

RELATÓRIO FINAL

SIMULAÇÃO DA DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS ATRAVÉS DO PROGRAMA SIMTRA.¹

Julio César Sagás², Júlia Karnopp³.

Palavras-chave: Filmes. Simulação. SIMTRA.

Deposições de filmes de titânio, alumínio, gadolínio e cobre por pulverização catódica foram simuladas com o programa SiMTra, variando a pressão e a distância tela-alvo. A pressão interfere na taxa de deposição, na energia e no ângulo de incidência. A presença da tela aumenta a energia média dos átomos depositados.

1. Introdução

Uma das maneiras mais usuais de se modificar as propriedades superficiais de um material é revesti-lo com um filme fino. A deposição de filmes possui aplicações em áreas tecnológicas e científicas como na microeletrônica, ótica, metalurgia e também pode ser usada para fins decorativos. Existem vários processos de deposição de filmes finos, entre eles se destaca a deposição por pulverização catódica (*magnetron sputtering*) que consiste basicamente na deposição de átomos ejetados por bombardeamento iônico da superfície de um alvo. Os íons que atingem o alvo são gerados em um plasma magneticamente confinado em frente ao mesmo.

No *sputtering* convencional o alvo é colocado no cátodo do sistema e o substrato, superfície em que o filme será depositado, pode ou não constituir o ânodo (Fig. 1a). Dentro do reator é colocado um gás inerte, geralmente argônio. Quando se aplica uma tensão entre os eletrodos do sistema é gerada uma descarga elétrica que produz íons positivos desse gás. Os íons são acelerados em direção ao alvo e colidem nele gerando um processo de colisões em cascata na superfície desse sólido (Thompson, 2002), o que faz com que átomos desse alvo possam ser ejetados. Os átomos ejetados são transportados na fase de vapor e quando encontram uma superfície, condensam e formam o filme, ocorrendo deposição em todas as superfícies do reator, mas principalmente no substrato.

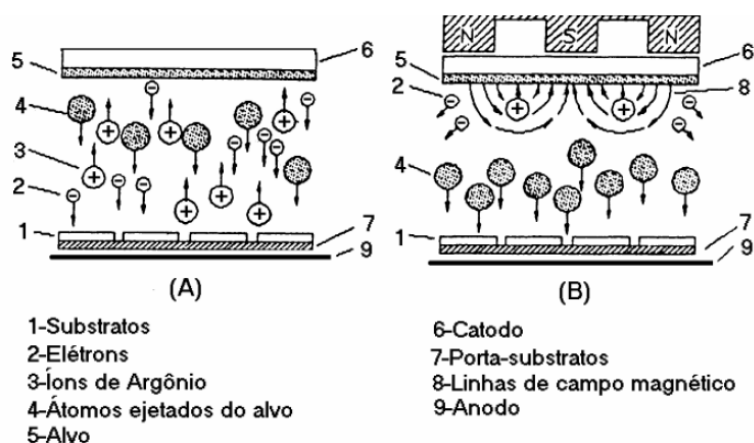


Figura 1: Sistema do *sputtering* convencional (A) e do *magnetron sputtering* (B). (Fontana, 1997)

¹ Vinculado ao Projeto de Pesquisa Correlação entre o fluxo de energia e a estrutura de filmes de Gd depositados pela técnica de pulverização catódica pulsada de alta potência desenvolvido no Centro de Ciências Tecnológicas /UDESC.

² Orientador, Professor do Departamento de Física do Centro de Ciências Tecnológicas – julio.sagas@udesc.com.

³ Acadêmico (a) do Curso de Licenciatura em Física – Centro de Ciências Tecnológicas - UDESC, bolsista de iniciação científica PIVIC/UDESC.

RELATÓRIO FINAL

O *magnetron sputtering* é muito semelhante ao *sputtering* convencional. A diferença é a presença de um campo magnético não-homogêneo em frente ao cátodo (Fig. 1b). Isso aprisiona os elétrons secundários (elétrons arrancados do alvo devido a colisão dos íons) próximos ao alvo, aumentando a taxa de ionização do plasma e aumentando consequentemente o número de átomos ejetados. Entre as variações do sistema *magnetron sputtering*, destaca-se o sistema *triodo magnetron sputtering* (Fontana, 1997), em que uma tela aterrada é inserida entre o alvo e o substrato (Fig. 2). A tela atua como ânodo e o plasma fica confinado entre o alvo e a tela.

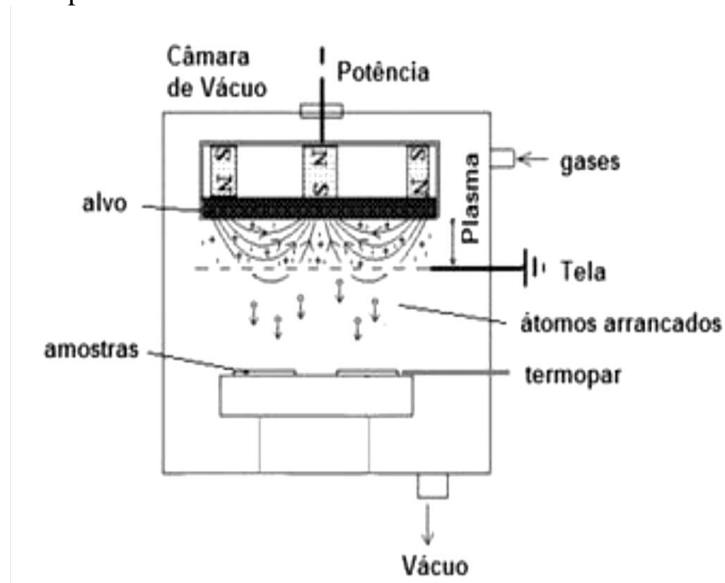


Figura 2: Sistema Triodo Magnetron Sputtering do Laboratório de plasma da UDESC de Joinville. (Dianclen, 2013)

As propriedades do filme formado dependem da condição de deposição, podendo ser alteradas de acordo com a aplicação de interesse. Utilizando um programa de simulação pretende-se estudar mais detalhadamente esse processo, de modo a compreender melhor o processo de deposição. Para isso, é preciso obter o perfil de deposição, a energia e o ângulo de incidência dos átomos que estão sendo depositados e analisar a variação desses dados em relação a presença da tela no processo e em função da pressão e da distância entre a tela e o alvo.

