

Общероссийский математический портал

Е. П. Жидков, Л. А. Севастьянов, Макропараметры эффективно-го распределения и функции источника в математической модели экранируемого напыления,  
*Матем. моделирование*, 1998, том 10, номер 9, 35–40

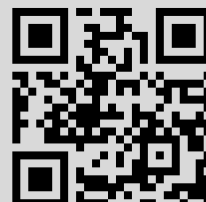
<https://www.mathnet.ru/mm1321>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением  
<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.9.174

28 апреля 2025 г., 05:07:07



*МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ*

## **МАКРОПАРАМЕТРЫ ЭФФЕКТИВНОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ И ФУНКЦИИ ИСТОЧНИКА В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭКРАНИРУЕМОГО НАПЫЛЕНИЯ**

© *Е.П. Жидков, Л.А. Севастьянов*

Российский университет дружбы народов,  
Россия, 117198, ГСП, г.Москва, ул.Миклухо-Маклая, д.6  
Факс: (095) 954-12-71 (для Севастьянова)  
E-mail: lsevastianov@mх.pfu.edu.ru

Работа выполнена при поддержке Российского фонда  
фундаментальных исследований (код проекта 94-01-01354 а)

Рассмотрено существование единых (для совокупности близких по параметрам экранирующих масок и режимов напыления) эффективного распределения напыляемых частиц и функции источника, а также устойчивость этих величин к малым изменениям параметров экранируемого напыления.

## **MACROPARAMETERS OF AN EFFECTIVE DISTRIBUTION AND OF A SOURCE FUNCTION IN THE MATHEMATICAL MODEL OF SHADOWED SPUTTERING**

*L.A. Sevastianov, E.P. Zhidkov*

The investigation is presented of an existence of the unique shadowing shields for a set of close by their characteristics and sputtering conditions effective distribution of sputtered particles and source function, so as their stability for small variations of shadowed sputtering parameters.

### **Введение**

Эффективное распределение  $\rho_{eff}$  потока частиц в напылительной установке, определенное в [1], зависит от всей эволюции напыляемых частиц, в том числе и от геометрической формы экранирующей маски. При этом малые изменения параметров маски не могут вызывать существенных изменений эффективного распределения в силу физических предположений и

понятий, заложенных в концепцию эффективного распределения [1]. При решении первой (вспомогательной) обратной задачи в модели экранирующего напыления [2] в силу приближенного задания правой части – профиля напыленного слоя  $h(\mathbf{r})$  – неизбежна и приближенность (с погрешностью  $\epsilon$ ) получаемого эффективного распределения. В рамках погрешности интересующего нас эффективного распределения существует множество экранирующих масок, геометрические параметры которых отличаются на величины, согласованные с упомянутой погрешностью  $\rho_{eff}$ .

### 1. Восстановление эффективного распределения по результатам напыления

Выберем  $N$  конфигураций экранирующих масок, которым отвечает одно (в рамках выбранной погрешности  $\epsilon$ ) эффективное распределение  $\rho_{eff}$  соответствующее заданному режиму работы напылительной установки [1]. В этом режиме проведем  $N$  напылительных экспериментов с указанными масками  $M_1, \dots, M_N$ , в результате которых получим  $N$  профилей напыленного слоя  $h_1(\mathbf{r}), \dots, h_N(\mathbf{r})$ . В каждом из напыленных  $h_n(\mathbf{r})$  слоев произведем измерения толщины в  $K_n$  точках  $\mathbf{r}_{j(n)}$  ( $1 \leq j(n) \leq K_n$ ):  $h_{nj(n)} = h_n(\mathbf{r}_{j(n)})$ . Таким образом, для эффективного распределения, удовлетворяющего соотношению [2]

$$h(\mathbf{r}) = \frac{d \cdot T}{H^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \int_{-\infty}^0 du \cdot u^2 \rho_{eff}(\mathbf{r}_0, \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}}{H} u, u) \Theta_{M}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}), \quad (1)$$

