

蒸发源位于半球面正下方膜厚分布理论研究

吴伟,王济洲,熊玉卿,王多书

(兰州空间技术物理研究所 表面工程技术重点实验室,甘肃 兰州 730000)

摘要: 对蒸发源位于非平面基底-半球面正下方时膜厚均匀性进行了理论研究。通过建立无量纲模型计算了此种几何配置下,半球表面在两种常见理想蒸发源下各位置的膜厚公式以及膜厚分布方程。选择基底与蒸发源间较大的距离,可获得更大的可镀膜区域,同时该距离对基底上镀制的膜层厚度分布影响也较大。最后对实用蒸发源的发射系数,对该几何配置下半球面膜厚分布影响进行了理论研究。

关键词: 膜厚分布; 半球面; 真空镀膜; 理论分析

中图分类号: O484.4

文献标志码: A

文章编号: 1006-7086(2013)04-0219-05

DOI: 10.3969/j.issn.1006-7086.2013.04.006

THEORY RESEARCH OF FILM THICKNESS DISTRIBUTION ON HEMISPHERICAL SURFACE WITH THE EVAPORATION SOURCE DIRECTLY BELOW THE SUBSTRATE

WU Wei, WANG Ji-zhou, XIONG Yu-qing, WANG Duo-shu

(Science and Technology on Surface Engineering Laboratory, Lanzhou Institute of Physics, Lanzhou 730000, China)

Abstract: The theory research of the film thickness distribution deposited on hemispherical surface with the evaporation source directly below the substrate is reported. The formulas of film thickness on any position of the hemispherical surface were derived in the geometric disposition. The uniformity of film thickness on the hemispherical surface were analyzed by calculate the relative film thickness. As the distance from the substrate to the evaporation source increase, the coating zone with larger range can be obtained, and the thickness functions turn to analogous linear function from the exponential function. Finally, a simulation research on the influence of emission pattern of real vapor sources was conducted.

Key words: thickness distribution; hemispherical surface; film deposition; theory analysis.

1 引言

膜厚均匀性研究一直是真空镀膜工作者的重要工作之一,这是因为膜厚的不均匀性严重制约了各类功能薄膜的正常使用^[1-3]。尽管以往关于膜厚分布的理论研究以及相应的改善膜厚均匀性的工作较多,几乎涵盖了所有的镀膜方式,如蒸发^[4-5]、溅射^[6-7]、CVD^[8-9]等。然而此类研究都是基于平面基片在平面夹具或者球形夹具下进行的。但是现代镀膜需求急剧向复杂化、多样化转变,仅仅是传统的平面基底很难满足需求,特别是在半球形表面镀膜的情况较多,如一些半球形的外壳、护罩等。显然对于此类半球形表面上镀膜的膜厚分布较之平面基片更加复杂,但是此类研究却几乎没有出现过。

在建立无量纲模型的基础上,从理论上分析了蒸发源位于正下方时,半球形基底的膜厚方程以及膜厚分布公式。同时分析了实际蒸发源下不同发射系数对该类半球形基底上的膜厚均匀性的影响。

2 无量纲模型的建立

基底上任意点的膜厚由蒸发源的发射特性以及基底与蒸发源的几何配置决定,早期的研究认为理论的蒸发源一般分为两类,即向四周均匀发射的点源以及遵守 Knudsen 分布的小平面面源,该类蒸发源蒸汽密度

收稿日期: 2013-06-26

基金项目: 重点实验室基金项目(9140C540302120C5401)

作者简介: 吴伟(1988-),男,安徽省安庆市人,硕士,主要从事薄膜技术与物理研究。

按所研究的方向与表面法线间的夹角呈余弦分布。

对于点源,设蒸发材料总质量为 m ,平面 ds 上沉积的量为 dM ,相当于立体角 $d\omega$ 内的材料蒸发量。如图 1 所示,在与蒸发源的距离为 r 且与蒸发方向呈 θ 角的小平面 ds 所张立体角为: $d\omega = \frac{ds \cdot \cos\theta}{r^2}$,则 $d\omega$ 范围内的蒸发量: $dM = Cm d\omega = \frac{Cm \cdot \cos\theta}{r^2} ds$,其中 C 为常数,可通过对接收表面的积分算出。

设接收面为球面,对整个球面积分则有:

$$\int dm = Cm \int_{\varphi=0}^{\pi} 2\pi \sin \varphi d\varphi, \text{ 则 } C = \frac{1}{4\pi}, \text{ 而 } dM = \mu t \cdot ds, \text{ 其}$$

