08

Методика обеспечения заданного распределения толщин тонкопленочных покрытий при магнетронном распылении

© С.М. Минеев, К.В. Дуров, В.Н. Полковников

Институт физики микроструктур РАН — филиал Федерального исследовательского центра Института прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова РАН,
603950 Нижний Новгород, Россия
e-mail: zevs2801@mail.ru, kirill.d@ipmras.ru

Поступило в Редакцию 21 мая 2026 г.
В окончательной редакции 21 мая 2026 г.
Принято к публикации 21 мая 2026 г.

Приведено описание математической модели, которая характеризует формирование определенного распределения толщин тонких пленок при магнетронном распылении с учетом маскирующих диафрагм. За основу для моделирования взят точечный источник атомов, испарение из которого происходит по закону, включающему изотропную и неизотропную части диаграммы направленности разлета атомов. В ходе экспериментов по напылению тонких пленок Ni и $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ показано, что вклад неизотропной части зависит от материала мишени для распыления. Также решались прямая и обратная задачи моделирования — исходя из геометрии заранее изготовленной диафрагмы вычислялось распределение толщины пленки и, наоборот, по заданному профилю пленки определялась форма диафрагмы. Результат показал удовлетворительное согласие полученных экспериментальных и теоретических распределений. Максимальное расхождение при решении прямой задачи составило менее 3 %, а обратной задачи — менее 5 %.

Ключевые слова: тонкие пленки, магнетронное распыление, маскирующие диафрагмы, математическая модель.

DOI: 10.61011/JTF.2026.09.63505.183-26

Введение

Для задач рентгеновской оптики критически важной является точность формы поверхности отражающих элементов. Существенные ошибки формы могут приводить к искажениям отраженных волновых фронтов, аберрациям, что в конечном счете негативно сказывается на разрешающей способности оптического прибора, в состав которого входят некачественные элементы.

При механической обработке подложек с приемлемой точностью изготавливаются лишь сферические заготовки. Придание им асферической формы может идти двумя путями. Первая методика связана с травлением поверхности заготовки пучками ускоренных ионов [1]. В этом случае с поверхности оптического элемента удаляются участки, выступающие над требуемым профилем. Второй подход — вакуумное напыление тонкопленочного покрытия. Фактически это обратный по отношению к ионно-пучковому метод. В данном случае на поверхность подложки материал добавляется. Данный подход применялся, например, для создания асферических зеркал солнечного телескопа SOHO [2]. Каждая из методик имеет преимущества и недостатки. Так, ионно-пучковое травление формирует заготовку без нанесения на ее поверхность дополнительных материалов. Такая подложка может впоследствии подвергаться химической обработке (например, для очистки поверхности от загрязнений) без риска уничтожения или повреждения асферизующего покрытия. В то же время есть ряд материалов (например, бериллий), поверхность которых не удается обработать ионными пучками без развития шероховатости [3]. Тогда естественным выходом становится применение методики пленочной асферизации.

Одним из наиболее распространенных методов пленочной асферизации является магнетронное распыление. В его основе лежит испарение вещества с плоской поверхности. В вакуумном объеме происходит ионизация атомов рабочего инертного газа за счет столкновения с электронами. Ускоряясь в электрическом поле, ионы бомбардируют плоскую мишень-катод, из который вылетают частицы напыляемого на подложке материала.

В статье [4] рассматривались эксперименты по созданию тонкопленочного асферического профиля с максимальным перепадом высот $\approx 1.3\,\mu$m методом магнетронного распыления на вогнутой подложке диаметром ≈ 100 mm. В качестве асферизующего покрытия использовалась многослойная структура Al/Si. Процедура создания заданного распределения толщины структуры носила итерационный характер. Многослойная структура осаждалась на кремниевые подложки, установленные на металлической поверхности с радиусом кривизны, равным таковому у „рабочей“ подложки. Распределение толщин на подложках зависела от фигурных маскирующих диафрагм, форма которых подбиралась эмпирически. При необходимости проводилась коррекция формы маскирующих диафрагм и повторное напыление. На финальном этапе структура Al/Si осаждалась на „рабочую“ подложку. В итоге удалось получить профиль асферизации, близкий к заданному. Однако вся процеду-

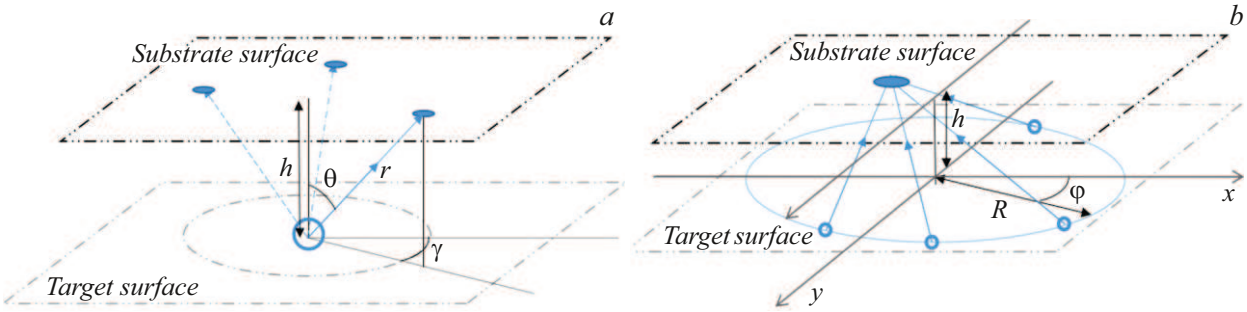

Рис. 1. Схема точечного (a) и кольцевого (b) источников в предлагаемой модели; h — расстояние от плоскости источника до плоскости подложек, в которой рассчитывается распределение частиц, r, γ, θ — сферическая система координат, φ — угол расположения источника на кольце, R — радиус кольцевого источника на мишени.

ра выведения формы диафрагм для синтеза заданного профиля покрытия заняла достаточно много рабочего времени (более месяца).

Помимо изготовления относительно толстых (толщиной более микрометра) асферических покрытий, к важным задачам в рентгеновской оптике можно отнести синтез отражающих покрытий гебелевских зеркал, для которых перепады толщин периодов могут составлять десятки процентов [5]. Для эффективного отражения такие фокусирующие и коллимирующие рентгенооптические элементы имеют многослойные покрытия с определенным градиентом периода вдоль поверхности [6]. Чтобы синтезировать такую структуру методом магнетронного распыления, применяют маскирующие диафрагмы, которые и задают необходимый профиль периода.

