МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
том 10 номер 9 год 1998

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@mx.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 ρ_{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 вызвать 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 ε) получаемого эффективного распределения. В рамках погрешности интересующего нас эффективного распределения существует множество экранирующих масок, геометрические параметры которых отличаются на величины, согласованные с упомянутой погрешностью ρ_{eff}.

1. Восстановление эффективного распределения по результатам напыления

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

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

выполняются (с погрешностью δ_n) $K=K_1+...+K_N$ уравнений

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

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

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

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

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

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

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

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

Таким образом, для вектора бесконечной длины $(\beta_1, \beta_2, ..., \beta_k, ...)^t$ имеем K линейных алгебраических уравнений (4), заданных с погрешностью δ_n в правых частях и δ_A в матричных элементах. Задача по установлению эффективного распределения включает в себя проведение N напылительных экспериментов и K измерительных экспериментов, выбор системы функций ρ_j и (приближенное) вычисление K матричных элементов (5), а также последующее решение конечного числа приближенных уравнений относительно бесконечного числа параметров β_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 β_j, т.е. эти параметры эффективного распределения имеют макроскопическую природу. Этот факт не является удивительным, так как параметры β_j определяются по экспериментальным значениям высот $h_{ni(n)}$ напыленного слоя, которые сами являются макроскопическими величинами.

Макроскопическим параметрам β_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 β_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 (ρ_{eff} не зависит от $\mathbf{r}$) и цилиндрической симметрией в пространстве скоростей (ρ_{eff} не зависит от направления вектора $\mathbf{v}$). Представляя как в [2] ρ_{eff} в виде функции от величин $V=\sqrt{\mathbf{v}^2+u^2}$ и u/v и учитывая неравенство $|u/v|\le 1$, 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 β_{mn} к макроскопическим параметрам, имеющим явный физический смысл. Для этого рассмотрим процесс напыления через однолистовую маску с круговым отверстием радиуса R, тогда $\Theta_M(\mathbf{r}_0,\mathbf{r}) = \vartheta(R^2-r_0^2)$. Увеличивая неограниченно радиус R отверстия входа маски (т.е. убирая маску), мы придем в формуле (9) к интегрированию по всей плоскости Π_1. При этом соотношение (9) приобретает вид

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

что соответствует конфигурации слоя в отсутствии маски.

Для вычисления выражения (10) произведем замену переменных $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r} + \vec{\rho}$, затем для новой переменной $\vec{\rho}$ введем полярную систему координат $\vec{\rho} = (\rho, \varphi)$. 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

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

где

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

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

$$a = h_0/T \tag{13}$$

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

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

в котором величины a_n (n=0,1,...), связанные с макропараметрами β_{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

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

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)

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

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

При этом функция (прозрачности) маски имеет вид

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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 ρ_{eff}) может рассматриваться и как элемент функционального пространства, и как разложение в обобщенный ряд Фурье, представленное своими коэффициентами Фурье: $X=\Sigma a_n X_n$, $\rho_{eff}=\Sigma\beta_j\rho_j$.

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. Курышкин, 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.