выполняются (с погрешностью  $\delta_n$ )  $K = K_1 + \dots + K_N$  уравнений

$$h_{nj(n)} = \frac{d \cdot T_n}{H^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \int_{-\infty}^0 du \cdot u^2 \rho_{eff}(\mathbf{r}_0, \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_{j(n)}}{H} u, u) \Theta_{M_n}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{j(n)}), \quad (2)$$

$$j(n) = 1, \dots, K_n; \quad n = 1, \dots, N.$$

Для установления эффективного распределения поступаем следующим образом. Выбираем некоторую полную (ортонормированную) систему функций  $\rho_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}, u)$ , образующую базис в пространстве  $L_2(\mathfrak{R}^4 \times \mathfrak{R}^+)$ . Представим искомое эффективное  $\rho_{eff}$  распределение в виде линейной комбинации базисных функций

$$\rho_{eff}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, u) = \frac{H^2}{d} \sum_{j=1}^{\infty} \beta_j \rho_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}, u). \quad (3)$$

Подставляя выражение (3) в соотношение (2), получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$\frac{h_{nj(n)}}{T_n} = \sum_{k=1}^{\infty} A_{nj(n)}^k \beta_k; \quad j(n) = 1, \dots, K_n; \quad n = 1, \dots, N. \quad (4)$$

В системе (4) матричные элементы  $A_{ni(n)}^j$  определяются следующим образом:

$$A_{ni(n)}^j = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r} \int_{-\infty}^0 du \cdot u^2 \rho_j(\mathbf{r}, \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i(n)}}{H} u, u) \Theta_{M_n}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_{i(n)}). \quad (5)$$

Таким образом, для вектора бесконечной длины  $(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k, \dots)^t$  имеем  $K$  линейных алгебраических уравнений (4), заданных с погрешностью  $\delta_n$  в правых частях и  $\delta_A$  в матричных эле-

ментах. Задача по установлению эффективного распределения включает в себя проведение  $N$  напылительных экспериментов и  $K$  измерительных экспериментов, выбор системы функций  $\rho_j$  и (приближенное) вычисление  $K$  матричных элементов (5), а также последующее решение конечного числа приближенных уравнений относительно бесконечного числа параметров  $\beta_j$ . Следовательно, коэффициенты можно рассматривать как некоторые экспериментально определяемые параметры эффективного распределения.

**2. Физический смысл макропараметров эффективного распределения (функции источника)**

Если подставить разложение (3) в соотношение (1), то получится выражение

$$h(\mathbf{r}) = T \sum_{j=1}^{\infty} \beta_j \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \int_{-\infty}^0 du \cdot u^2 \rho_j(\mathbf{r}_0, \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}}{H} u, u) \Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}), \tag{6}$$

в котором, в отличие от выражения (1), не фигурирует элементарный объем  $d$ . Следовательно, величина  $d$  уже учтена неявным образом в параметрах  $\beta_j$ , т.е. эти параметры эффективного распределения имеют макроскопическую природу. Этот факт не является удивительным, так как параметры  $\beta_j$  определяются по экспериментальным значениям высот  $h_{ni(n)}$  напыленного слоя, которые сами являются макроскопическими величинами.

Макроскопическим параметрам  $\beta_j$  можно придать определенный физический смысл, связав их с весом парциальных распределений  $\rho_j(\mathbf{r}, \mathbf{v}, u)$  в эффективном распределении  $\rho_{eff}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, u)$ . От параметров  $\beta_j$  можно перейти к другим (тоже макроскопическим) параметрам, также однозначно определяющим конфигурацию напыленного слоя и имеющим более четкий физический смысл.

Для иллюстрации рассмотрим частный случай стационарного эффективного распределения с двумя типами симметрии: однородностью по координатам ( $\rho_{eff}$  не зависит от  $\mathbf{r}$ ) и цилиндрической симметрией в пространстве скоростей ( $\rho_{eff}$  не зависит от направления вектора  $\mathbf{v}$ ). Представляя как в [2]  $\rho_{eff}$  в виде функции от величин  $V = \sqrt{v^2 + u^2}$  и  $u/v$  и учитывая неравенство  $|u/v| \leq 1$ , можно эффективное распределение разложить в ряд

$$\rho_{eff}(V, \frac{u}{V}) = \frac{H^2}{d} \sum_{m,n=0}^{\infty} \beta_{mn} \Psi_m(V) (u/V)^n. \tag{7}$$

Здесь  $\{\Psi_m\}$  – искомая система ортонормированных функций в  $L_2(0, \infty)$ .