Вообще говоря, рассмотренные выше примеры являются частными случаями. Маскирующие диафрагмы при магнетронном напылении используются практически всегда. Они необходимы не только для формирования заданных градиентов толщины по площади подложки, но и для обеспечения равномерности толщины пленок на требуемом уровне. Для оптимизации работы (сокращения времени на выведение необходимой формы диафрагм и, как следствие, экономии дорогостоящих материалов мишеней) необходимо решить задачу предварительного расчета формы маскирующих диафрагм.

В рамках настоящей работы предложена математическая модель, которая смогла бы описать направления разлета атомов с поверхности мишени для распыления и спрогнозировать форму маскирующих диафрагм исходя из необходимого нам профиля периода многослойной структуры. А также показаны результаты экспериментальной проверки полученной модели.

1. Описание математической модели

Детальное описание процесса напыления вещества при магнетронном распылении требует учета нейтральных/ионизированных частиц газа в камере, электронов, вызывающих рассеяние потока частиц, испускаемых с поверхности мишени и магнитного поля, влияющего на движение ионизованных частиц, испущенных с мишени [7].

В рамках модели рассмотрено движение частиц при следующих допущениях:

1. Концентрации атомов газа и электронов при давлении 10^{-3} Torr обеспечивают длину свободного пробега для частиц распыляемого вещества порядка расстояния мишень–подложка [7], что позволяет пренебречь рассеяниемза счет столкновений. В нашем случае это расстояния порядка $7-8$ cm.

2. Вкладом ионизированных частиц, испущенных с мишени, в толщину формируемой пленки пренебрегаем. В потоке частиц, испускаемых с поверхности мишени, характерная доля ионизированных атомов для магнетронного распыления на постоянном токе, составляет $1-5\,\%$ [8]. Полагая долю ионизированных атомов в сравнении с числом нейтральных атомов малой, влиянием магнитного и электрического полей на итоговое распределение толщины за счет их отклонения пренебрегаем в рамках модели.

3. Концентрация атомов испаряемого вещества достаточно мала, что позволяет пренебречь рассеянием частиц в результате их столкновения друг с другом. В рамках модели рассмотрен аддитивный вклад источников, т. е. как независимых.

Рассмотрим испарение вещества с плоской поверхности из точечного источника [9,10], (рис. 1).

Угловое распределение интенсивности потока вещества, испускаемого точечным испарителем, в литературных источниках зачастую рассматривают пропорциональным $\cos^n(\theta)$, где степень n определяет отклонение углового распределения потока вещества от изотропного. Это отклонение обусловливается различными энергиями атомов, испаряемых с поверхности мишени и атомов рабочего газа. Но $\cos^n(\theta)$ не описывает многие случаи неизотропного углового распределения, в частности, для низких энергий атомов рабочего газа, как рассмотрено в [11,12]. В таких случаях отклонение возможно рассмотреть при учете аддитивного вклада второго порядка разложения по угловым гармоникам, добавив, например, $a \cdot \sin(2\theta)$. Таким образом получаем

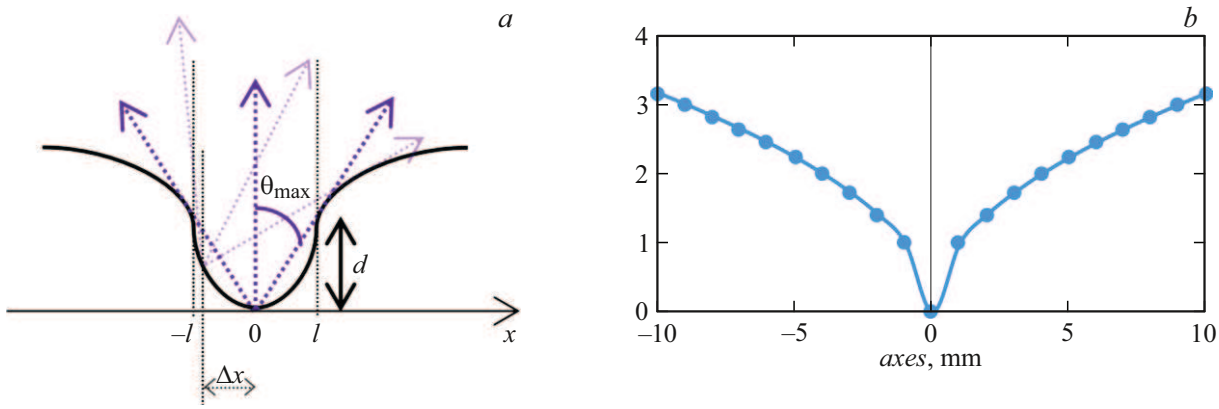

Рис. 2. Схема учета доступных углов излучения атомов (a) и профиль эрозионной канавки мишени (b). d — глубина канавки, l — ширина канавки, x — координата в срезе эрозионной канавки с 0 в ее центре, Δx — смещенное положение источника относительно центра канавки.

поток вещества от точечного источника в виде (1):

$$\mathbf{j} \sim \mathbf{e_r} \frac{\cos(\theta) + a|\sin(2\theta)|}{r^2}, \quad 0 \le \theta \le \pi, \tag{1}$$

где r — расстояние между источником и конкретной точкой на плоскости подложек, $\mathbf{e_r}$ — единичный вектор вдоль радиус вектора, свободный параметра определяет вклад неизотропной части диаграммы направленности. На значение параметра a влияют энергия атомов рабочего газа, массы атомов мишени и углы соударения этих атомов. Тогда проекция потока на нормаль плоскости напыления определяется по формуле (2):

$$\begin{aligned} j_n &\sim (\mathbf{e_z}, \mathbf{e_r}) \frac{\cos(\theta) + a|\sin(2\theta)|}{r^2} \\ &= \frac{\cos^2(\theta) + a|\sin(2\theta)|\cos(\theta)}{r^2} \\ &= \frac{\cos^2(\theta)(1 + 2a\sqrt{1-\cos^2(\theta)})}{r^2}. \end{aligned} \tag{2}$$

