# Методическая часть

Для проведения моделирования процесса совместного осаждения композита кремний-молибден-азот была построена программа ЭВМ и оформлена в виде модуля на языке python 3.10.

Разработанный модуль работает с двумя классами:

1. Targer-setup – Класс отвечающий за моделирование процессов проходящих а мишени и хранящий параметры мишени.
2. Model – Класс отвечающий за моделирование процессов происходящих в всей камере и хранение параметров процесса

Для того чтобы провести моделирование необходимо провести следующие операции:

## Создание объекта мишени

Для того, чтобы создать объекты соответствующие распыляем мишеням необходимо указать следующе параметры. Параметры могут быть как константами, так и набором значений, соответствующих каждому рассматриваемому давлению активного газа.

k – атомов мишени в соединение газа (в N­2 - 2).

n – атомов окислителя в соединение на один атом мишени (в Si3N4 - 1.(3), в MoN – 1).

A – Площадь мишени в м^2.

A\_chamber – Подверженная воздействию потока частиц площадь поверхности камеры в м^2.

S – Коэффициент распыления материала мишени.

S\_compoud – Коэффициент распыления прореагировавшего материала.

alpha0 – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности мишени.

alpha0\_c – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности камеры и образца.

alpha0\_compound – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на прореагировавшей поверхности мишени.

alpha0\_compound\_с – Коэффициент задерживания молекулы окислителя на прореагировавшей поверхности камеры и образца.

alpha0\_O– Коэффициент задерживания молекулы остаточного кислорода на поверхности мишени.

alpha0\_O2\_compound – Коэффициент задерживания молекулы остаточного кислорода на поверхности камеры и образца.

J – Плотность потока ионов аргона распыляющих мешень (молекул/(м2\*с)).

Ro – Плотность вещества мишени в кг/м^3.

M – Молярная масса вещества мишени в кг/моль.

Для создания объекта мишени служат команды:

*import* ***target\_setup*** *as ts #Импорт класса мишени*

*target = ts.****target****(k, n, t, A, A\_chamber, S, S\_compound, alpha0, alpha0\_compound, alpha0\_c, alpha0\_compound\_c, alpha0\_O2, alpha0\_O2\_compound, J, Ro, M) #создание объекта мишени*

## Создание объекта модели

Для того, чтобы создать объект хранящий параметры проведения процесса необходимо указать следующе параметры. Параметры могут быть как константами, так и набором значений, соответствующих каждому рассматриваемому давлению активного газа.

*target\_1 – Первая мишень.*

*target\_2 – Вторая мишень.*

*T – Абсолютная температура реакционного газа (K).*

*moleclar\_mass – масса реактивного газа (кг).*

*S –Скорость откачки подаваемого газа (м3/c).*

*alpha0\_O2 – Коэффициент задерживания молекулы кислорода.*

*K1 – Коэффициент пересчёта. По умолчанию 3.7e-21.*

*Для создания объекта модели необходимо выполнить следующие команды:*

*import* ***Model*** *#Импорт класса модели*

***Model*** *= Model.****model****(target\_1, target\_2, T, moleclar\_mass, S, K1) #создание объекта модели*

## Создание массива давлений

Моделирование поводится как вычисление параметров системы для набора давлений реакционного газа, подаваемого в систему.

Набор давлений задаётся командой:

*import* ***numpy*** *as* ***np*** *#импорт модуля numpy*

*import* ***panda*** *as* ***pd*** *#импорт модуля pandas*

*df = pd.****DataFrame****([ ]) # создание пустой таблицы данных*

*df["P\_O2"] = np.****arange****(start, stop, step) #создание массива давлений в столбце P\_02 созданной таблицы*.

df["P\_O2\_torr"] = df.P\_O2 \* 0.0075 \* 1000

где:

start – Минимальное рассматриваемое давление.

stop – Минимальное рассматриваемое давление*.*

Step – шаг моделирования

## Расчёт характеристической функции процесса

Для расчёта характеристической функции процесса требуется рассчитать производную потока реактивного газа по давлению реактивного газа по формулам (1 - 6)

где, , - коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности мишени, – молекулярный поток реактивного газа (молекул м/с-1), , - ток на мишени (А), e –заряд электрона, – заряд электона, , - коэффициенты распыления нитридов, , - коэффициенты распыления материла, , – площади кремниевой и молибденовой мишеней соответственно, , – площади кремниевой и молибденовой мишеней соответственно. Эти же обозначения справедливы в нижележащих формулах.

