$:

$$K_{ion} = \frac{\pi e^4}{J^2} \sqrt{\frac{2T_e}{m_e}} e^{-J/T_e}, \quad (6П)$$

где $K_0 = \frac{\pi e^4}{J^2} \sqrt{\frac{2J}{m_e}}$.

Как сказано выше, из-за низких температур в магнетронном разряде роль ступенчатой ионизации гораздо выше, чем прямой ионизации для большинства нейтральных частиц. Из-за малых ($\approx 10^{-12}$ с) характерных времен для электронов они рассматриваются в качестве фона, но учитывается влияние вторичных электронов и рекомбинации на концентрацию электронов и ее распределение, что необходимо для поддержания устойчивости плазмы. Распределения же всех ионов, нейтральных частиц и кластеров, которые являются предметом моделирования, полагаются неравновесными на больших пространствах области моделирования. Все температуры относятся к локальным термодинамическим величинам, которые зависят от координат r , θ и ϕ и усредняются по объему одной ячейки, равному $\approx \lambda_D^3$, где λ_D – радиус Дебая. Влияние электрического и магнитного полей на эти локальные средние характеристики и следовательно на температуру автоматически учитываются в этой модели [59]. Все сечения рассеяния являются локальными величинами, в которых учитывается анизотропия рассеяния по трем координатам.

Модель тройной рекомбинации [60, 61] используется для моделирования процессов рекомбинации в фоновом газе и для распыленных частиц. Скорость рекомбинации оказывается пренебрежимо малой в объеме газа и вблизи подложки из-за низкого давления и низкой концентрации частиц. Это делает рекомбинационные процессы менее важными в рассматриваемых условиях. Для всех процессов рассеяния используется простая анизотропная модель твердых сфер [62] с учетом зависимости от энергии. Эта модель оправдана из-за низкой концентрации плазмы и из-за того, что квантовые эффекты практически неважны даже на масштабах радиуса Дебая. В этой модели для констант скорости имеем

$$K_{scattering} = \langle v_{Ar} \pi r'^2 \rangle, \quad (7П)$$

$$K_{scattering} = \pi r'^2 \left[\frac{8T_{Ar}}{\pi\mu} \right]^{1/2},$$

где μ — приведенная масса, r' — классический радиус сталкивающихся частиц, а T_{Ar} — локальная температура фоновой аргонной плазмы.

Эти столкновения очень важны для определения распределения частиц титана в разных областях моделирования. Например, чем больше частота столкновений атомов мишени с атомами фоновой плазмы в потоке плазмы, тем больше вероятность отклонения ионов в этом потоке от прямого пути к мишени.

Для заданной конфигурации поля распределения по скоростям частиц фоновой плазмы зависит от нескольких факторов, включая скорость потока газа, вкладываемую мощность и давление газа [63–65].

Следующие факторы учитываются при вычислении потоков атомов титана за счет процессов эмиссии и напыления и в последующем расчете частот образования паров металла и кластеров.

1. $\epsilon_0(T)$, удельная энергия связи на один атом (в объеме) титановой мишени.
2. $A(T)$, удельная поверхностная энергия на один атом.
3. $N_{sat}(T)$, давление насыщенных паров при данной температуре.

Перечисленные факторы вводятся в модуль МСС с помощью “вероятности локального столкновения”. В этом подходе вычисляются сечения столкновения вместо традиционного метода на основе экстраполяции имеющихся экспериментальных данных при определении частоты столкновений. Из моделируемой системы случайным образом выбирается небольшое число частиц, после чего используется статистическое взвешивание [66], чтобы согласовать результаты

сравнения параметров, учитывающих комбинацию перечисленных выше факторов для индивидуальных частиц и кластеров, со случайным числом, позволяющим вычислять локальный параметр столкновения. Эти локальные параметры столкновений являются факторами, которые дают возможность раскладывать в модуле МСС различные частицы по разным столкновительным ячейкам, по аналогии с традиционным кодом МСС.

Давление паров и полные энергии связи играют ключевую роль при вычислении параметров столкновений [67]

1) $P_{deposition} \propto S = \frac{N}{N_{sat}(T)}$, где S называется фактором насыщения системы;

2) $P_{emission} \propto e^{-\epsilon/T}$, где $\epsilon = \epsilon_0 - An^{-1/3}$ фактически становится постоянной величиной для больших значений n или объемной системы и определяет полную энергию связи на один атом во всей системе, включая кластеры и весь объем.

Перенос частиц

Транспортные уравнения и их самосогласованное решение не являются частью метода частиц PIC, но обсуждение транспорта частиц на качественном уровне позволяет сделать важные выводы и объяснить некоторые результаты данной работы.

Из-за разной степени взаимодействия фоновой плазмы с парами и кластерами титана, которые движутся в направлении подложки, их поведение можно в основном разбить на три группы.