Для магнетронного напыления характерная форма источника испускаемых частиц представляет из себя кольцевую эрозионную зону, для математического представления которой в рамках модели используется кольцевой источник (рис. 1, 2) с изменением интенсивности излучения и области доступных углов излучения. Переходя от угловой зависимости к декартовым координатам, фиксируя высоту напыления h и формируя кольцевой источник как набор точечных источников на расстоянии R:

$$\cos(\theta) = \frac{h}{\sqrt{h^2 + (x + R\cos(\varphi))^2 + (y + R\sin(\varphi))^2}},$$

$$|\sin(2\theta)| = 2|\cos(\theta)|\sqrt{1-\cos^2(\theta)},$$

$$r = \sqrt{h^2 + (x + R\cos(\theta))^2 + (y + R\sin(\varphi))^2}.$$

Тогда на высоте h:

$$\begin{aligned} j_{n,h}(\varphi, (x, y)) &= (2) \\ &= \frac{h^2}{h^2 + (x + R\cos(\varphi))^2 + (y + R\sin(\varphi))^2)^2} \\ &\times \left[1 + 2a\sqrt{1 - \frac{h^2}{(h^2 + (x + R\cos(\varphi))^2 + (y + R\sin(\varphi))^2)}}\right]. \end{aligned} \tag{3}$$

При учете формы эрозионной канавки (рис. 2), в которой располагаются источники, для каждого из источников появляется диапазон доступных углов излучения частиц, а именно для центрального источника: $-\theta_{\max} < \theta < \theta_{\max} = \operatorname{arctg}\left(\frac{d}{l}\right)$, а для источника, смещенного от центра на расстояние Δx: $\theta_{\max 1} < \theta < \theta_{\max 2}$, $\theta_{\max 1} = \operatorname{arctg}\left(\frac{d - f(\Delta x)}{l + \Delta x}\right)$, $\theta_{\max 2} = \operatorname{arctg}\left(\frac{d - f(\Delta x)}{l - \Delta x}\right)$, где $f(\Delta x)$ — функция зависимости глубины зоны эрозии от смещения из ее центра. Интенсивность испускания частиц из различных областей зоны эрозии примем пропорциональной глубине $f(\Delta x)$ расположения источника.

Ограничим итоговый поток частиц от точечного источника, расположенного на кольце, смещенного относительно центра зоны эрозии на Δr, и из (3) получим:

$$\begin{aligned} &j_{n,h}(\Delta r, \varphi, (x, y)) \\ &\sim \left(\frac{I(f(\Delta r))(h_{\text{local}})^2}{((h_{\text{local}} + f(\Delta r))^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2)^2}\right. \\ &\times \left.\left[1 + 2a\sqrt{1 - \frac{(h_{\text{local}})^2}{((h_{\text{local}} + f(\Delta r))^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2)^2}}\right]\right) \\ &\times C(\Delta r, \varphi, (x, y)), \end{aligned} \tag{4}$$

где $x_{\text{local}} = x + (R + \Delta r)\cos(\varphi)$, $y_{\text{local}} = y + (R + \Delta r) \times \sin(\varphi)$, $h_{\text{local}} = h + f(\Delta r)$, Δr — смещение точки относительно радиуса, $I(f(\Delta r))$ — интенсивность излучения, пропорциональная $f(\Delta r)$, $C(\Delta r, \varphi, (x, y)) = \exp[-((x'/D(\Delta r))^4]$ — функция

супергаусса в декартовых координатах на подложке с преобразованием координат

$$\begin{cases} x' = (x - R - D(\Delta r))\cos(\varphi) + (y - R - D(\Delta r))\sin(\varphi)), \\ y' = -(x - R - D(\Delta r))\sin(\varphi) + (y - R - D(\Delta r))\cos(\varphi)) \end{cases}$$

— описывает полосу значений близких к единице, в которых происходит учет значений потока для каждого из источников в канавке, $D = \Delta r \frac{h_{\text{local}}}{l - f(\Delta r)}$ — полуширина доступной для напыления области на поверхности подложки для данного источника.

Также учета требует наклон локальной нормали в лунке зоны эрозии, где располагается каждый источник, относительно нормали к плоскости мишени: $f(\Delta r)$ — определяет глубину зоны эрозии, тогда $\cos(\theta)$ преобразуется в координатах (x, y) из:

$$\cos(\theta) = \frac{h_{\text{local}}}{((h_{\text{local}})^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2)^{\frac{1}{2}}}$$

к

$$\cos(\theta) = \frac{(h_{\text{local}}\cos(\Delta\theta) + x_{\text{local}}\cos(\varphi)\sin(\Delta\theta) + y_{\text{local}}\sin(\varphi)\sin(\Delta\theta))}{((h_{\text{local}})^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2)^{\frac{1}{2}}},$$

где $\sin(\Delta\theta) = -\frac{f'(\Delta r)}{\sqrt{1+(f'(\Delta r))^2}}$, $\cos(\Delta\theta) = \frac{1}{\sqrt{1+(f'(\Delta r))^2}}$ определяют отклонение максимума источника от направления по нормали к поверхности мишени для каждого источника в зоне эрозии, тогда из (4) получим выражение для источника с учетом наклона и ограничения по доступным углам:

$$j_{n,h}(\Delta r, \varphi, (x, y)) \sim \Bigg(\frac{I(f(\Delta r))h_{\text{local}}}{((h_{\text{local}} + f(\Delta r))^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2)^{\frac{3}{2}}}$$
$$\times \frac{(h_{\text{local}}\cos(\Delta\theta) + x_{\text{local}}\cos(\varphi)\sin(\Delta\theta) + y_{\text{local}}\sin(\varphi)\sin(\Delta\theta))^2}{(h_{\text{local}})^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2}$$
$$\times \left[1 + 2a\sqrt{1 - \frac{(h_{\text{local}}\cos(\Delta\theta) + x_{\text{local}}\cos(\varphi)\sin(\Delta\theta) + y_{\text{local}}\sin(\varphi)sin(\Delta\theta))^2}{(h_{\text{local}})^2 + (x_{\text{local}})^2 + (y_{\text{local}})^2}}\right]\Bigg) C(\Delta r, \varphi, (x, y)). \quad (5)$$

Получив выражение (5) для точечного источника на кольце $j_n(\Delta r, \varphi, (x, y))$ при интегрировании по области кольца, находим поток вещества на высоте подложки, формируемый всем кольцевым источником:

$$J_n(x, y) = \int_{-l}^{l} \left(\int_{0}^{2\pi} j_n(\Delta r, \varphi, (x, y)) \frac{\Delta r d(\Delta r)}{4\pi R l} d\varphi \right), \quad (6)$$

где $4\pi R l$ — площадь кольца шириной $2l$, радиуса R.