O programa utilizado para as simulações é o SiMTra (Simulation of Metal Transport) disponibilizado gratuitamente pelo grupo DRAFT da Universidade de Ghent na Bélgica (VAN AEKEN et al., 2008; DEPLA e LEROY, 2012). Ele utiliza o método de Monte Carlo para descrever o transporte dos átomos ejetados do alvo durante a fase de vapor. O método de Monte Carlo possibilita estudar um grande número de partículas. Ele precisa das propriedades iniciais dos átomos quando eles deixam o alvo (MAHIEU et al., 2006) e a partir daí descreve o seu transporte na fase vapor. Para isto, o SiMTra calcula o livre caminho médio e as colisões durante o transporte, obtendo então a energia e o cosseno do ângulo de incidência dos átomos quando estes encontram uma superfície e o número de átomos que se depositam em cada superfície interna do reator.

2. Método

É preciso fornecer alguns dados iniciais para o SimTra, como temperatura, pressão, gás e metal utilizado, número de átomos ejetados cujas trajetórias serão seguidas, as distribuições angular e de energia dos átomos ejetados, o perfil da zona de erosão do alvo e a geometria do reator. O perfil da zona de erosão (Fig. 3) é necessário pois a erosão do alvo não é uniforme e a partir do perfil sabe-se os locais em que é mais provável que um átomo seja ejetado. As distribuições angular e de energia fornecem os valores mais prováveis de energia e a direção com que os átomos saem do alvo. E a geometria do reator consiste em desenhar todas as peças que fazem parte do reator.

RELATÓRIO FINAL

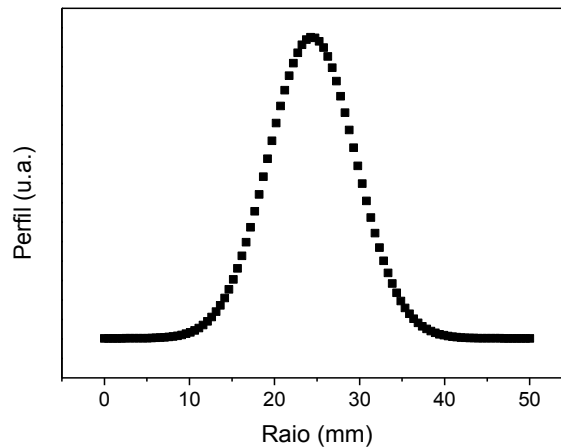


Figura 3: Perfil da zona de erosão do alvo.

O SRIM (*The Stopping and Range of Ions in Solids*), utilizado para calcular as distribuições angular e de energia, é um conjunto de programas que utiliza o método de Monte Carlo para analisar as interações entre os íons energéticos do gás e um alvo amorfo. É utilizado no estudo de implantação de íons e *sputtering*. O programa precisa como dados iniciais a energia e o ângulo de incidência dos íons no alvo e características desse alvo, sua composição e espessura. A energia utilizada foi 0,47 keV (correspondente a tensão aplicada ao catodo), gás argônio e o ângulo de incidência igual a zero, ou seja, os íons colidem perpendicularmente a superfície. Foram feitas simulações para alvos de titânio, cobre, gadolínio e alumínio. A figura 4 traz a distribuição angular para esses elementos, onde este ângulo com que os átomos são ejetados é medido em relação à normal a superfície do alvo. Nota-se que o alumínio apresentou uma distribuição angular bastante diferente das demais.

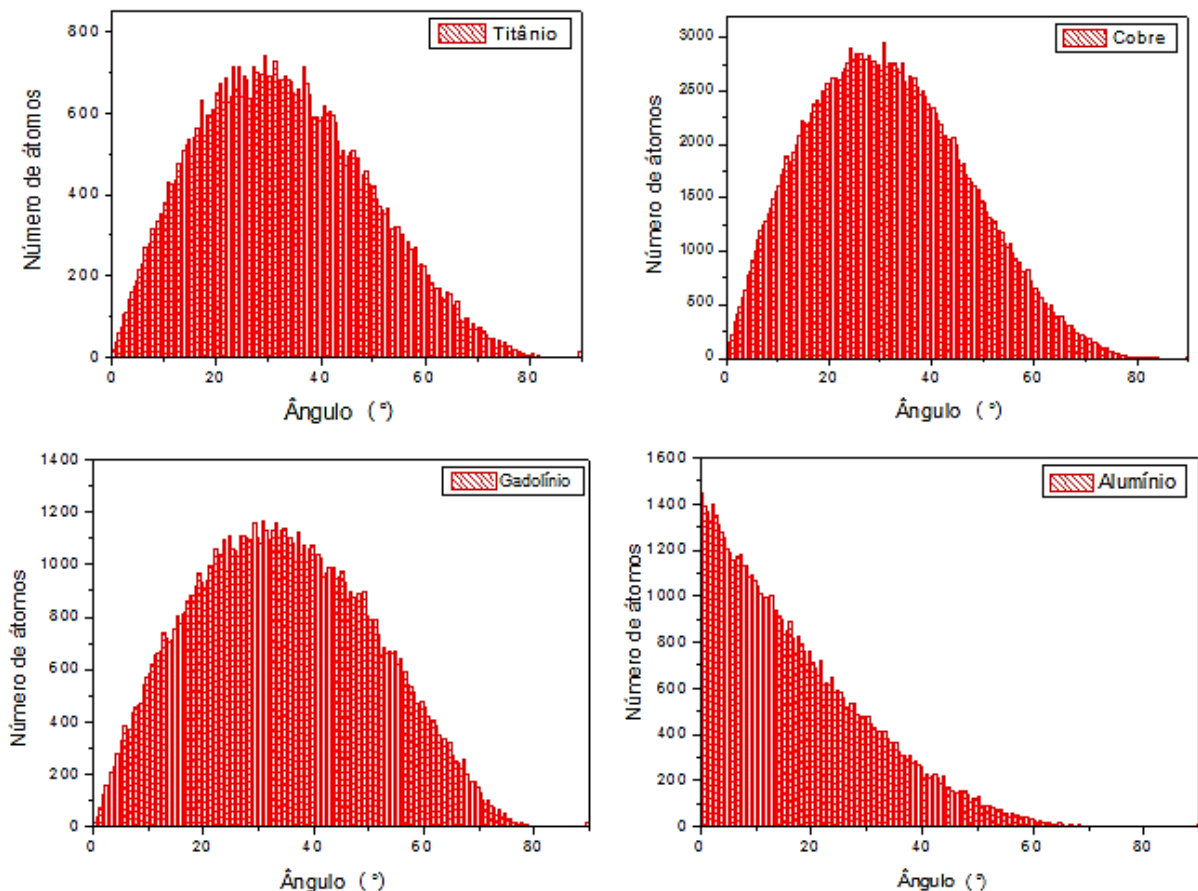


Figura 4: Distribuição angular para átomos de titânio, cobre, gadolínio e alumínio, sendo que o ângulo é medido em relação à normal a superfície do alvo.