中: t 为膜厚, μ 为蒸发材料的密度,由此可得:

$$t_p = \frac{m \cos \theta}{4\pi \mu r^2} \quad (1)$$

而对于小平面对,发射限为半球,在半球上积分:

$$\int dm = Cm \int_{\varphi=0}^{\frac{\pi}{2}} 2\pi \cos \varphi \cdot \sin \varphi d\varphi, \text{ 则 } C = \frac{1}{\pi}, \text{ 由于面源发射特性的方向性,在 } ds \text{ 上的沉积量 } dM = \frac{m}{\pi}$$

$\cos \varphi d\omega = \frac{m \cos \varphi \cos \theta}{\pi r} ds$,从而可获得面源膜厚为:

$$t_s = \frac{m \cos \varphi \cos \theta}{\pi \mu r^2} \quad (2)$$

而对于实际蒸发源,既不是理想的点源,也不是理想的小平面源,其膜厚方程修正为

$$t_s = \frac{m \cos^n \varphi \cos \theta}{\pi \mu r^2} \quad (3)$$

其中: n 表示蒸发源的发射特性,对于电子束蒸发一般在 $2 \sim 3$,有时甚至达到 $6^{[4]}$ 。

3 半球形结构表面计算及结果分析

3.1 理想蒸发源下理论膜厚分布

当蒸发源位于半球面正下方时,其蒸镀几何配置如图 2 所示,以球心作为坐标原点建立坐标系,则球心坐标为 $O(0,0,0)$,蒸发源坐标为 $S(0,0,-h)$, h 为蒸发源到球心的距离。设半球上任意一可镀膜点坐标为 $A(x,y,z)$,由于半球面以通过球心的 z 轴对称,故同一竖直高度处的圆上膜层厚度相等,因此可选 $y=0$ 作为任意点坐标,即为 $(x,0,z)$,设定 $z_0 = -z$,则 $z_0 \geq 0$,且 $0 \leq z_0 \leq R$,即半球表面上任意可镀膜点 A 的坐标为 $(x,0,-z_0)$,显然该点满足 $x^2 + z_0^2 = R^2$, R 为半球面半径则:镀膜表面元 $A(x,0,-z_0)$ 到蒸发源 S 的距离 r ,镀膜表面元 A 法线与连接蒸发源与镀膜表面元直线的夹角 θ ,面源法线与连接蒸发源和镀膜表面元的直线所构成的角度 φ 分别满足:

$$\begin{cases} r = \sqrt{R^2 + h^2 - 2hz_0} \\ \cos \theta = \frac{hz_0 - R^2}{R \sqrt{R^2 + h^2 - 2hz_0}} \\ \cos \varphi = \frac{h - z_0}{\sqrt{R^2 + h^2 - 2hz_0}} \end{cases} \quad (4)$$

则由式(1)~(4)可知,在此种几何配置下,点源及小平面对源下半球形基底任意点的膜厚方程为:

$$t_p = \frac{m}{4\pi \mu} \frac{hz_0 - R^2}{R(R^2 - 2hz_0 + h^2)^{\frac{3}{2}}} \quad (5)$$

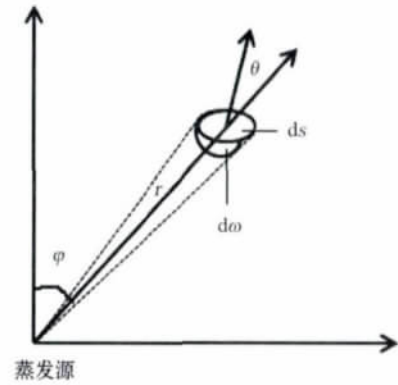


图 1 发射角度对膜厚的影响

$$t_s = \frac{m}{\pi\mu} \frac{(hz_0 - R^2)(h - z_0)}{R(R^2 - 2hz_0 + h^2)^2} \quad (6)$$

显然,在此种几何配置下半球表面并非所有位置都能镀膜,只有半球表面的下方一段区域可以镀膜,而蒸发源与镀膜表面元的连线与球面相切时为能够镀膜的极限点,设该点为 Q ,如图 1 所示,则有 $\vec{QO} \cdot \vec{QS} = 0$,可计算 Q 点的坐标为 $(\pm \frac{R}{h} \sqrt{h^2 - R^2}, -\frac{R^2}{h})$,即能够镀膜区域的极限位置为 z_0 值为 $\frac{R^2}{h}$ 处。综合以上推导,由此可以得出半球面上任意点的膜厚满足以下条件(同一 z_0 值时的圆周上膜厚相同):

$$\begin{cases} t_p = \frac{m}{4\pi\mu} \frac{hz_0 - R^2}{R(R^2 - 2hz_0 + h^2)^{\frac{3}{2}}} \\ t_s = \frac{m}{\pi\mu} \frac{(hz_0 - R^2)(h - z_0)}{R(R^2 - 2hz_0 + h^2)^2} \end{cases} \quad \left(\frac{R^2}{h} < z_0 \leq R\right) \quad (7)$$