При перемещении подложки по заданной траектории (рис. 3, a) выше диафрагмы поток частиц обрезается по форме диафрагмы и распространяется в области выше между диафрагмой и подложкой, диафрагму возможно задать для потока вещества в виде функции

$$\vartheta_H(x, y) = \begin{cases} 1, (x, y) \in A & \text{(область, ограниченная} \\ & \text{диафрагмой)} \\ 0, (x, y) \notin A), \end{cases} \quad (7)$$

тогда поток вещества при учете диафрагмы из (5)–(7):

$$H(x, y) \sim \int_{t_0=0}^{t} J_n(x'(t), y'(t))\vartheta_H(x, y)dt, \quad (8)$$

где $x'(t)$, $y'(t)$ — преобразование координат за счет перемещения подложки, в случае линейного перемещения вдоль x: $x(t) = x + Vt$, $y(t) = y$.

Между диафрагмой и подложкой также существует зазор, позволяющий частицам, траектории которых направлены под соответствующими углами, перемещаться за область диафрагмы, что искажает итоговое распределение (рис. 3, b). Данный эффект обозначим как подпыление частиц за диафрагму:

$$x'_i = x - \left(x_i - R \begin{cases} \cos\varphi \\ \sin\varphi \end{cases} \right) \frac{f}{h}$$

— преобразование координат потока после прохождения через диафрагму, тогда итоговое выражение для толщины напыленного материала на подложку получен из (8):

$$H(x, y) = \int_{t_0=0}^{t_1} \iint j_n(\Delta r, \varphi, (x', y'))\vartheta_h(x', y') \frac{\Delta r d(\Delta r)}{4\pi R l} d\varphi dt, \quad (9)$$

где $x'(R, \varphi, (x, y), t)$, $y'(R, \varphi, (x, y), t)$ — преобразование координат для каждого из источников.

Данное выражение для толщины напыленной пленки, использованное далее в численном расчет, учитывает

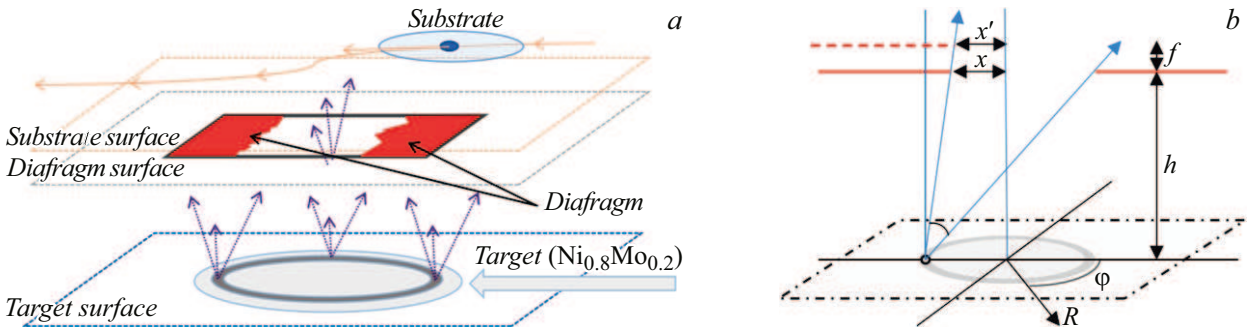

Рис. 3. Схема напыления с учетом диафрагм (*a*), схема подпыления частиц за пределы границ диафрагмы (*b*).

такие факторы, как различие в интенсивности и доступных углах излучения областей зоны эрозии мишени в соответствии с ее формой, наличие зазора между диафрагмой и плоской подложкой, неизотропность излучения источников зоны эрозии.

Расчет распределений производился численно в программной среде языка python с использованием библиотек numpy, scipy для представления функций в качестве многомерных массивов и интерполирования зависимостей по точкам и библиотеки PyQt5 для отображения всех расчетных процессов в приложении.

2. Методика эксперимента

В рамках настоящей работы тонкие пленки Ni и $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ были синтезированы методом магнетронного распыления на постоянном токе. Рабочая камера установки представляет собой кубический объем длиной примерно 1.2 m. Перед началом технологического процесса давление остаточных газов в вакуумной камере находилось на уровне $1 \cdot 10^{-6}$ Torr. В качестве рабочего газа для распыления мишеней использовался высокочистый (99.998 %) аргон, давление которого в процессе напыления структур поддерживалось постоянным и составляло примерно $(1.3 - 1.4) \cdot 10^{-3}$ Torr.

Магнетронные источники в количестве 2-х штук располагаются горизонтально. Мишени Ni и $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ толщиной 1 и 6 mm соответственно имели круглую форму, а в диаметре составляли 150 mm. Магнитное поле арочной конфигурации формирует на поверхностях мишеней кольцевую зону эрозии диаметром 107 mm и толщиной 20 mm.

Источниками питания магнетронов служат стабилизированные блоки на постоянном токе, разработанные в ИФМ РАН. Они позволяют варьировать ток разряда в пределах 100–2000 mA при напряжениях от 100 до 500 V. В процессе напыления значения токов составляли 300 mA и для Ni и для $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$.

Характерные скорости роста пленок для магнетронного распыления на постоянном токе составляют $\sim 0.1 - 1$ nm/s в зависимости от материала мишени и от приложенной к ней электрической мощности.

Подложки в настоящей работе размером 20×10 mm были вырезаны из стандартных для микроэлектронной промышленности плоских круглых пластин монокристаллического кремния с ориентацией (100) диаметром 100 mm и толщиной 0.46 mm. Эффективная среднеквадратичная шероховатость поверхности таких подложек составляет $0.2 - 0.3$ nm. Крепились подложки на расстоянии ≈ 81 mm от мишеней. Максимальное расстояние между подложками на держателе составляло до 100 mm, что соответствует диаметру вогнутой подложки в работе [4].

Эксперименты по осаждению пленок как Ni, так и $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ происходили в 3 этапа. На первом этапе необходимо было получить статическое распределение толщин пленок без маскирующих диафрагм, т. е. напыление происходило на кремниевые подложки, которые крепились вдоль и поперек направления движения держателя, а сам держатель устанавливался прямо напротив магнетронного источника. В процессе напыления держатель оставался неподвижным. В таком случае толщина пленок могла контролироваться только временем работы включенного магнетрона. Далее в тексте под „статическим“ мы будем подразумевать распределение, полученное описанным выше режимом напыления.

На втором этапе проводилось моделирование профиля пленок при линейном движении подложкодержателя на основе полученного статического распределения толщин. Далее в тексте такой вид распределения будем обозначать „динамическое“. Прямая задача предполагала моделирование распределения толщины пленок в поперечном направлении держателя, исходя из известной формы диафрагм. В обратной задаче, наоборот, моделировалась геометрия диафрагмы, исходя из заранее определенного статического распределения толщины пленок поперек направления движения держателя.