*где,* k1 – коэффициент преобразования = 3,7×10-21 Па • м3 • (молекул N2)-1, *-* постоянная Больцмана (1,38×10-23 Дж×K­-1), – абсолютная температура реагирующего газа (K), молекулярная масса реагирующего газа.

или просто

где, S – скорость откачки, – характеристическая функция, – производная потока азота по парциальному давлению азота.

Это преобразование можно выполнить следующими командами:

*df["dq/dP"] = Si\_Mo.dq\_dp(df.P\_O2)*

*df["S\_l"] = (Si\_Mo.S - df["dq/dP"])\*1000*

Для вывода полученных значений характеристической функции на график необходимо воспользоваться функцией:

*df[["P\_O2", "S\_l"]].plot(x = "P\_O2", legend = None, ylabel = r"Characteristic function $S\_L$ $(L\*s^{-1})$", xlabel = "Oxygen partial pressure (Pa)")*

Пример представлен ниже (Рисунок 1.1)

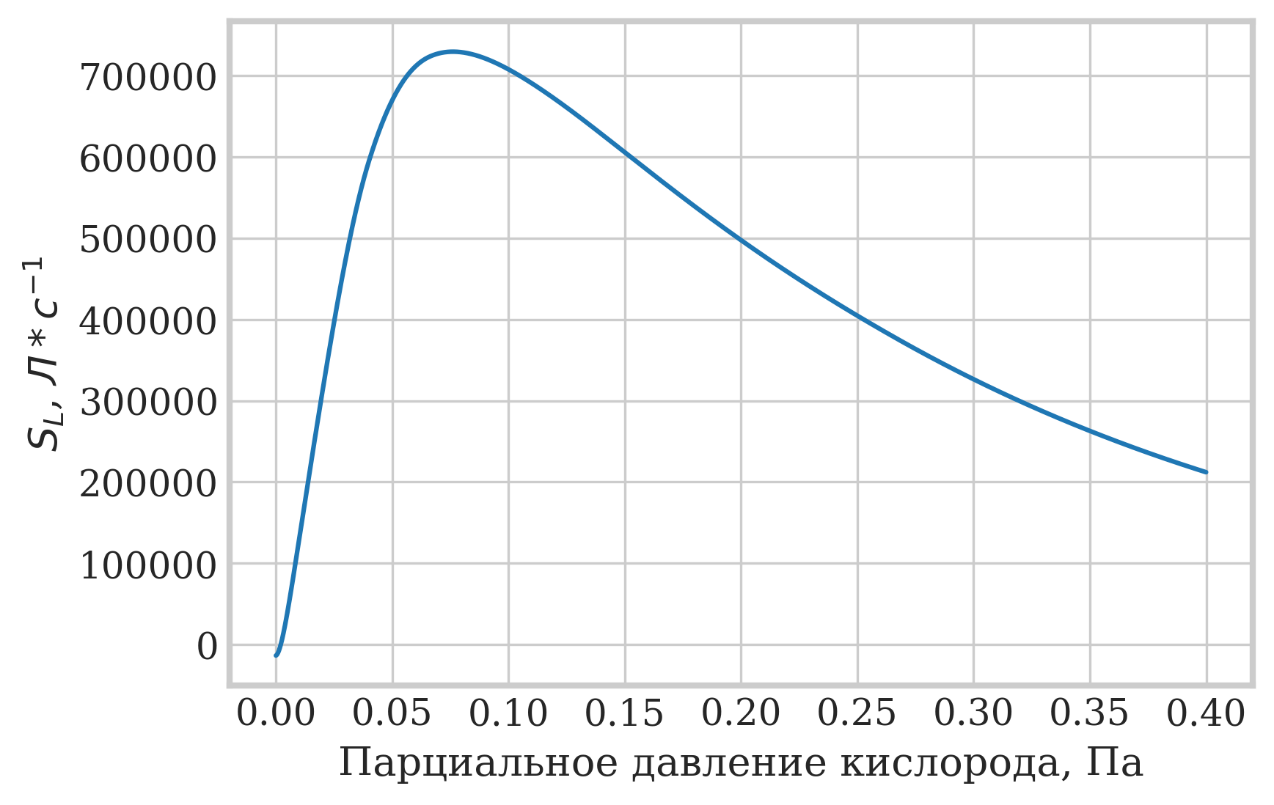


Рисунок 1.1 Пример характеристической функции для мишени Si – Mo

## Расчёт парциального давления азота в зависимости от введения азота при распылении распыление мишени

Для расчёта парциального давления азота в зависимости от введения азота при распылении распыление мишени необходимо воспользоваться формулой

(7)

где k1 – коэффициент преобразования = 3,7×10-21 Па • м3 • (молекул N2)-1,

*, -* коэффициент задерживания молекулы окислителя на непрореагировавшей поверхности мишени,  – молекулярный поток реактивного газа (молекул м/с-1), , - долях поверхностей мишеней и камеры ещё не покрытые соединением, , – площади кремниевой и молибденовой мишеней соответственно – парциальное давление азота, – скорость откачки из камеры.

Расчёт этого параметра можно выполнить следующими командами:

df["q\_O2"] = Si\_Mo.q\_of\_F\_t\_c(df.P\_O2)

df["flow\_rate"] = df.q\_O2 \* 1E3

Для вывода полученных значений характеристической функции на график необходимо воспользоваться функцией:

*df.plot(x = "flow\_rate", y = "P\_O2", legend = None, ylabel = r"$P\_{O\_2}$ (Pa)", xlabel = "Oxygen flow rate (sccm)")*

Пример полученных значений потока кислорода от давления показан ниже (Рисунок 1.2)