RELATÓRIO FINAL

A figura 5 traz a distribuição de energia calculada pelo SRIM para os alvos de alumínio e cobre. Todos os elementos utilizados como alvo apresentaram distribuições muito semelhantes.

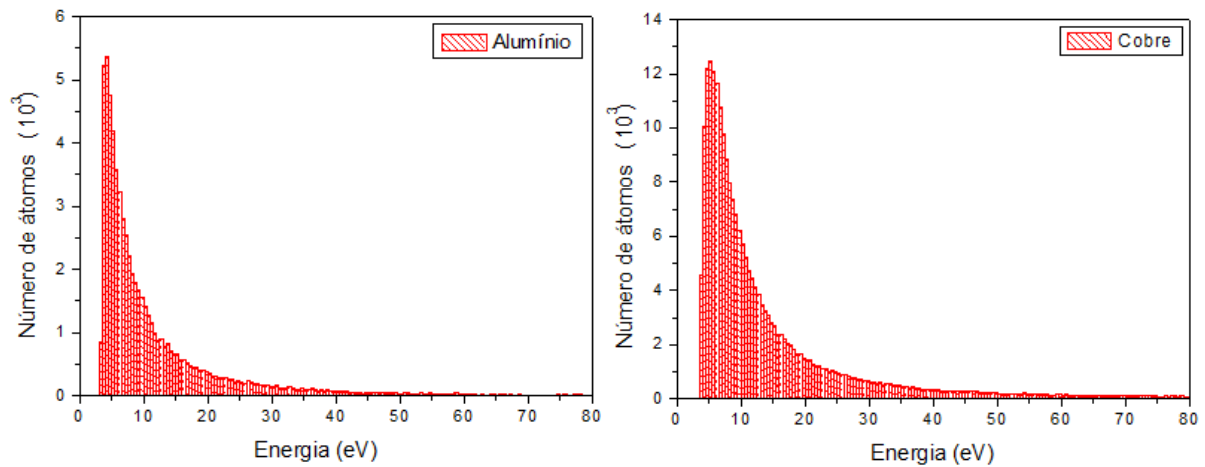


Figura 5: Distribuição de energia calculada pelo SRIM para alvos de alumínio e cobre.

Para realizar as simulações foi desenhado o reator utilizado no Laboratório de Plasmas, Filmes e Superfícies do CCT/UDESC (Fig. 6 e 7), utilizado gás argônio e temperatura de 300 K em todas as simulações. O perfil da zona de erosão de um alvo utilizado no laboratório foi obtido utilizando um microscópio confocal localizado no Laboratório de Filmes Finos do CCT/UDESC (Fig. 3).

Com as simulações do SiMTrá foram analisados o perfil de deposição, a energia média e o ângulo de incidência dos átomos no substrato pois eles interferem nas propriedades do filme. Foram realizadas simulações para 10^7 átomos, com uma pressão de 0,4 Pa, para alvos de titânio (Ti), alumínio (Al), cobre (Cu) e gadolínio (Gd), primeiramente sem a tela e depois variando a distância desta até o alvo entre 10 e 40 mm. Posteriormente, a pressão foi variada entre 0,0 e 1,0 Pa, para 10^6 átomos ejetados de um alvo de titânio, sem e com tela a uma distância de 20 mm do alvo. Para analisar melhor a energia média com que os átomos se depositam foram feitas simulações para alumínio, titânio e gadolínio com valores maiores de pressão, até 10,0 Pa. Nestas simulações foi considerado como substrato uma superfície com 100 mm de diâmetro no lugar do porta amostras (Fig. 6).

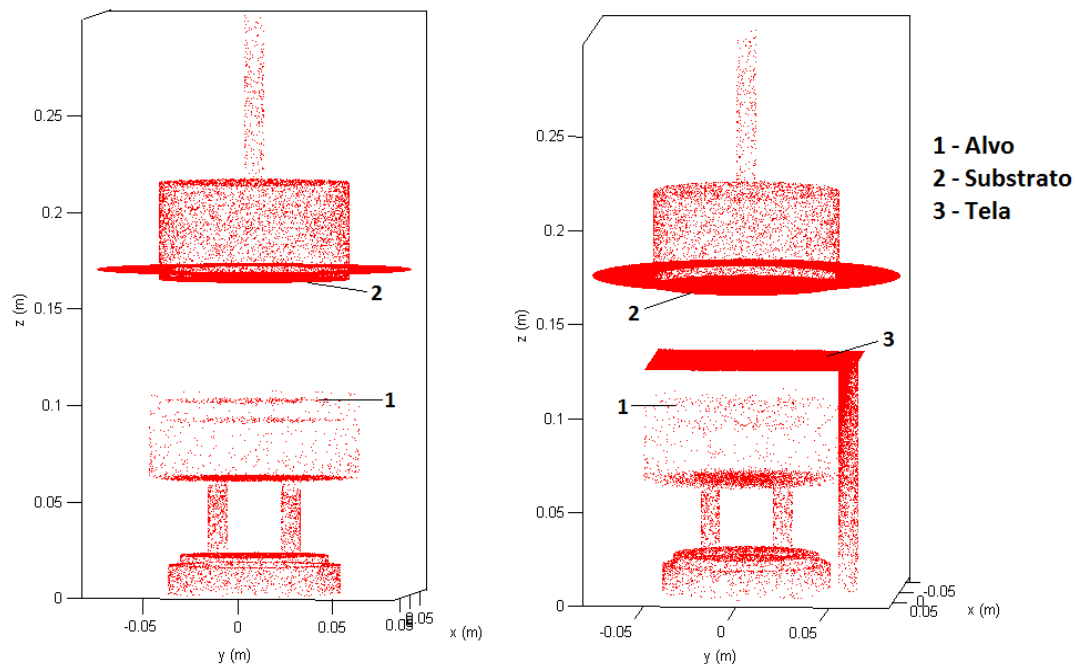


Figura 6: Geometria do reator para as simulações sem e com a tela, assim como com o substrato de 100 mm de diâmetro.