На третьем этапе устанавливались те или иные маскирующие диафрагмы, подложки крепились только поперек направления движения держателя, который в процессе напыления совершал возвратно-поступательные движения над мишенями. Контролировать толщину слоев, наносимых на подложку, можно было, изменяя скорость прохождения держателя над мишенью (т. е. временем нахождения подложки в зоне магнетронного

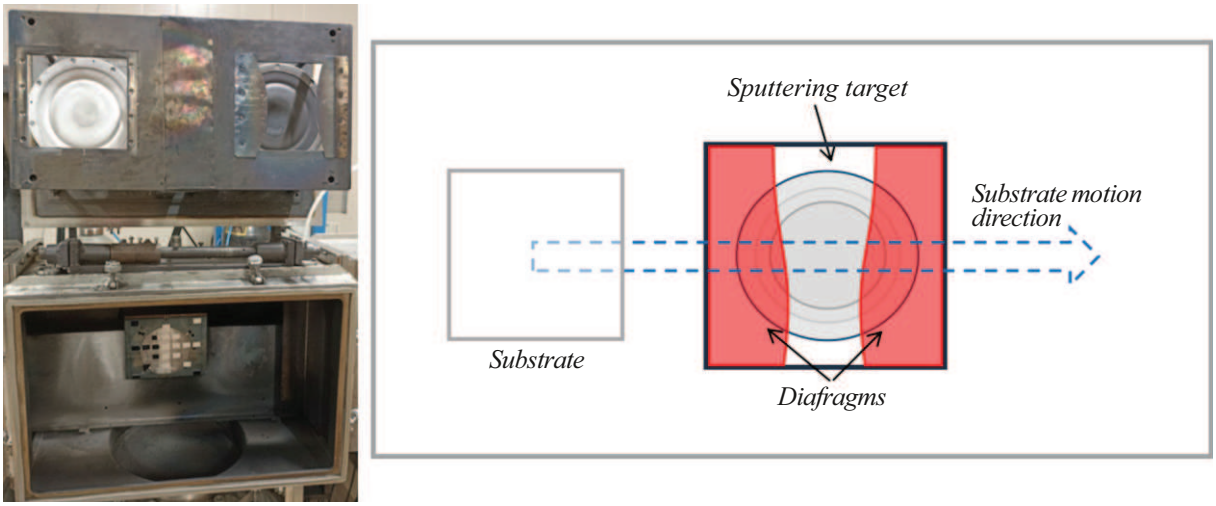

Рис. 4. Фотография и схема установки магнетронного напыления с линейным типом перемещения подложкодержателя.

разряда) и числом проходов подложкодержателя над магнетроном. На рис. 4 приведена схема установки.

Определение толщины пленок проводилось на основе результатов измерений на четырехкристальном лабораторном дифрактометре PANalitycal X'Pert PRO MRD методом малоугловой рентгеновской рефлектометрии (по осцилляциям Киссига). Образец устанавливался на столик с шестью степенями свободы. Источником излучения с длиной волны $\lambda = 0.154$ nm (линия $CuK_{\alpha 1}$) была рентгеновская трубка. Рабочие параметры рентгеновской трубки: напряжение $U = 30$ kV, ток электронного пучка $I = 20$ mA. Спектральная и угловая монохроматизация зондового пучка осуществлялась с помощью четырехкристального асимметричного монохроматора Ge (220). Выходные щели далее за монохроматором ограничивали пучок в горизонтальной и вертикальной плоскостях. Перед газовым детектором установлен держатель с коллиматором Соллера и входная щель.

Для получения кривой зеркального отражения дифрактометр юстировался таким образом, чтобы образец делил пополам рентгеновский пучок. Это угловое положение принималось за нулевое. Источник излучения оставался неподвижным, а детектор, поворачиваясь с угловой скоростью, в два раза большей, чем образец, регистрировал интенсивность отраженного от образца излучения. Сканирование проводилось в диапазоне от 0 до 1.5°.

Толщина пленок определялась методом подгонки кривых зеркального отражения с использованием программы для рефлектометрической реконструкции многослойных структур „Multifitting“, разработанной в ИФМ РАН [13] и развитой впоследствии [14]. Она позволяет проводить расчет спектральных и угловых зависимостей коэффициента отражения от смоделированной структуры путем решения системы рекуррентных соотношений, а также осуществлять одновременную подгонку нескольких экспериментальных кривых, снятых в различных спектральных диапазонах.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Решение прямой задачи моделирования

В рамках решения прямой задачи проводились напыления тонких пленок $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$. На первом этапе необходимо было получить статическое распределение толщин (рис. 5) для определения свободного параметра a из формулы (1) для данного материала. В случае $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ параметр $a \approx 0.833$ из подгонки расчетной и экспериментальной кривых. Их разница лежит в пределах 1 %. На рис. 5 можно заметить смещение максимума распределения относительно нуля. Это обусловливается отклонением центра окна с диафрагмами, в рамках которого выбрана система координат, относительно центра

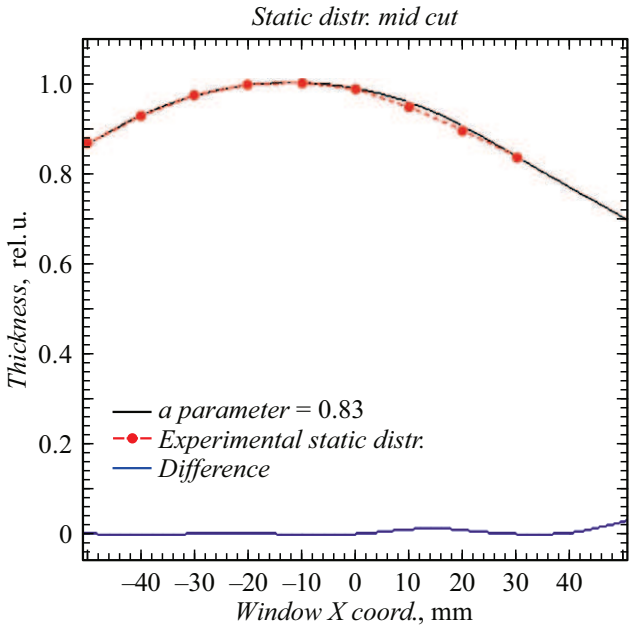

Рис. 5. Экспериментальное и расчетное статические распределения напыленного $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$.