Подставим разложение (7) в соотношение (1), произведя при этом замену переменных

$$\zeta = -\frac{u}{H} \sqrt{(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})^2 + H^2}, \tag{8}$$

в результате чего получим соотношение

$$h(\mathbf{r}) = T \sum_{m,n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{mn} \int_0^{\infty} d\zeta \cdot \zeta^2 \Psi_m(\zeta) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \frac{H^{n+3} \Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})}{\{(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})^2 + H^2\}^{(n+3)/2}}. \tag{9}$$

Перейдем теперь от параметров  $\beta_{mn}$  к макроскопическим параметрам, имеющим явный физический смысл. Для этого рассмотрим процесс напыления через однолистовую маску с круговым отверстием радиуса  $R$ , тогда  $\Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = \mathcal{D}(R^2 - r_0^2)$ . Увеличивая неограниченно радиус  $R$  отверстия входа маски (т.е. убирая маску), мы придем в формуле (9) к интегрированию по всей плоскости  $\Pi_1$ . При этом соотношение (9) приобретает вид

$$h_0(\mathbf{r}) = T \sum_{m,n=0}^{\infty} (-1)^n \beta_{mn} \int_0^{\infty} d\zeta \cdot \zeta^2 \psi_m(\zeta) \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\mathbf{r}_0 H^{n+3}}{\{(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})^2 + H^2\}^{(n+3)/2}}, \quad (10)$$

что соответствует конфигурации слоя в отсутствии маски.

Для вычисления выражения (10) произведем замену переменных  $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r} + \bar{\rho}$ , затем для новой переменной  $\bar{\rho}$  введем полярную систему координат  $\bar{\rho} = (\rho, \varphi)$ . При этом последний интеграл в выражении (10) принимает вид

$$H^{n+3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} \frac{d\rho \cdot \rho}{(\rho^2 + H^2)^{(n+3)/2}},$$

допускающий интегрирование по  $d\varphi$  и  $d\rho$  в явном виде, так что

$$h_0(\mathbf{r}) = Ta = T \sum_{n=0}^{\infty} a_n = \text{const}, \quad (11)$$

где

$$a_n = h_0(\mathbf{r}) = (-1)^n \frac{2\pi H}{(n+1)} \sum_{m=0}^{\infty} \beta_{mn} \int_0^{\infty} d\zeta \cdot \zeta^2 \psi_m(\zeta). \quad (12)$$

Физический смысл и размерность макропараметров очевидны из (11). Действительно

$$a = h_0/T \quad (13)$$

есть высота слоя вещества, напыленного на установке с эффективным распределением (7) за единицу времени в любой точке подложки в отсутствие экранирующей маски. Следовательно,  $a$  – это мощность распределения, выражающаяся в единицах высоты напыленного слоя в единицу времени.

При этом макропараметры  $a_n$  – это парциальные мощности эффективного распределения (7), соответствующие парциальным эффективным распределениям, пропорциональным 1,  $u/V$ ,  $(u/V)^2$  и т.д. А поскольку согласно [2]  $(u/V)^n = (-1)^n \cos^n \psi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})$ , где  $\psi(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})$  – угол между векторами  $\mathbf{r}_0$  и  $\mathbf{r}$ , то макропараметры  $a_n$  можно рассматривать в качестве парциальных мощностей: диффузионного распределения –  $a_0$ ; косинусного распределения –  $a_1$ ;  $\cos^2$  – распределения –  $a_2$  и т. д.

Наконец, в (9) сгруппируем члены, суммируемые по индексу, и воспользуемся формулой (12); в результате получим соотношение

$$h(\mathbf{r}) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{2\pi} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \frac{H^{n+3} \Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})}{\{(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r})^2 + H^2\}^{(n+3)/2}}, \quad (14)$$

в котором величины  $a_n$  ( $n=0,1,\dots$ ), связанные с макропараметрами  $\beta_{mn}$ , можно рассматривать как новые макропараметры эффективного распределения, имеющие ясный физический смысл.

Перенесем теперь макропараметрическое рассмотрение с эффективного распределения на функцию источника. В [3] показано, что интегральное уравнение математической модели экранируемого напыления

$$Y(\xi) = \int_{Q_2} d\eta A(\xi, \eta) X(\eta, \xi), \quad \xi \in Q_1, \quad (15)$$

описываемое функциями от двумерных переменных  $\xi \in Q_1, \eta \in Q_2$ , в случае однородного по координатам эффективного распределения и цилиндрической симметрии задачи редуцируется к одномерному интегральному уравнению Фредгольма первого рода (каноническому уравнению)

$$Y(\sigma) = \int_0^1 d\sigma A(\sigma, \rho) X(\rho), \quad \varepsilon \in [0, 1], \quad (16)$$

описываемому функциями от канонических переменных  $\sigma, \rho \in [0, 1]$ .