RELATÓRIO FINAL

Também para análise da energia média, foram feitas simulações utilizando além da tela uma máscara na frente do porta amostras. Nestas, foram analisados os dados obtidos para uma amostra de 19 mm de diâmetro (Fig. 7), tamanho usual de amostras usadas no laboratório.

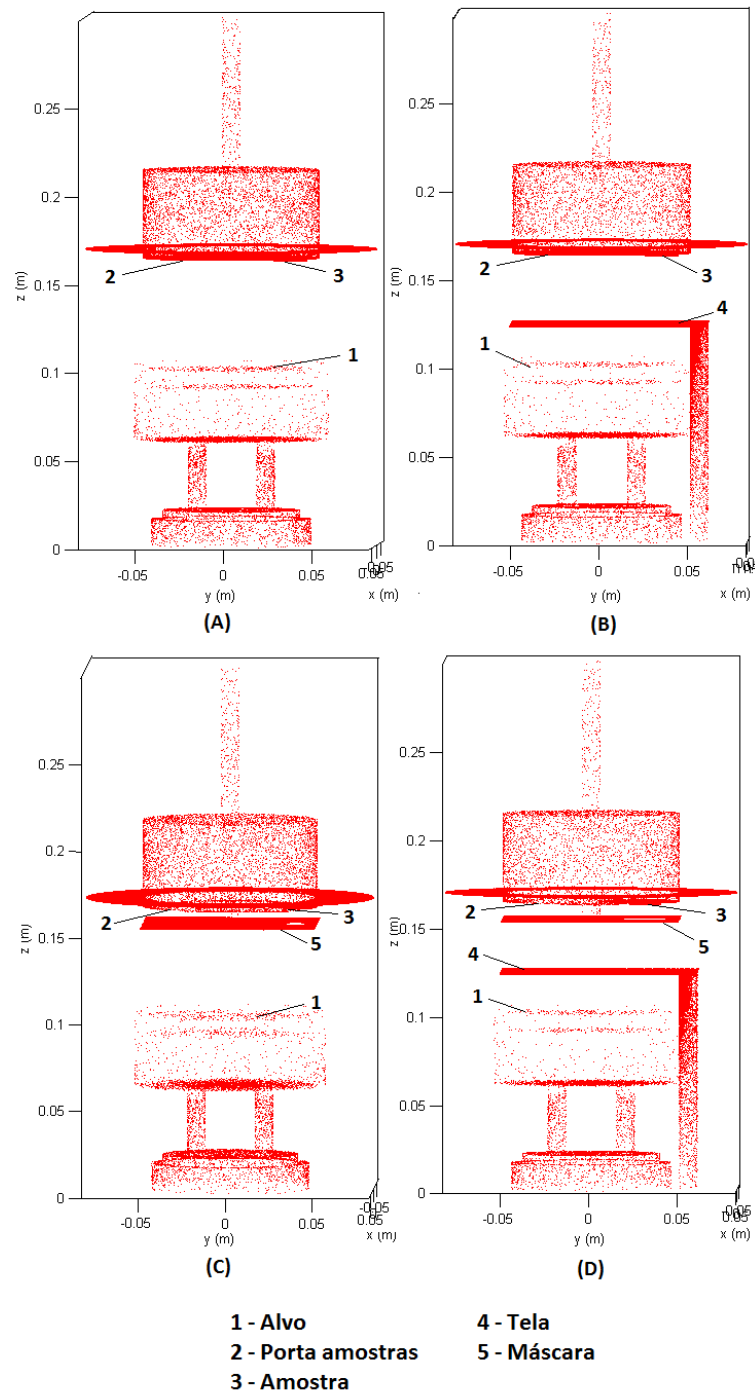


Figura 7: Geometria do reator para as simulações com a amostra de 19 mm (A) apenas com a tela (B), com a máscara (C) e com a máscara e a tela (D).

3. Resultados e Discussão:

A partir dos dados obtidos das simulações foi possível analisar o número de átomos depositados no substrato e o perfil de deposição. Com o aumento da pressão, o número de átomos depositados diminui (Fig. 8). Isto acontece porque aumenta o número de colisões entre os átomos ejetados e os átomos do gás, essas colisões desviam os átomos de suas trajetórias e estes se depositam

RELATÓRIO FINAL

em outras superfícies do reator. A tela também diminui este valor (Fig. 8), pois parte dos átomos passam a se depositar na tela e não mais no substrato. Mas, a distância tela-alvo não interfere nessa quantidade (Fig. 9).

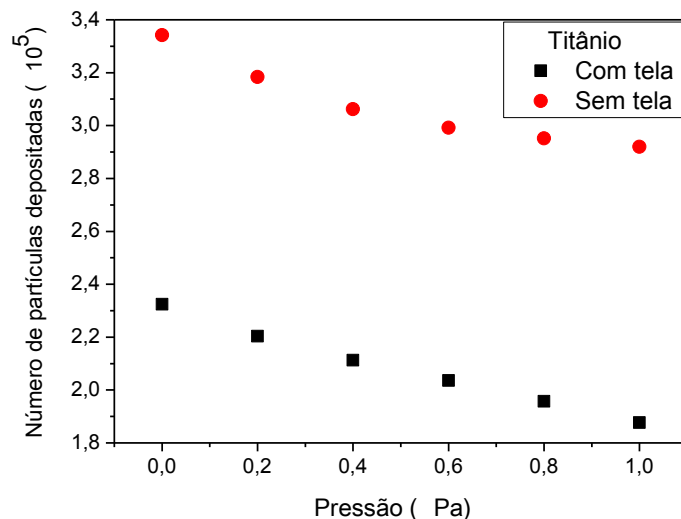


Figura 8: Número de átomos depositados em função da pressão para um alvo de titânio com e sem a tela.