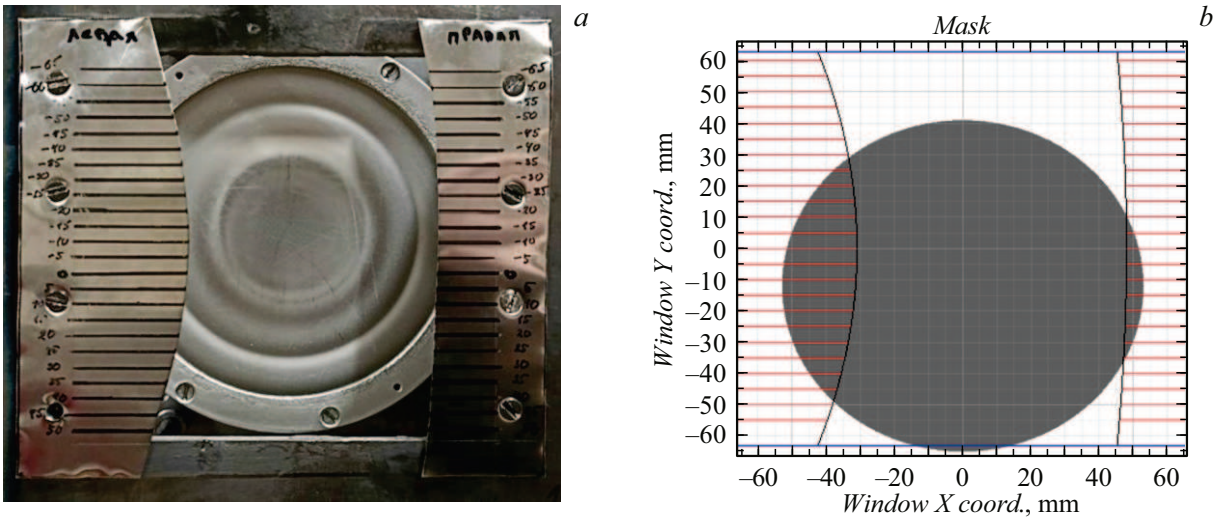

Рис. 6. Диафрагмы, использованные при напылении $Ni-0.8Mo_{0.2}$: *a* — вид в установке, *b* — схематичное изображение в рамках интерфейса программы.

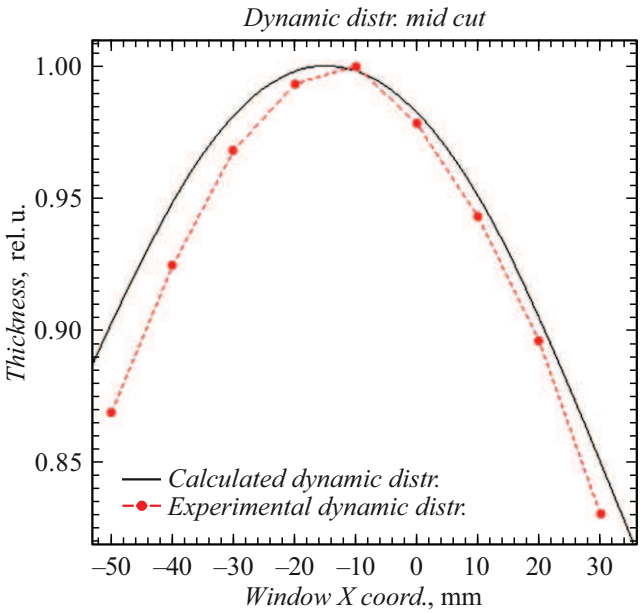

Рис. 7. Экспериментальное и расчетное динамические распределения напыленного $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$.

мишени, на которую приходится максимум суммарного потока частиц. Данная особенность связана с геометрией установки напыления, ее наличие учитывается при моделировании.

На втором этапе были выбраны тестовые диафрагмы произвольной формы. Форма диафрагм представлена на рис. 6.

Исходя из полученного статического распределения (параметра *a*, в частности) и известной формы диафрагм был произведен расчет динамического распределения толщины пленки $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ в поперечном направлении подложкодержателя. Сравнение теоретически рассчитанного распределения и экспериментально полученного представлено на рис. 7.

Для полученного экспериментального распределения в пределах измеренных точек отклонение от расчетного распределения сохраняется в пределах 3 % относительной толщины. Наличие обозначенного отклонения можно обосновать возникновением погрешности при измерении реальных размеров диафрагм. Также вклад в различие картин распределения вносит несовершенство использованной модели, поскольку отсутствует учет возможных столкновений испускаемых атомов с атомами аргона и друг с другом, что приводило бы к рассеянию и искажению итоговой картины распределения. Помимо

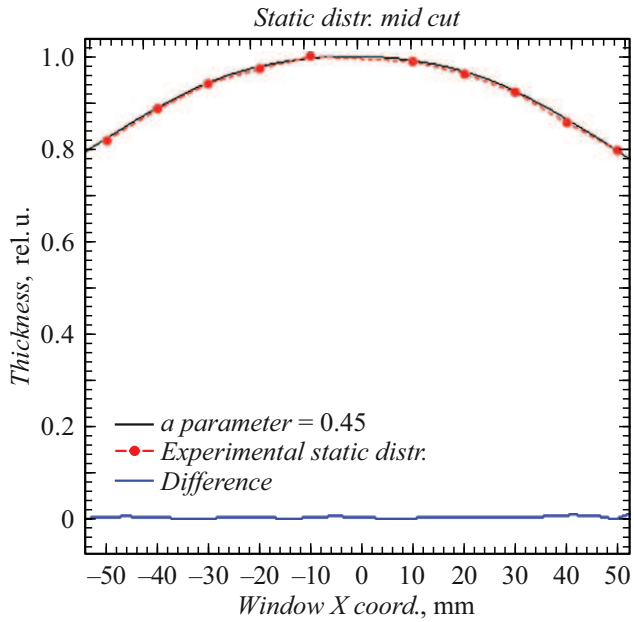

Рис. 8. Экспериментальное и расчетное статические распределения напыленного Ni.