可通过计算半球面上可镀膜的任意点与半球面最低点($z_0 = R$)的相对膜厚对半球面此种几何配置下的膜厚分布进行理论分析。蒸发源为点源时,由式(7)可知:

当 $z_0 = R$ 时: $t_{pR} = \frac{m}{4\pi\mu(h - R)^2}$, 则

$$\frac{t_p}{t_{pR}} = \frac{\left(\frac{h}{R} \cdot \frac{z_0}{R} - 1\right) \left(\frac{h}{R} - 1\right)^2}{\left[1 - 2\frac{h}{R} \frac{z_0}{R} + \left(\frac{h}{R}\right)^2\right]^{\frac{3}{2}}} \quad \left(\frac{R}{h} < \frac{z_0}{R} \leq 1\right) \quad (8)$$

蒸发源为小平面面源时:

当 $z_0 = R$ 时: $t_{sR} = \frac{m}{\pi\mu} \cdot \frac{1}{(h - R)^2}$, 则

$$\frac{t_s}{t_{sR}} = \frac{\left(\frac{h}{R} \frac{z_0}{R} - 1\right) \left(\frac{h}{R} - \frac{z_0}{R}\right) \left(\frac{h}{R} - 1\right)^2}{\left[1 - 2\frac{h}{R} \frac{z_0}{R} + \left(\frac{h}{R}\right)^2\right]^2} \quad \left(\frac{R}{h} < \frac{z_0}{R} \leq 1\right) \quad (9)$$

选取不同 $\frac{h}{R}$ 情况下 $\frac{t_s}{t_{sR}}$ 、 $\frac{t_p}{t_{pR}}$ 与 $\frac{z_0}{R}$ ($\frac{R}{h} < \frac{z_0}{R} \leq 1$) 函数图像如图 3 所示。由图可知,两种蒸发源在此种几何配置下,膜层厚度最大点都位于半球表面的最低点处,即 $z_0 = R$ 处,而随着高度的增加,膜厚逐渐减小,最终在 $z_0 = \frac{R^2}{h}$ 处,厚度趋向于 0。且此两种蒸发源在此种配置下膜厚分布曲线变化趋势类似,在 $\frac{h}{R}$ 较小时,膜层厚度随着与半球面球心竖直距离的增加呈现类似于指数增长的急剧变化趋势, $\frac{h}{R}$ 越小,曲线向下弯曲越严重,且小平面面源较之点源在膜厚分布上有一定的差距,小平面面源情况下的厚度分布曲线向下弯曲程度相对更加严重。

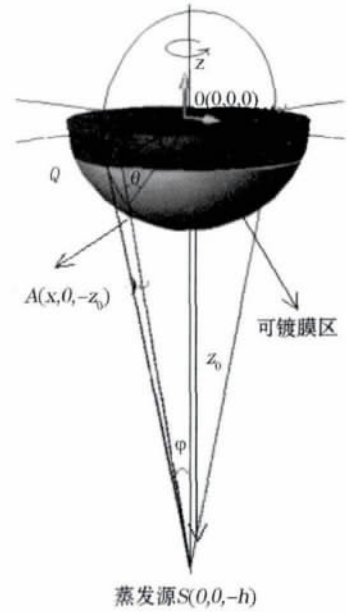


图 2 蒸发源位于半球面正下方时蒸镀几何示意图

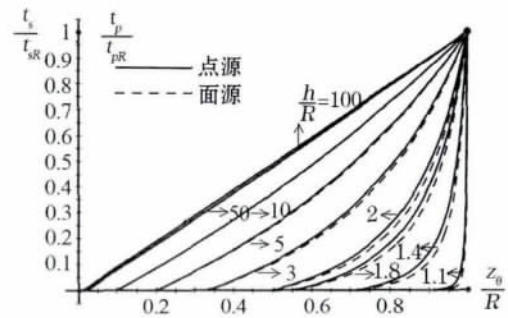


图 3 两种理想蒸发源下半球面在不同 $\frac{h}{R}$ 值下膜厚分布曲线

在 $\frac{h}{R}$ 较大以后,两种蒸发源下的膜厚分布曲线差距逐渐减小,膜层厚度分布曲线最终接近线性变化。

3.2 实际蒸发源下发射系数影响

对于实际蒸发源,发射系数对膜厚分布的影响较大。参照上节的推导可知,在实用蒸发源下,半球形基底在蒸发源位于正下方时的膜厚分布修正为以下方程:

$$\frac{t}{t_R} = \frac{\left(\frac{h}{R} \frac{z_0}{R} - 1\right) \left(\frac{h}{R} - \frac{z_0}{R}\right)^n \left(\frac{h}{R} - 1\right)^2}{\left[1 - 2 \frac{h}{R} \frac{z_0}{R} + \left(\frac{h}{R}\right)^2\right]^{\frac{n+3}{2}}} \quad \left(\frac{R}{h} < \frac{z_0}{R} \leq 1\right) \quad (10)$$

如图 4 所示,为几组不同 $\frac{h}{R}$ 值配置下,不同发射系数 n 下的膜厚分布曲线图。当 $\frac{h}{R}$ 取值较小时,发射系数对该配置下半球面的膜厚分布影响较大,发射系数越大,曲线向下弯曲越严重。随着 $\frac{h}{R}$ 取值逐渐增加,发射系数的影响逐渐减小,这是因为当基底与蒸发源距离较大时,发射角 φ 较小, $\cos^n \varphi$ 项对半球面的膜厚分布影响可以忽略不计。显然蒸发源位于球心正下方的几何配置下,半球形基底外部镀膜的膜厚均匀性是不理想的。基于平面基底下改善镀膜膜厚均匀性的有效方法需要应用于此类半球形表面,如选择合适的蒸发源位置^[10]、设计合理掩模板^[11-14]、使用行星式转动^[15-16]等,相应的进一步系统研究是必不可少的。

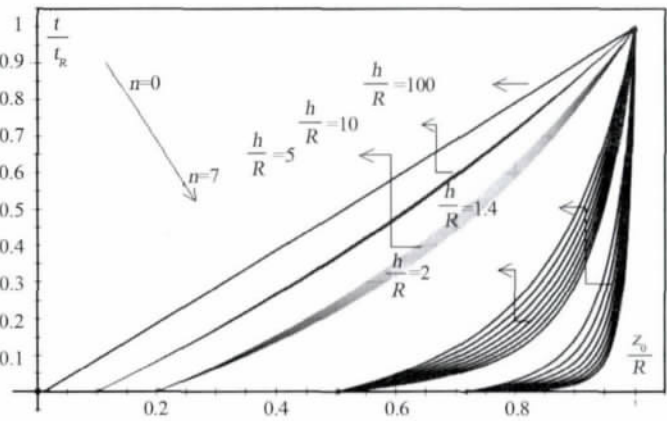


图 4 不同 $\frac{h}{R}$ 值下,半球面在不同发射系数 n 下膜厚分布曲线

4 结论

对蒸发源位于半球面正下方的镀膜均匀性进行了理论分析,通过理论计算,推算出了两种常见理想蒸发源下,半球表面的膜厚方程以及可镀膜区域,在此基础上分析了此种几何配置下的膜厚分布曲线,结果表明, $\frac{h}{R}$ 较小时可镀膜的区域有限,虽然两种蒸发源情况下的膜厚分布有一定的差距,但是在可镀膜区域的膜厚分布均呈现类似指数变化的趋势,而当 $\frac{h}{R}$ 较大时,可镀膜区域增大,两类蒸发源的理论膜厚分布曲线几乎重合,且膜厚分布曲线逐渐接近于线性变化。因此在此种几何配置情况下,在半球面半径 R 已经确定,应该尽量增加蒸发源与球心的高度 h 以获得较大的镀膜范围以及相对平缓的膜厚变化趋势。最后针对实用蒸发源与两类理想蒸发源的差异情况,对发射系数在该配置下膜厚分布的影响进行了理论分析,当 $\frac{h}{R}$ 较小时,发射系数对膜厚分布影响较大,发射系数越大,曲线向下弯曲越严重,随着 $\frac{h}{R}$ 取值的增加,发射系数的影响逐渐减小,最终可以忽略。以此文作为理论基础,改善此种半球面膜厚分布的系统工作还需要进行。

参考文献:

- [1] 许旻,邱家稳,赵印中,等. VO_2 薄膜制备及电学性能 [J]. 真空与低温,2001,7(4):207-214.
- [2] 李爱侠,孙大明,孙兆奇,等. 薄膜厚度对 $\text{Ag}-\text{MgF}_2$ 金属陶瓷薄膜内应力的影响 [J]. 真空与低温,2002,8(3):177-182.
- [3] 熊玉卿. 超窄带滤光片制作技术 [J]. 真空与低温,2005,11(3):125-130.