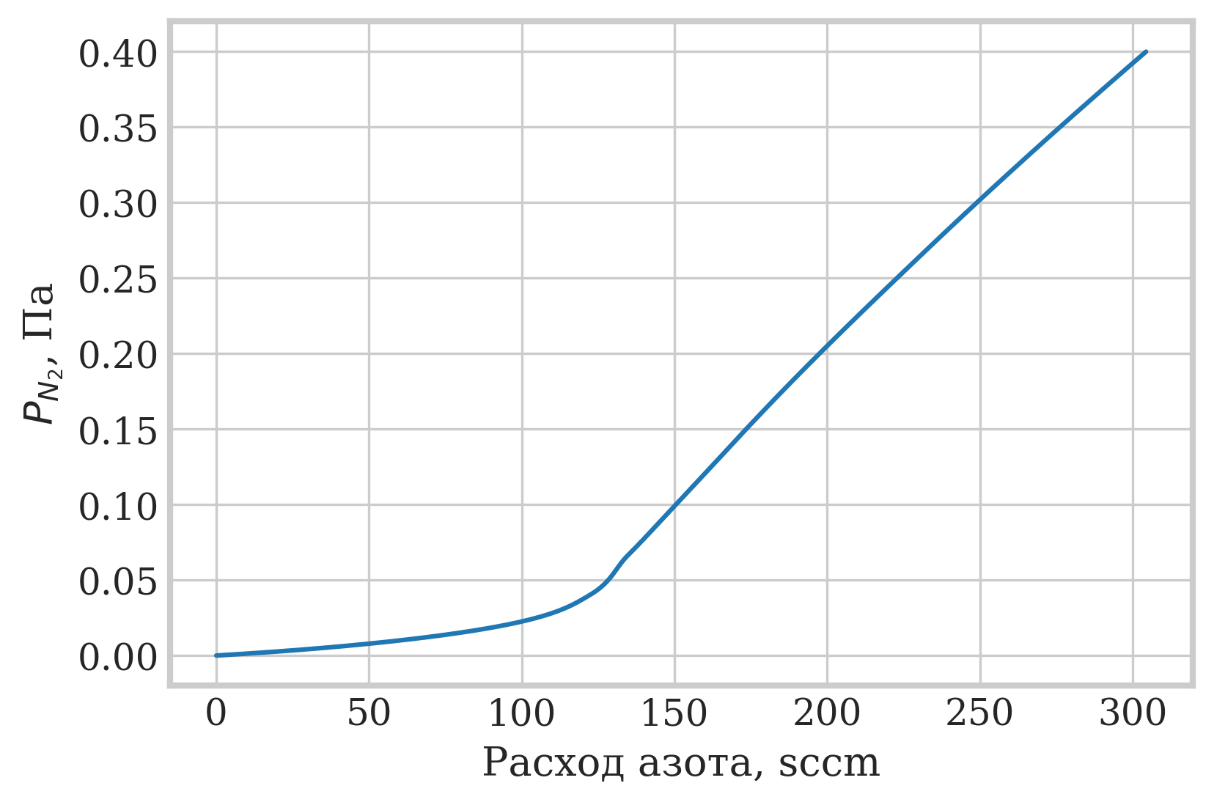


Рисунок 1.2 Пример расчёта давления для мишени Si – Mo

## Расчёт удельной скорости осаждения кремния и молибдена

Удельную скорость осаждения кремния и молибдена рассчитываются c использованием следующих формул:

Где N – количество атомов, конденсирующихся на единице поверхности в единицу времени, т.е. удельная скорость осаждения, см-2с-1, слагаемое характеризует кремний, поступающий в пленку благодаря распылению с мишени; слагаемое учитывает кремний, поступающий в пленку благодаря распылению свободного Si с мишени, θ1 – часть поверхности, покрытая стехиометричным Si3N4, (1 – θ1) - часть поверхности, занимаемая элементарным свободным Si, θ2 – часть поверхности мишени, покрытая MoN, (1 – θ2) - часть поверхности, занимаемая элементарным свободным Mo;

Для вычисления удельной скорости осаждения кремния и молибдена применяются команды:

*df["N\_Si"]= Si.N\_target\_of\_F(df.F)*

*df["N\_Mo"] = Mo.N\_target\_of\_F(df.F)*

Для вывода полученных зависимостей используется команда:

df[["P\_O2\_torr", "N\_Si", "N\_N"]].plot(x="P\_O2\_torr", xlabel = "Парциальное давление азота, Па", ylabel = "Cкорость осаждения, $см^{-2}с^{-1}$")

Пример представлен ниже (Рисунок 1.3)