1. Частицы, движущиеся по баллистической траектории. Они летят к аноду по прямой, и их энергия практически не меняется из-за столкновений.
2. Частицы в промежуточном состоянии. Такие частицы наиболее уместно рассматривать в данном исследовании, поскольку ими определяется качество титановых пленок на подложке и изменение их характеристик. Эти частицы участвуют в столкновениях, но при этом сохраняется часть их начального импульса в направлении подложки.
3. Термализованные частицы, двигающиеся диффузно. Они теряют большую часть своего начального импульса и рассеиваются случайным образом, совершая беспорядочные блуждания. Их рассмотрение важно для анализа процессов в объеме моделируемой области.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность Birla Institute of Technology, Mesra, Ranchi, India за предоставление

экспериментальной установки. Авторы выражают благодарность SERB (Ref: EMR/2014/000722) New Delhi, Government of India за финансовую поддержку. Авторы хотели бы посвятить эту работу Dr. Indrani Banerjee, которая служила постоянным источником вдохновения и была научным руководителем для многих студентов, включая авторов. Ее дружелюбной улыбки и глубокого понимания физики будет не хватать ее студентам и друзьям.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Hull W. J. Am. Inst. Elect. Eng. 1921. V. 40. P. 715.
- Greene J.E. Vac J. Sci. Technol. A. 2017. V. 35. P. 05C204.
- Penning F.M. Physica. 1936. V. 3. P. 873.
- Penning F.M., Moubis J.H.A. Proc. K. Ned. Akad. Wet. 1940. V. 43. P. 41.
- Musil J. Surf. Coat. Tech. 1998. V. 100. P. 280.
- Choi S.K., Lee J.I. J. Vac. Sci. Technol. A. 2001. V. 19. P. 2043.
- Kwon U.H., Choi S.H., Park Y.H., Lee W.J. Thin Solid Films. 2005. V. 475. P. 2043.
- Ivanov I., Kazansky P., Hultman L., Petrov I., Sundgren J.E. J. Vac. Sci. Technol. A. 1994. V. 12. P. 314.
- Petrov I., Orlinov V., Ivanov I., Kourtev J. Contrib. Plasm. Phys. 1988. V. 28. P. 157.
- Ayesh A.I., Qamhie N., Ghamlouche H., Thaker S., El-Shaer M. J. Appl. Phys. 2010. V. 107. P. 034317.
- Raggl S., Postler J., Winkler J., Strauss G., Feist C., Plankensteiner A., Eidenberger-Schober M., Scheier P. J. Vac. Sci. Technol. A. 2017. V. 35. P. 061308.
- Poluektov N.P., Tsar'gorodsev Y.P., Usatov I.I., Evstigneev A.G., Kamyschov I.A. J. Mod. Phys. 2012. V. 31. P. 494.
- Borah S.M., Pal A.R., Bailing H., Chutia J. Chinese Phys. B. 2011. V. 20. P. 014701.
- Holík M., Bilyk O., Marek A., Kudrna P., Behnke J.F., Tichý M. Contrib. Plasm. Phys. 2004. V. 44. P. 613.
- Tang D.L., Fu R.K., Tian X.B., Peng P., Chu P.K. Nucl. Instrum. Meth. B. 2003. V. 206. P. 808.
- Lagarde T., Arnal Y., Lacoste A., Pelletier J. Plasma Sources. Sci. Technol. 2001. V. 10. P. 181.
- Wu S.Z. J. Appl. Phys. 2005. V. 98. P. 083301.
- Nisha M., Saji K.J., Ajimsha R.S., Joshy N.V., Jayaraj M.K. J. Appl. Phys. 2006. V. 99. P. 033304.
- Aanesland A., Bredin J., Chabert P., Godyak V. Appl. Phys. Lett. 2012. V. 100. P. 044102.
- Abu-Hashem A., Hassouba M.A., Masoud M.M. J. Mod. Phys. 2012. V. 3. P. 48.
- Nakamura T., Okimura K. Vacuum. 2004. V. 74. P. 391.
- Posadowski W.M. Thin Solid Films. 2001. V. 392. P. 201.
- Seo D.C., Chung T.H., Yoon H.J., Kim G.H. J. Appl. Phys. 2001. V. 89. P. 4218.
- Borah S.M. J. Mater. 2013. V. 9. P. 2013.
- Kakati H., Pal A.R., Bailing H., Chutia J. J. Phys. D: Appl. Phys. 2007. V. 40. P. 6865.
- Seo S.H., In J.H., Chang H.Y. J. Appl. Phys. 2004. V. 96. P. 57.
- Bretagne J., Laporte C.B., Gousset G., Leroy O., Minea T.M., Pagnon D., de Pouques L., Touzeau M. Plasma Sources Sci. Technol. 2003. V. 12. P. 33.
- Sheridan T.E., Goeckner M.J., Goree J. J. Vac. Sci. Technol. A. 1991. V. 9. P. 688.
- Sherdian T.E., Goree J. J. Vac. Sci. Technol. A. 1989. V. 7. P. 1014.
- Sherdian T.E., Goeckner M.J., Goree J. J. Vac. Sci. Technol. A. 1998. V. 16. P. 02173.
- Goeckner M.J., Goree J.A., Sheridan T.E. IEEE T. Plasma. Sci. 1991. V. 19. P. 301.
- Negrea C., Manea V., Covlea V., Jipa A. Plasma Phys. Reports. 2011 V. 37. P. 5.
- Ivanov I., Statev S., Orlinov V., Shkevov R. Vacuum. 1992. V. 43. P. 837.
- Gudmundsson J.T., Alami J., Helmersson U. Appl. Phys. Lett. 2001. V. 78. P. 3427.
- Singh S.B., Chand N., Patil D.S. Vacuum. 2009. V. 83. P. 372.
- Merlino R.L. Am. J. Phys. 2007. V. 12. P. 1078.
- Amemiya H. J. Phys. D: Appl. Phys. 1990. V. 23. P. 999.
- Barjatya A. Doctor of Philosophy, thesis (2007), <http://digitalcommons.usu.edu/etd/274>.
- Godyak V.A., Piejak R.B., Alexandrovich B.M. J. Appl. Phys. 1993. V. 73. P. 3657.
- Gopikishan S., Kumar P., Iyengar A.S., Banerjee I., Mahapatra S.K. Results Phys. 2019. V. 12. P. 1814.
- Sabavath G.K. Plasma Phys. Reports. 2020. V. 46. P. 6.
- Birdsall C.K. IEEE Transactions Plasma. Sci. 1991. V. 19. P. 65.
- Serikov V.V., Kawamoto S., Nanbu K. IEEE Transactions Plasma. Sci. V. 27. P. 1389.
- Ekpe S.D., Jimenez F.J., Field D.J., Davis M.J., Dew S.K. J. Vac. Sci. Technol. A. 1999. V. 27. P. 1275 (2009).
- Mišina M., Setsuhara Y., Miyake S. J. Vac. Sci. Technol. A. 1997. V. 15. P. 1922.
- Borah S.M., Bailing H., Pal A.R., Chutia J. J. Phys. D: Appl. Phys. 2008. V. 41. P. 195205.
- Papa F., Gerdes H., Bandorf R., Ehasarian A.P., Kolev I., Braeuer G., Tietema R., Krug T. Thin Solid Films. 2011. V. 520. P. 1559.
- Dickson M., Hopwood J. J. Vac. Sci. Technol. A. 1997. V. 15. P. 2307.
- Hellgren N., Macák K., Broitman E., Johansson M.P., Hultman L., Sundgren J.E. J. Appl. Phys. 2000. V. 88. P. 524.
- Gudmundsson J.T. Plasma Sources Sci. Technol. 2020. V. 29. P. 113001.
- Shon C.H., Lee J.K. Applied Surface Science. 2002. V. 269. P. 192258.
- Longo S. Plasma Sources Science and Technology. 2000. V. 9.
- Langdon A.B. J. Comput. Phys. 1970. V. 6. P. 247.
- Langdon A.B., Birdsall C.K. Phys. Fluids. 1970. V. 13. P. 2115.