O perfil de deposição é diferente para cada metal utilizado como alvo. A figura 9 traz esse perfil para os alvos de alumínio e gadolínio, sendo que o comportamento do gadolínio é muito semelhante ao do titânio e do cobre, como mostra a figura 10 que traz uma simulação da deposição no substrato. Essa diferença no perfil está relacionada a distribuição angular dos átomos (Fig. 4). A maioria dos átomos de alumínio saem do alvo com trajetórias perpendiculares a ele e como para baixas pressões esses átomos não sofrem grandes desvios em suas trajetórias a deposição é maior nas regiões do substrato perpendiculares a zona de erosão do alvo, onde a taxa de *sputtering* é maior. Já para os outros metais, os átomos possuem ângulos iniciais maiores e a deposição é maior no centro do substrato.

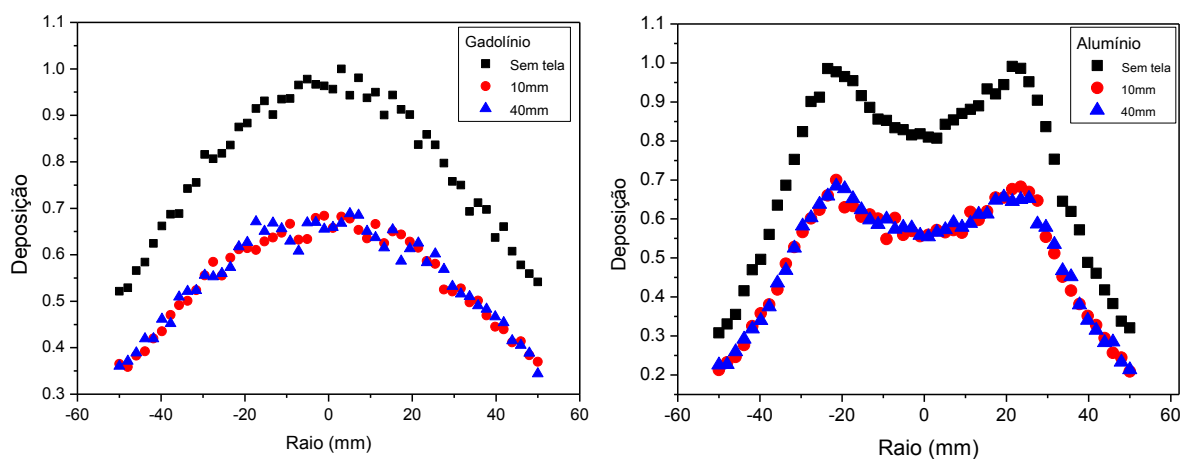


Figura 9: Perfil de deposição para um alvo de gadolínio (a) e alumínio (b) sem a tela e com a tela a 10 e 40 mm do alvo a uma pressão de 0,4 Pa.

RELATÓRIO FINAL

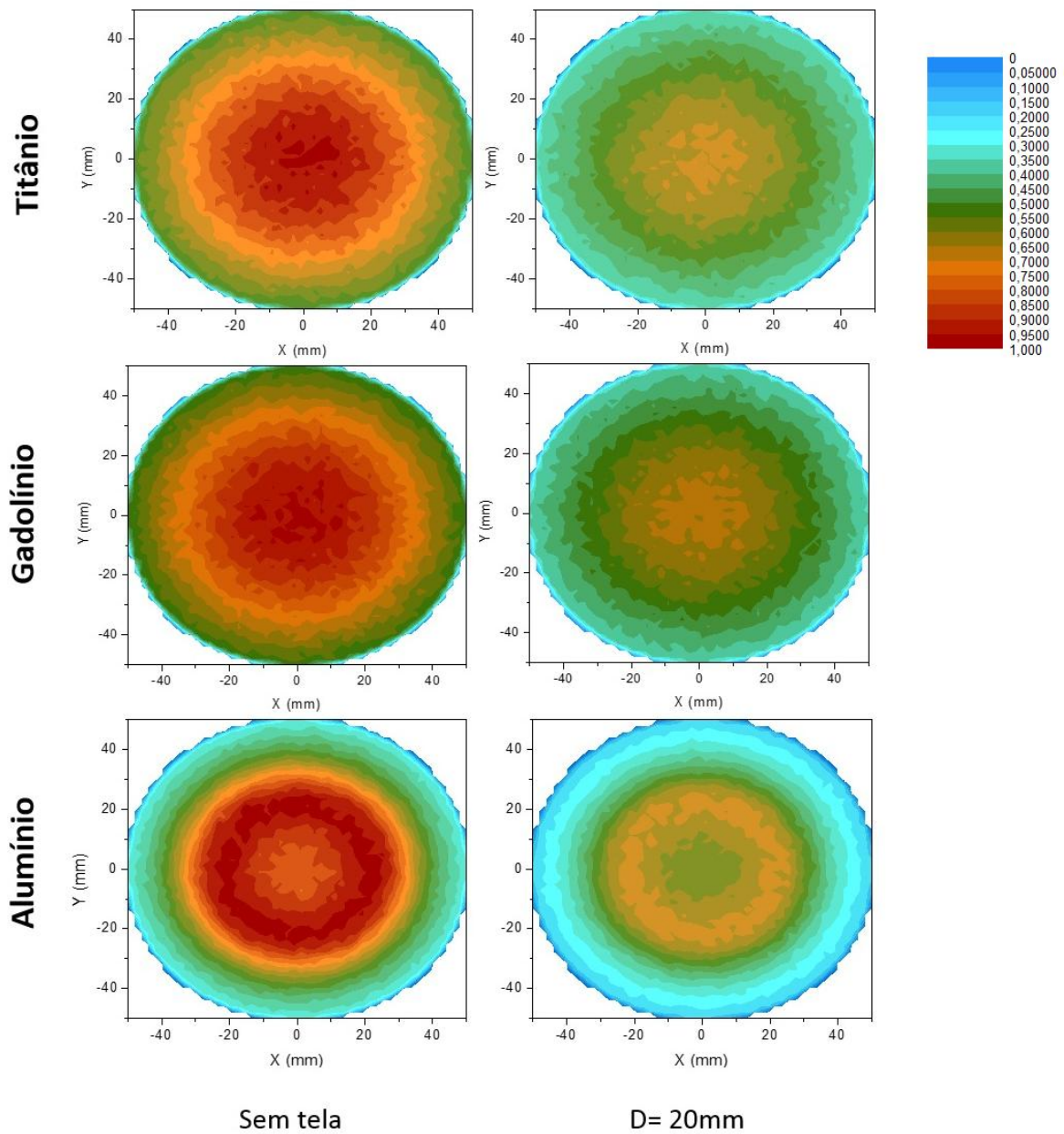


Figura 10: Deposição no substrato para alvos de titânio, gadolínio e alumínio sem a tela e com ela a uma distância de 20 mm do alvo a uma pressão de 0,4 Pa.