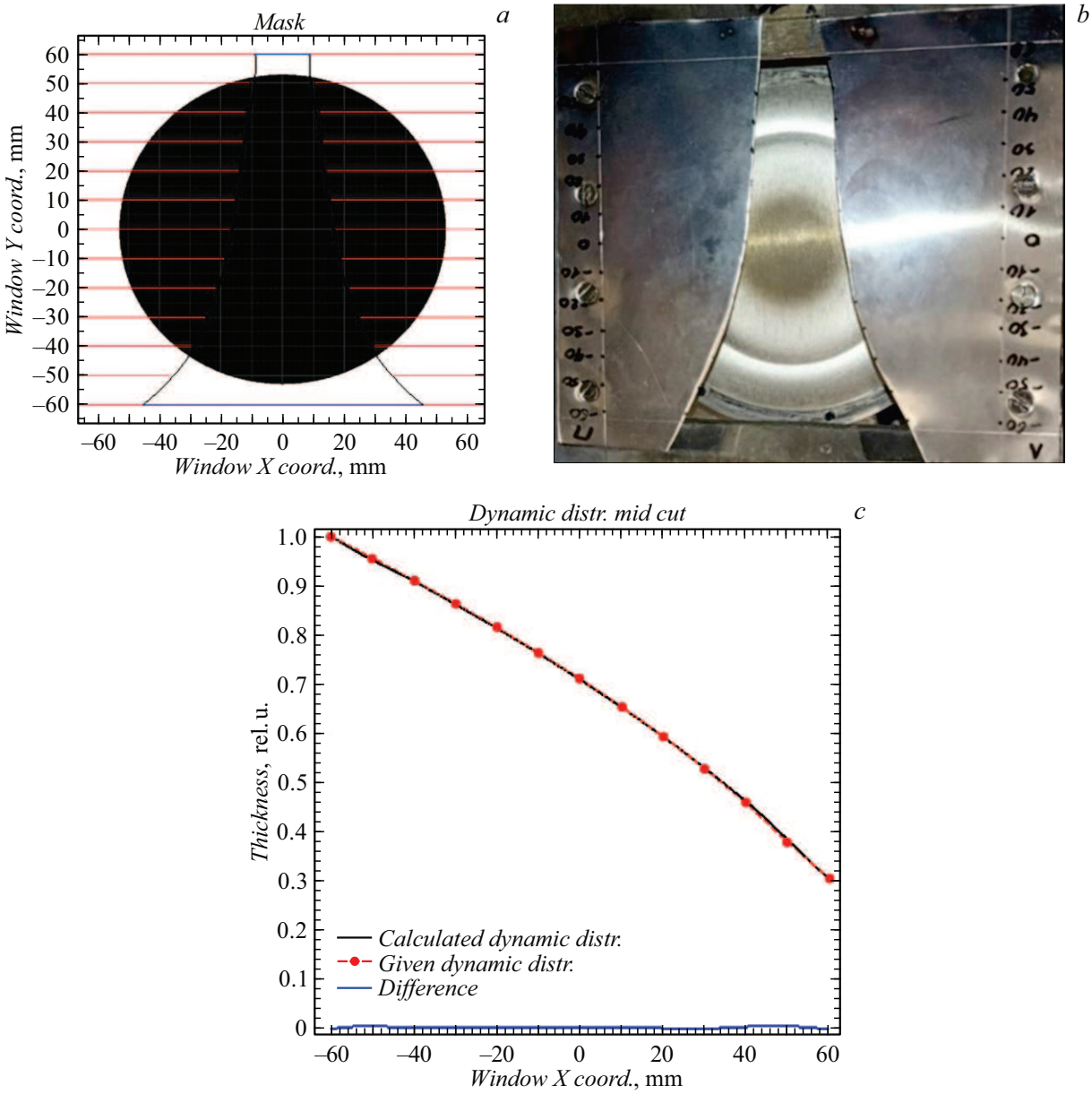

Рис. 9. Диафрагмы, смоделированные при решении обратной задачи (*a*), изображение изготовленных диафрагм (*b*), сравнение заданного динамического распределения (красная кривая) и подогнанного при решении обратной задачи (черная кривая) и их разница (синяя кривая) (*c*).

этого, не принимались во внимание другие допущения, указанные в начале описания модели.

3.2. Решение обратной задачи моделирования

В рамках решения обратной задачи проводились напыления тонких пленок Ni. На первом этапе также было получено статическое распределение толщин (рис. 8) для определения свободного параметра a из формулы (1) для данного материала. Для Ni параметр $a \approx 0.455$ из подгонки расчетной и экспериментальной кривых. Разницу в полученных параметра a можно объяснить разницей в магнитных свойствах мишеней никеля (магнитного) и сплава молибден-никель (немагнитного). Магнитные свойства влияют на распределение магнитного поля над поверхностью мишени и изменяют геометрию тлеющего разряда.

На втором этапе исходя из полученного статического распределения (параметра a) методом градиентного спуска (последовательным приближением расчетного распределения к заданному) была смоделирована форма диафрагм, обеспечивающая заданное динамическое распределение (рис. 9).

Диафрагмы с соответствующими размерами были изготовлены, их изображение представлено на рис. 10. Далее на третьем этапе проводилось напыление пленки

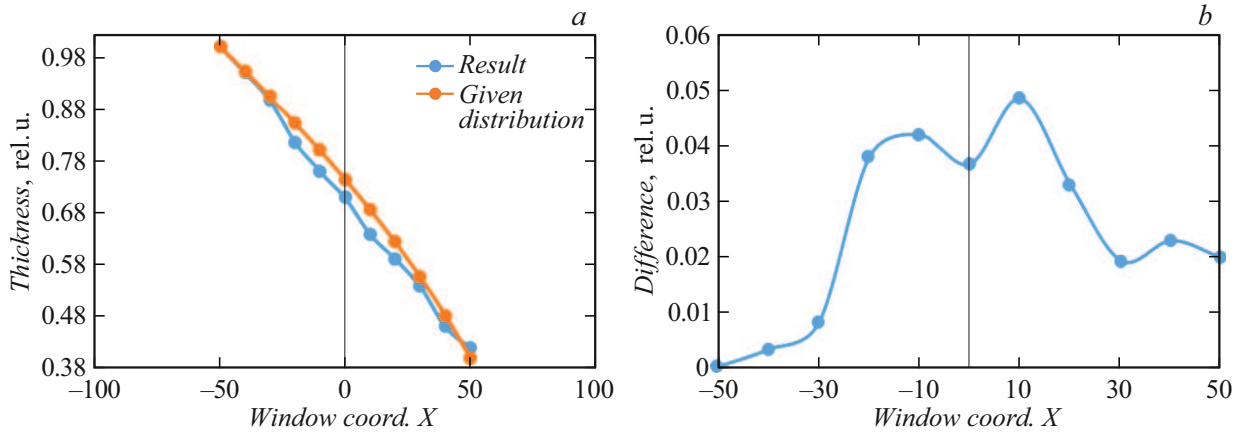

Рис. 10. Сравнение заданного распределения и полученного на подложке: распределения (a), их разница (b).