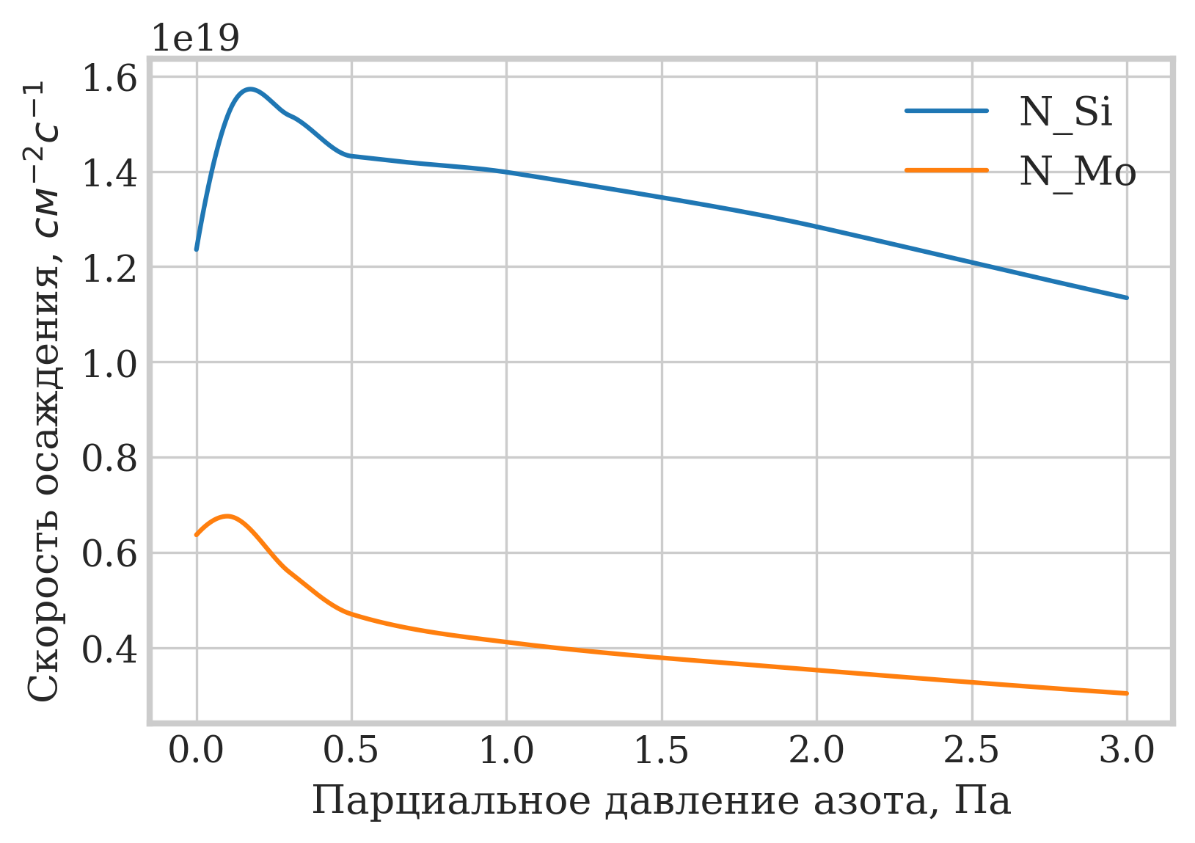


Рисунок 1.3 Скорость осаждения кремния и молибдена в зависимости от парциального давления азота.

## Расчёт удельной скорости осаждения азота

Выражение для удельной скорости осаждения азота вычисляется отдельно для каждой осуждаемой мишени и имеет вид:

Где слагаемое и выражают поток азота поступающий при распыление нитрида с поверхности мишени. Слагаемое выражает поток азота, который образуется при окисление распылённого вещества мишени азотом, выражает поток азота, абсорбировавшийся на образце.

Для вычисления удельной скорости осаждения кремния и молибдена применяются команды:

df["N\_N"] = Si\_Mo.N\_gase\_of\_P(df.P\_O2)[-1]

Для вывода полученных зависимостей используется команда:

df[["P\_O2\_torr", "N\_N", "N\_O2"]].plot(x="P\_O2\_torr", xlabel = "Парциальное давление азота, Па", ylabel = "Cкорость осаждения, $см^{-2}с^{-1}$")

Пример полученной зависимости представлен ниже (Рисунок 1.4)