Também foi analisado o ângulo de incidência das partículas que se depositam no substrato. Este ângulo é o ângulo em relação à normal. O valor médio do ângulo de incidência aumenta com o aumento da pressão devido aos desvios nas trajetórias dos átomos causados pelas colisões (Fig. 11). E a presença da tela não interfere no ângulo de incidência (Fig. 12). O mesmo comportamento é observado para os outros metais usados como alvo, no entanto, esses valores variam para cada elemento, pois dependem das características de cada um.

RELATÓRIO FINAL

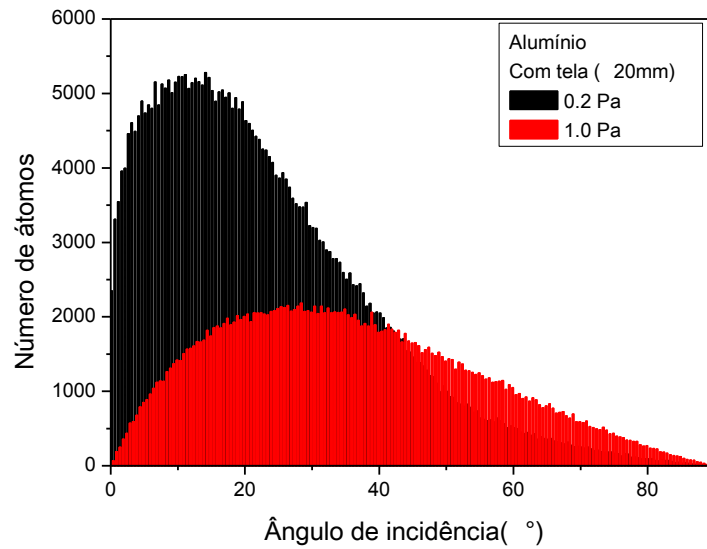


Figura 11: Distribuição do ângulo de incidência para as pressões de 0,2 e 1,0 Pa com a presença da tela a 20 mm do alvo.

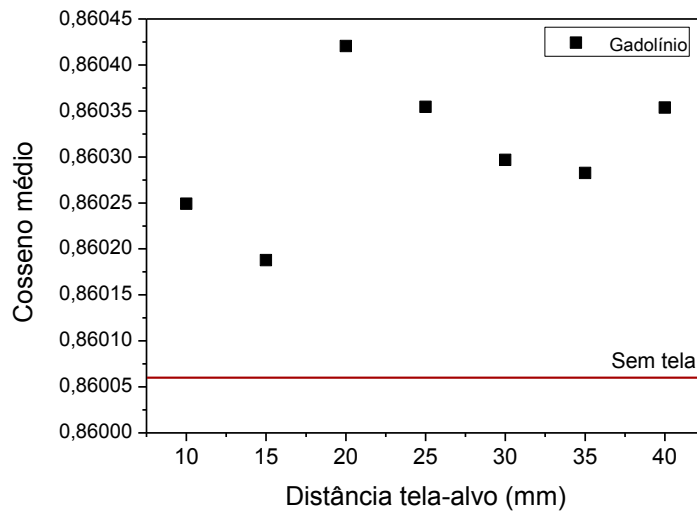


Figura 12: Cosseno do ângulo de incidência em função da distância tela-alvo para o gadolínio a uma pressão de 0,4 Pa.

O aumento do ângulo médio com que os átomos atingem o substrato (Fig. 11), devido o aumento da pressão, altera o perfil de deposição do alumínio (Fig. 13). Com o aumento no número de colisões os átomos sofrem mais desvios durante a fase de vapor, não possuindo mais trajetórias perpendiculares ao substrato quando se depositam. E a deposição passa a ser maior no centro do substrato.

RELATÓRIO FINAL

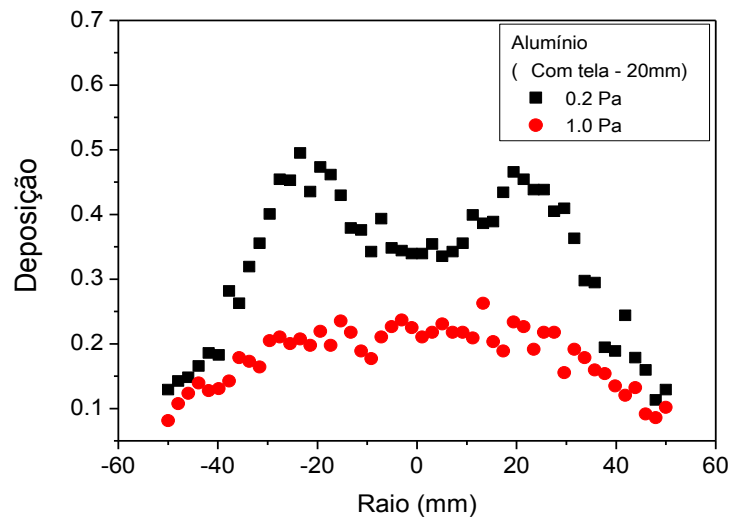


Figura 13: Perfil de deposição para o alumínio com tela para 0,2 e 1,0 Pa.

A energia com que os átomos são depositados também foi analisada com as simulações. A energia média diminui com o aumento da pressão (Fig. 14). Isto acontece pois aumenta o número de colisões durante o transporte dos átomos e como nas colisões os átomos perdem energia, a energia média deles é menor quando eles encontram a superfície.