Ni, измерение толщины и сопоставление с расчетным распределением.

Отличие заданного и полученного на подложке распределений (рис. 10), сохраняющееся в рамках 5%, может быть объяснено теми же причинами, что были описаны выше при напылении $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$. Эти причины проявляются более остро ввиду большего градиента толщины напыляемой пленки по сравнению с $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$.

Заключение

В ходе работы была разработана и испытана математическая модель, описывающая формирование тонкопленочных покрытий, синтезированных методом магнетронного распыления. Модель основана на представлении источника разлета атомов с угловым распределением, пропорциональным комбинации $\cos(\theta)$ и вклада неизотропной части в виде $\sin(2\theta)$. Кроме того, модель учитывала геометрию установки, форму маскирующих диафрагм и зоны эрозии мишени.

В рамках экспериментов по напылению тонких пленок Ni и $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ были определены значения свободного параметра a, характеризующего отклонение диаграммы направленности от изотропного закона для данных материалов: для $Ni_{0.8}Mo_{0.2}$ $a \approx 0.833$, для Ni $a \approx 0.455$. Установлено, что предложенная модель демонстрирует хорошую сходимость с экспериментом при решении прямой задачи (расчет профиля пленки по известной геометрии диафрагмы) максимальное расхождение расчетного и измеренного распределений не превысило 3%. При решении обратной задачи (расчет формы диафрагмы под заданный профиль) достигнуто удовлетворительное (менее 5%) расхождение заданного и экспериментального профилей.

Для задач пленочной асферизации (когда речь идет о микронных толщинах) полученные точности распределений являются достаточными. Однако при напылении многослойных интерференционных покрытий точность получаемых распределений должна составлять 1% и ниже. Тем не менее без использования модели в первом приближении расхождение заданного и экспериментального профилей покрытий находится на уровне десятков процентов. Поэтому описанная в работе модель может сократить время на изготовление диафрагм необходимой формы и сэкономить дорогостоящие материалы мишеней.

Основной вклад в наблюдаемые отклонения вносит неточность изготовления реальных диафрагм относительно расчетного контура, а также принятые в модели допущения об отсутствии столкновений частиц в газовой фазе. Тем не менее точность прогнозирования формы покрытий является достаточной для применения методики в задачах пленочной асферизации рентгенооптических элементов. В дальнейшем встает вопрос об уточнении модели путем учета рассеяния атомов и более детального описания профиля эрозионной канавки мишени для повышения прецизионности синтеза градиентных покрытий. Помимо этого, в будущем в модели необходимо учитывать кривизну подложки, важную для задачи асферизации. Ее учет — логичный следующий шаг к повышению практической значимости модели.

Финансирование работы

Моделирование и работы по синтезу тонких пленок выполнены при поддержке гранта РНФ 21-72-30029-П, дифрактометрические измерения выполнены в рамках Государственного задания FFUF-2024-0022. Использовано оборудование ЦКП ИФМ РАН „Физика и технология микро- и наноструктур“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] I.V. Malyshev, D.G. Reunov, N.I. Chkhalo, M.N. Toropov, A.E. Pestov, V.N. Polkovnikov, N.N. Tsybin, A.Ya. Lopatin, A.K. Chernyshev, M.S. Mikhailenko, R.M. Smertin, R.S. Pleshkov, O.M. Shirokova. Opt. Express, **30** (26), 47567 (2022).

[2] J.-P. Delaboudiniere, R.A. Stern, A. Maucherat, F. PortierFozzani, W.M. Neupert, J.B. Gurman, R.C. Catura, J.R. Lemen, L. Shing, G.E. Artzner, J. Brunaud, A.H. Gabriel, D.J. Michels, J.D. Moses, B. Au, K.P. Dere, R.A. Howard, R. Kreplin, J.M. Defise, C. Jamar, P. Rochus, J.P. Chauvineau, J.P. Marioge, F. Clette, P. Cugnon, E.L. van Dessel. Adv. Space Res., **20** (12), 2231 (1997).

[3] N.I. Chkhalo, M.S. Mikhailenko, A.E. Pestov, V.N. Polkovnikov, M.V. Zorina, S.Yu. Zuev, D.S. Kazakov, A.V. Milkov, I.L. Strulya, V.A. Filichkina, A.S. Kozlov. Appl. Opt., **58**, 3652 (2019).

[4] К.В. Дуров, С.М. Минеев, В.Н. Полковников, Н.И. Чхало. ЖТФ, **94** (8), 1288 (2024).

[5] M. Schuster, H. Göbel. J. Phys. D: Appl. Phys., **28**, 270 (1995). DOI: 10.1088/0022-3727/28/4A/053

[6] К.В. Дуров, А.Д. Ахсахалян, И.В. Малышев, В.Н. Полковников, Н.И. Чхало. ЖТФ, **95** (9), 1808 (2025).

[7] J.T. Gudmundsson. *Physics and technology of magnetron sputtering discharges* (Science Institute, University of Iceland, Dunhaga 3, IS-107 Reykjavik, Iceland Department of Space and Plasma Physics, School of Electrical Engineering and Computer Science, KTH Royal Institute of Technology, SE-100 44, Stockholm, Sweden)

[8] M. Kateb, H. Hajihoseini, J.T. Gudmundsson, S. Ingvarsson. J. Vac. Sci. Technol. A, **37**, 031306 (2019).

[9] Л. Майссел, Р. Глэнг. *Технология тонких пленок*. Справочник (Советское радио, М., 1977)

[10] L. Holland, W. Steckelmacher. *349–355 THE DISTRIBUTION OF THIN FILMS CONDENSED ON SURFACES by the Vacuum Evaporation Method* (Research Laboratories, W. Edwards & Co. (London) Ltd. Manor Royal, Crawley, Sussex)

[11] Y. Yamamura. Radiat. Eff. Defects Solids, **55**, 49 (1981).

[12] Y. Yamamura, M. Ishida. J. Vac. Sci. Technol. A, **13**, 101 (1995).

[13] M. Svechnikov. J. Appl. Cryst., **53**, 244 (2020). DOI: 10.1107/S160057671901584X

[14] M. Svechnikov. J. Appl. Cryst., **57**, 848 (2024). DOI: 10.1107/S1600576724002231