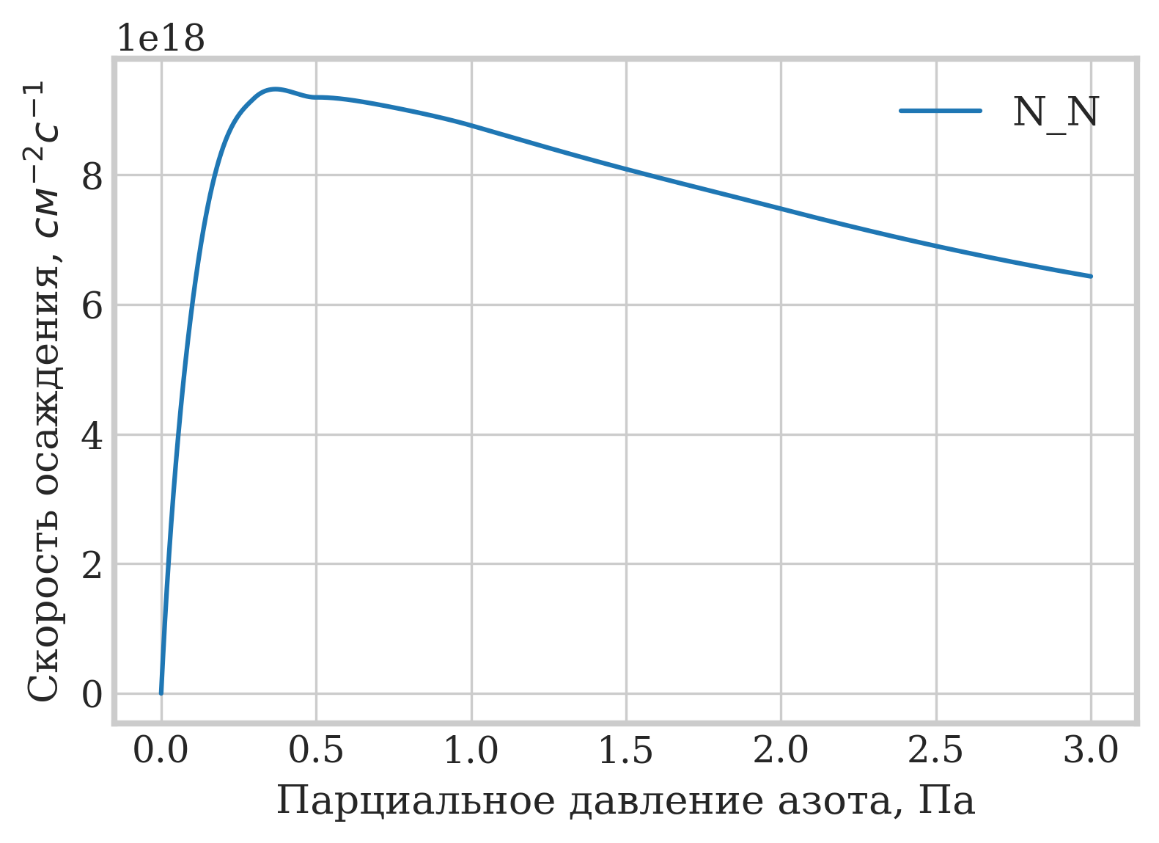


Рисунок 1.4 Скорость осаждения азота в зависимости от парциального давления азота.

## Расчёт удельной скорости осаждения кислорода

Для расчёта удельной скорости осаждения кислорода из остаточной атмосферы необходимо решить следующие выражение:

Где поток кислорода (F0) определяется остаточным давлением атмосферы (P­0) и содержанием кислорода в остаточной атмосфере (D0), эффективный поток (Fэфф) – определяется как поток кислорода после отделения потока кислорода, потребляемого осевшим веществом. Расчёты проводились из предположения, о том, что кислород может как окислять распалённый материал мишени (за это отвечает слагаемое ), так и присоединяться к молекуле соединения, распыляемого с поверхности мишени, за это отвечает слагаемое (. Предполагается что уже прореагировавший с азотом материал мишени не реагирует с кислородом.

Для вычисления удельной скорости осаждения кремния и молибдена применяются команды:

*df["N\_O2"] = Si\_Mo.N\_O2\_of\_P(df.P\_O2, P\_residual=7e-5\*133)*

Для вывода полученных зависимостей используется команда:

*df[["P\_O2\_torr", "N\_O2"]].plot(x="P\_O2\_torr", xlabel = "Парциальное давление азота, Па", ylabel = "Cкорость осаждения, $см^{-2}с^{-1}$")*

Пример полученной зависимости представлен ниже (Рисунок 1.5)