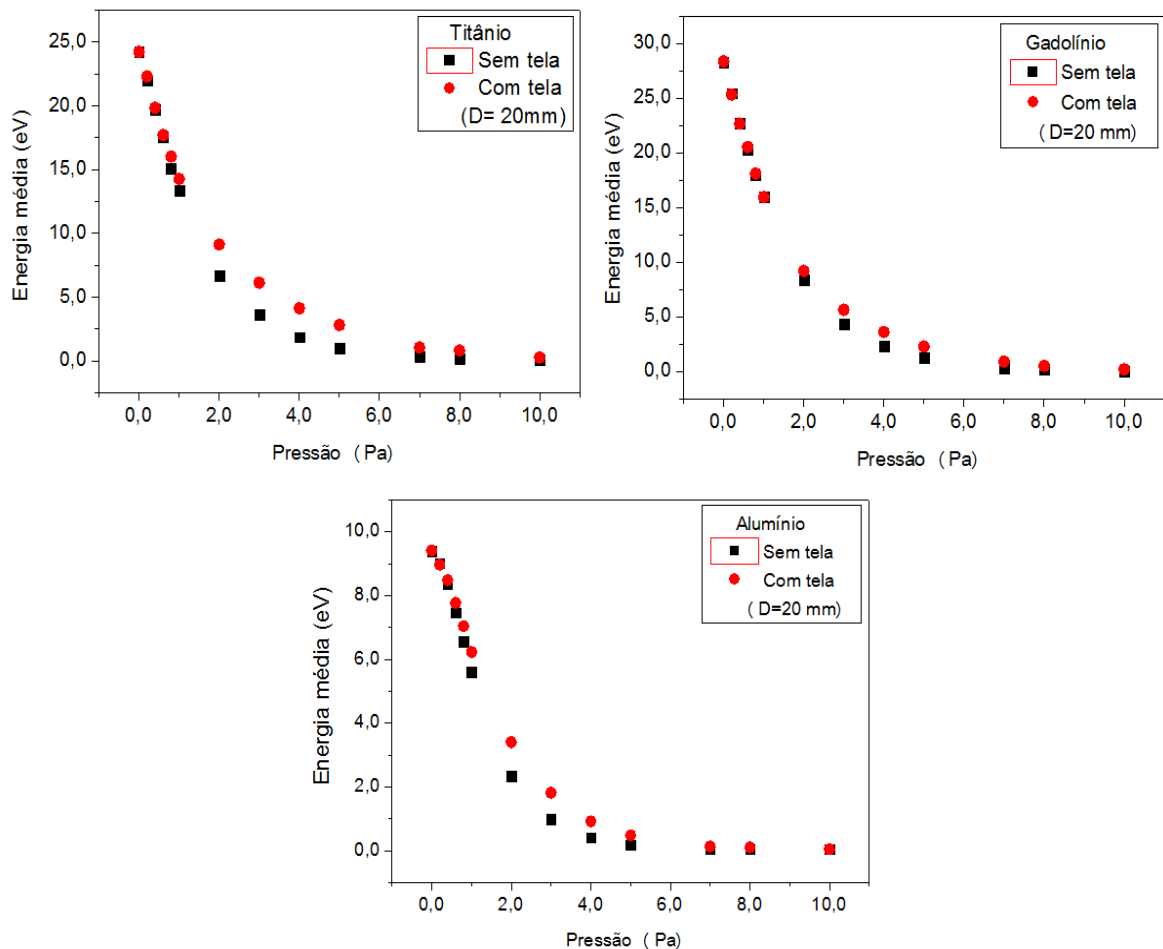


Figura 14: Energia média com que os átomos atingem o substrato em função da pressão sem e com a tela a 20 mm do alvo para alvos de titânio, gadolínio e alumínio.

RELATÓRIO FINAL

Foi possível observar que a presença da tela influencia na energia com que os átomos atingem o substrato. A energia média é maior com a presença da tela entre cerca de 1,0 e 8,0 Pa. O mesmo foi observado com as simulações em que foi incluída uma máscara na frente do porta amostras (Fig. 15), a energia dos átomos que se depositam na amostra é maior com a presença dela. Com essas simulações notou-se que quando são colocadas peças entre o alvo e o substrato a energia média aumenta.

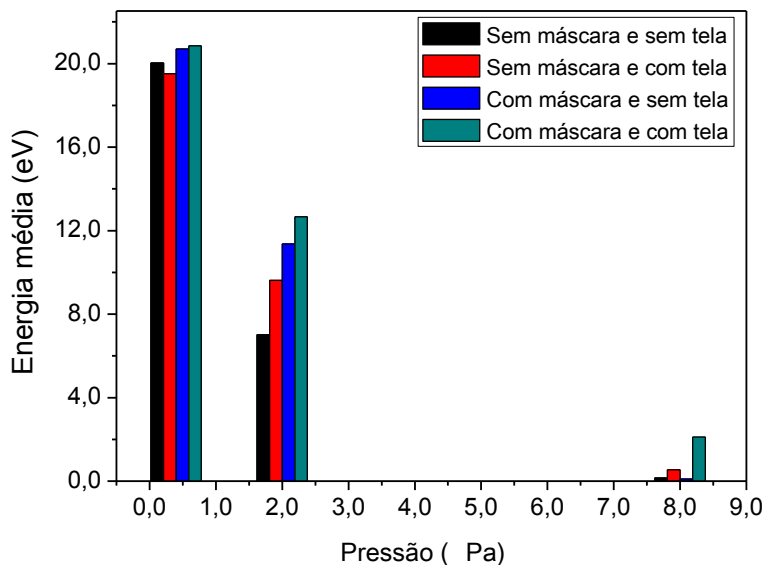


Figura 15: Energia média com que os átomos de titânio se depositam na amostra para as pressões de 0,4, 2,0 e 8,0 Pa.