При этом функция (прозрачности) маски имеет вид

$$A(\tau, \sigma) = 2\sigma \left\{ \pi - \arccos \left[ \min_z \frac{\lambda^2(z) - \tau^2 - (\nu(z)\rho)^2}{2\tau\nu(z)\rho} \right] \right\}, \quad (17)$$

где

$$\lambda(z) = \frac{R(z)}{R(0)}, \quad \nu(z) = \frac{\mu z}{R(0)}, \quad \mu = \inf_{z \neq 0} \frac{R(0) + R(z)}{z},$$

$R(z)$  – расстояние от оси  $Oz$  до поверхности (инвариантной относительно поворотов вокруг оси  $Oz$ ) отверстия маски на высоте  $z \in [0, H]$ ,  $H$  – высота экранирующей маски.

Уравнение (1) в этом случае имеет вид

$$h(\mathbf{r}) = \frac{T \cdot d}{H^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathbf{r}_0 \int_{-\infty}^0 du \cdot u^2 \rho_{eff}(\mathbf{r}_0, \frac{\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}}{H} u, u) \Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}), \quad (18)$$

$$\Theta_M(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}) = \prod_{z=0}^H \mathcal{G} \left( R(z)^2 - \left| \mathbf{r} + \frac{z}{H} (\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) \right|^2 \right). \quad (19)$$

В силу соотношения (14) уравнение (18) переписывается следующим образом:

$$h(\mathbf{r}) = T \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n+1}{2\pi} a_n \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\bar{\rho} \Theta_M(\bar{\rho}, \bar{\tau})}{(1 + \rho^2 / H^2)^{(n+3)/2}}. \quad (20)$$

Если использовать конкретный вид (20) исходного уравнения (1) при переходе к (15), то каноническое уравнение (16) приобретет вид

$$Y(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n Y_n(\tau), \quad (21)$$

$$Y_n(\tau) = \frac{n+1}{2\pi} \int_0^1 \frac{A(\tau, \sigma) d\sigma}{[1 + (\mu\sigma)^2]^{(n+3)/2}}. \quad (22)$$

Функция источника  $X(\sigma)$  при этом представляется в виде ряда Фурье:

$$X(\sigma) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \frac{n+1}{2\pi} \frac{1}{[1 + (\mu\sigma)^2]^{(n+3)/2}}. \quad (23)$$

Поиск функции источника в этом случае означает поиск коэффициентов Фурье, а физический смысл макропараметров тот же, что и в (14).

### Заключение

В условиях неточно заданной исходной информации о величинах, участвующих в формировании математической модели эффектов экранирования вакуумного напыления тонких пленок вещества, существенными являются вопросы существования и устойчивости к погрешностям входных данных приближенных (нормальных) решений некорректных задач – основной цели теоретического исследования процесса напыления.

Обсуждаемое решение (функция источника  $X$ , эффективное распределение  $\rho_{eff}$ ) может рассматриваться и как элемент функционального пространства, и как разложение в обобщенный ряд Фурье, представленное своими коэффициентами Фурье:  $X = \sum a_n X_n$ ,  $\rho_{eff} = \sum \beta_j \rho_j$ .

Коэффициенты Фурье являются параметрами, характеризующими процесс экранируемого напыления. Как показал анализ, они являются макроскопическими характеристиками параметров масок и напыленных слоев.

Сходимость конечных отрезков ряда Фурье при регуляризованном вычислении (сглаженных) коэффициентов Фурье в работе не обсуждается в силу своей общеизвестности.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Л.А. Севастьянов. Концепция эффективного распределения в математической модели экранируемого напыления. – Вестник РУДН, сер. Физика, 1998, №1 (в печати).
2. Л.А. Севастьянов. Математическая модель экранируемого напыления. – Математическое моделирование, 1998, т.10, №4, с.13-22.
3. В.И. Аникин, В.В. Курьшин, Л.А. Севастьянов. Модель эффектов корпускулярного экранирования в процессе вакуумного напыления. – В сб. “Дискуссионные вопросы квантовой физики”. – М.: Изд. РУДН, 1993, с.165-171.

Поступила в редакцию 02.04.98.