- [4] 董磊,方明,易葵,等. 大口径镀膜机均匀性的研究 [J]. 功能材料,2004,增刊(35):3216-3220.
- [5] 夏志林,赵元安,黄才华,等. 基于平板夹具的电子束蒸发沉积薄膜中的挖坑效应分析 [J]. 真空,2008,45(6):12-16.
- [6] 温培刚,颜悦,张官理,等. 磁控溅射沉积工艺条件对薄膜厚度均匀性的影响 [J]. 航空材料学报,2007,26(3):66-68.
- [7] 王晟,叶景峰,刘晶儒,等. 光溅射镀膜均匀性的优化模拟 [J]. 光子学报,2010,39(9):1543-1546.
- [8] 薛俊明,侯国付,王凯杰,等. 用 VHF-PECVD 技术研制大面积均匀硅基薄膜 [J]. 太阳能学报,2007,28(11):1227-1232.
- [9] 杭凌侠,Yin Y. 大面积应用的 RF-PECVD 技术研究 [J]. 真空科学与技术学报,2005,25(3):172-180.
- [10] 唐晋发,顾培夫,刘旭,等. 现代光学薄膜技术 [M]. 杭州:浙江大学出版社,2006:271-285.
- [11] Francisco Villa, Amalia Martinez, Luis E Regalado. Correction masks for thickness uniformity in large-area thin film [J]. Applied Optics, 2000, 39(10):1602-1610.
- [12] John Arkwright, Ian Underhill, Nathan Pereira, et al. Deterministic control of thin film thickness in physical vapor deposition systems using a multiaperture mask [J]. Optics Express, 2005, 13(7):2731-2741.
- [13] 方明,郑伟军,吴明,等. 平行行星夹具均匀性修正挡板设计方法研究 [J]. 真空科学与技术学报,2006,26(4):286-289.
- [14] 秦洁玉,罗崇泰,马勉军. 线性渐变滤光片镀膜挡板设计 [J]. 真空与低温,2007,13(1):57-62.
- [15] 潘栋梁,熊胜明,张云洞,等. 行星夹具膜厚均匀性计算 [J]. 强激光与粒子束,2000,12(3):277-280.
- [16] 于贺,王涛,吴志明,等. 公-自转磁控溅射镀膜系统薄膜沉积均匀性的研究 [J]. 真空科学与技术学报,2010,30(2):149-153.

论文参考文献标注和著录格式

为了使本刊编排格式更加规范化,以便于《中国学术期刊(光盘版)》及《中国学术期刊综合评价数据库来源期刊》的收录,更广泛地进行国内外学术交流,本刊要求著录参考文献一律采用我国科学技术书刊中所普遍使用的“顺序编码制”,请作者在来稿前认真、仔细核实参考文献的准确性和完整性,现将标注和著录要点简述如下:

一、正文中标注格式:采用顺序编码制时,对文中所引用的文献须按它们出现的先后顺序依次连续排序,并将序号置于方括号内,标注于上角或作为语句的组成部分。

二、文后参考文献表的著录格式:文后参考文献著录格式执行 GB/T7714-2005《文后参考文献著录规则》,文后参考文献表中各条文献应按在论著中引用文献序号顺序排列,文献中项目一定要完整,内容一定要准确。应根据不同的文献类型分别加以著录。各类文献的著录项及顺序要求为:

(1) 专著:著者(多名著者时,只著录前三名著者姓名,并在其后加“等”或与之相应的词)。书名 [M]。版本。出版地:出版者,出版年:起止页码。

(2) 期刊:作者(多名著者时,只著录前三名著者姓名,并在其后加“等”或与之相应的词)。题名 [J]。刊名,出版年,卷(期):起止页码。

(3) 会议论文:作者(多名著者时,只著录前三名著者姓名,并在其后加“等”或与之相应的词)。会议名 [C]。出版地:出版者,出版年。

(4) 学位论文:作者,论文题名 [D]。保存地址:保存单位,产生年份。

(5) 专利:申请者或所有者。专利题名:国别,专利号 [P]。公告或公开日期。

(6) 技术标准:制定标准的机构。标准代号。标准名称 [S]。出版地:出版者,发布年份。

(7) 科技报告:作者。文题,报告代码及编号 [R]。地名:责任单位,发布年份。

(8) 报纸析出文章:作者。文题 [N]。报纸名,出版日期(版次)。

(9) 电子文献:作者。题名 [EB/OL]。出版地:出版者,出版年 [引用日期]。http://……

(本刊编辑部)