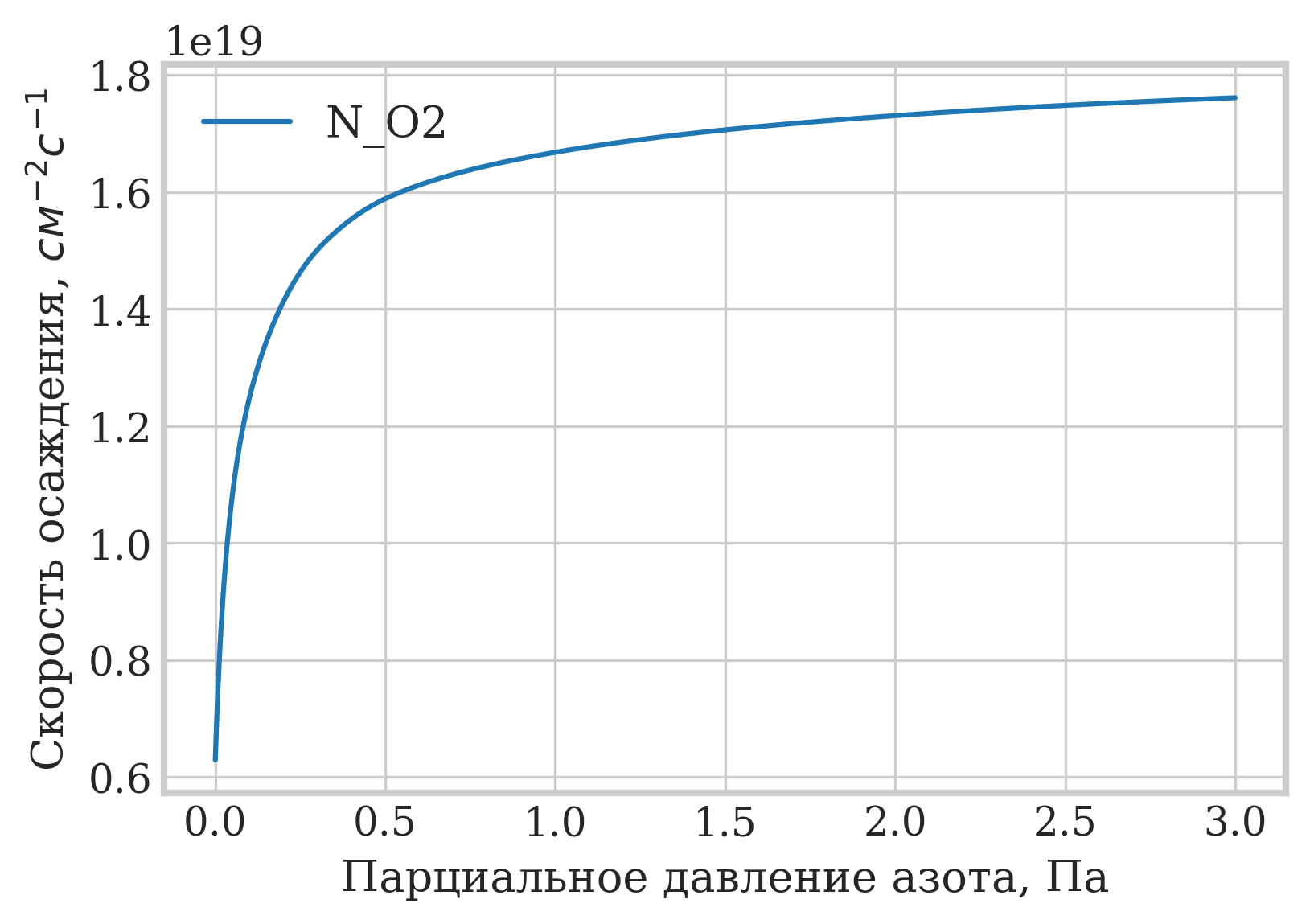


Рисунок 1.5 Скорость осаждения кислорода в зависимости от парциального давления азота.

## Вычисление соотношения элементов в плёнке

Для расчёта соотношения элементов в плёнке используются выражения (8 – 11).

Для вычисления удельной скорости осаждения кремния и молибдена применяются команды:

df["N"] = df.N\_Si + df.N\_Mo + df.N\_O2 + df.N\_N

df["C\_Si"] = df.N\_Si / df.N \* 100

df["C\_Mo"] = df.N\_Mo / df.N \* 100

df["C\_N"] = df.N\_N / df.N \* 100

df["C\_O2"] = df.N\_O2 / df.N \* 100

Для вывода полученных зависимостей используется команда

plt.plot(df["P\_O2\_torr"], df.C\_Si, label="Si", c=colors\_list[0])

plt.plot(df["P\_O2\_torr"], df.C\_Mo, label="Mo", c=colors\_list[1])

plt.plot(df["P\_O2\_torr"], df.C\_N, label="N", c=colors\_list[2])

plt.plot(df["P\_O2\_torr"], df.C\_O2, label="O2", c=colors\_list[3])

plt.xlabel("Давление, мТорр")

plt.ylabel("Содержание элемента, Ат %")

plt.legend(bbox\_to\_anchor=(0., 1.02, 1., .102), loc='lower left',

ncols=4, mode="expand", borderaxespad=0.)

plt.show()

Пример полученных зависимостей показан ниже (Рисунок 1.6).