55. Computer modeling of low-temperature plasmas, Gas Discharges – Fundamentals & Applications / Ed. J. de Amorim Filho, F. Iza, S.H. Lee, and J.K. Lee (2007), p. 1–30.
56. *Mandilas C., Daskalos E., Karagiannakis G., Konstantopoulos A.G.* Materials Science and Engineering B. 2013. V. 178. P. 22.
57. *Ahadi A., Sun Q.* Acta Materialia. 2014. V. 76. P. 186.
58. *Serov A.O., Mankelevich Yu.A., Pal A.F., Ryabinkin A.N.* J. Phys.: Confer. Series. 2015. V. 653. P. 012127.
59. *Rudolf T.H.* NASA casi/ntrs archives 19910023412.
60. *Kabla M., Seiner H., Musilova M., Shilo D.* Acta Materialia. 2014. V. 70. P. 79.
61. *Sigurjonsson P., Gudmundsson J.T.* J. Phys.: Confer. Series. 2009. V. 100. P. 234.
62. *Geiser J., Blankenburg S.* Commun. Comput. Phys. 2012. V. 11. P. 1618.
63. *Khomkin A.L., Shumikhin A.S.* European Phys. J. D. 2009. V. 54. P. 493.
64. *Smirnov B.M.* Fundamentals of Ionized Gases (Wiley VCH, 2001).
65. *Hensel F.* J. Phys.: Condens. 1990. V. 2. P. SA33.
66. *Upton T.H.* Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 2168.
67. *Franz G.* Low Pressure Plasmas and Microstructuring Technology (Springer, 2009).

Перевод с английского Н.Л. Александрова