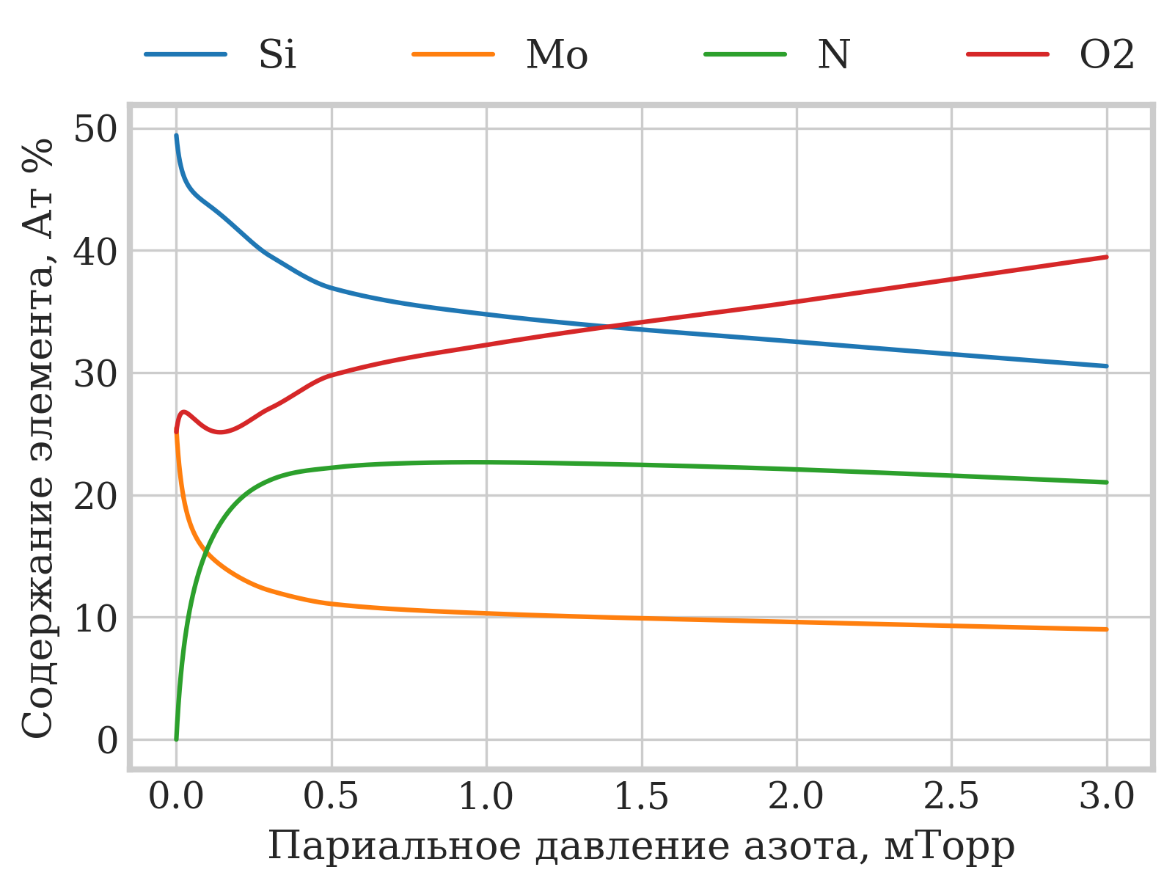


Рисунок 1.6 Зависимость концентрации компонентов плёнки в зависимости от парциального давления азота.