A figura 16 mostra a distribuição de energia com que os átomos de titânio se depositam na amostra para uma pressão de 2,0 Pa. Parte dos átomos ejetados do alvo se depositam na superfície mais próxima do mesmo. Como a população de baixa energia é maior, é mais provável que um átomo de baixa energia se deposite na tela (ou na máscara) do que um átomo de alta energia. Como consequência, isto reduz a população de baixa energia que chega na amostra, aumentando a energia média. Assim, quando acrescentadas a tela e a máscara, grande parte dos átomos com baixas energias se depositam na tela e na máscara, aumentando a energia média com que as partículas se depositam na amostra. Logo, os átomos que colidem na amostra possuem energia média maior do que os que colidem na tela e na máscara. Quanto mais superfícies existirem entre o alvo e a amostra, maior é a energia média com que os átomos se depositam na amostra.

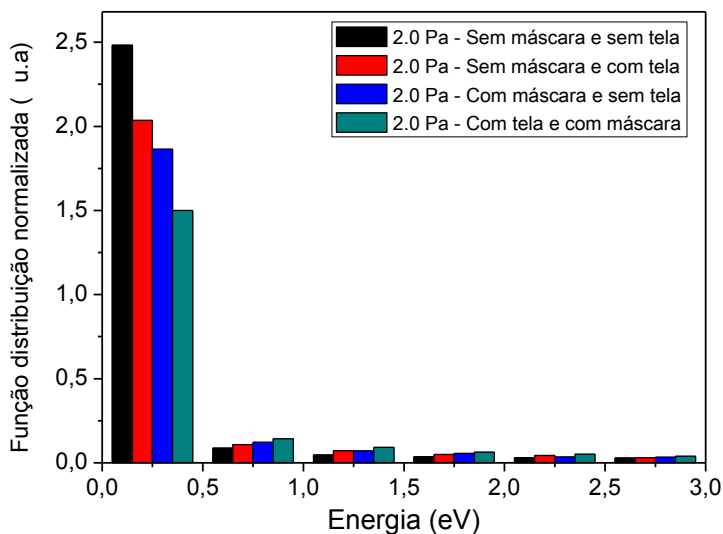


Figura 16: Distribuição de energia com que os átomos se depositam na amostra a uma pressão de 2,0 Pa.

RELATÓRIO FINAL

Para baixas pressões, menores que 1,0 Pa, a diferença na energia média é menor (Fig. 14). Mais átomos depositam-se na amostra, pois diminui a deposição nas outras superfícies do reator devido ao pequeno número de colisões e isso aumenta a população de baixa energia que chega na amostra. Também, aumenta a probabilidade de átomos de alta energia se depositarem na tela e na máscara (devido a forma da função distribuição, como pode ser visto na figura 17), o que diminui a população de alta energia que colide na amostra. Para altas pressões, os átomos já estão termalizados (Fig. 18) quando se depositam, por isso acima de 8,0 Pa não existe mais diferença apreciável na energia média (Fig. 14).

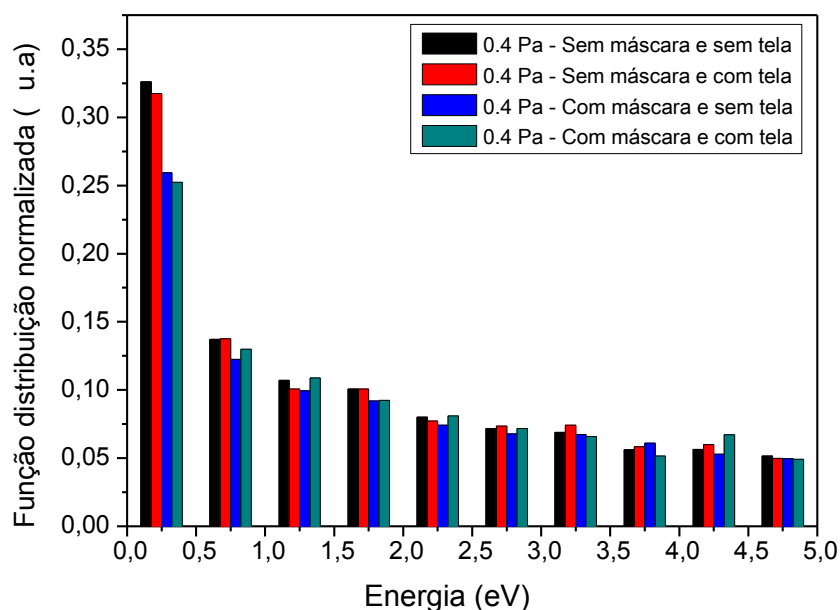


Figura 17: Distribuição de energia com que os átomos se depositam na amostra a uma pressão de 0,4 Pa.

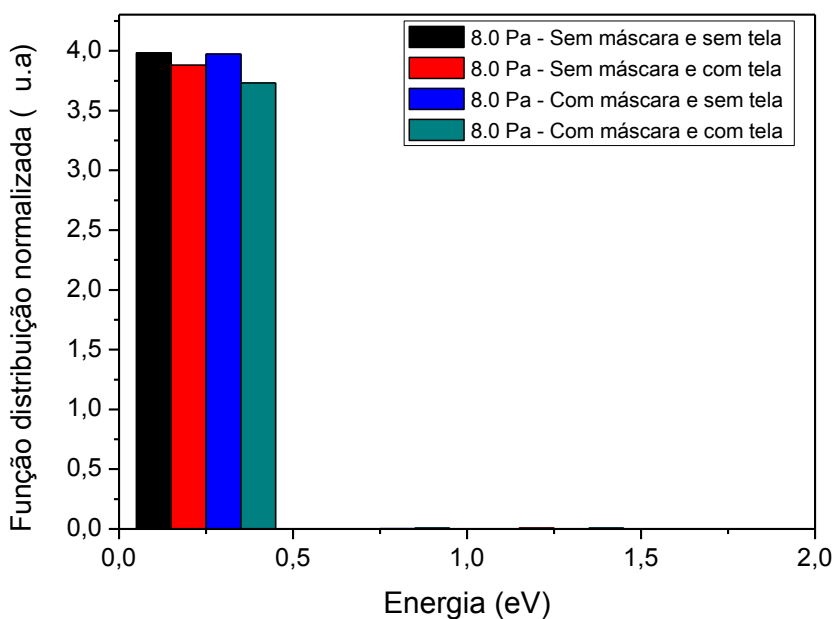


Figura 18: Distribuição de energia com que os átomos se depositam na amostra a uma pressão de 8,0 Pa.

RELATÓRIO FINAL

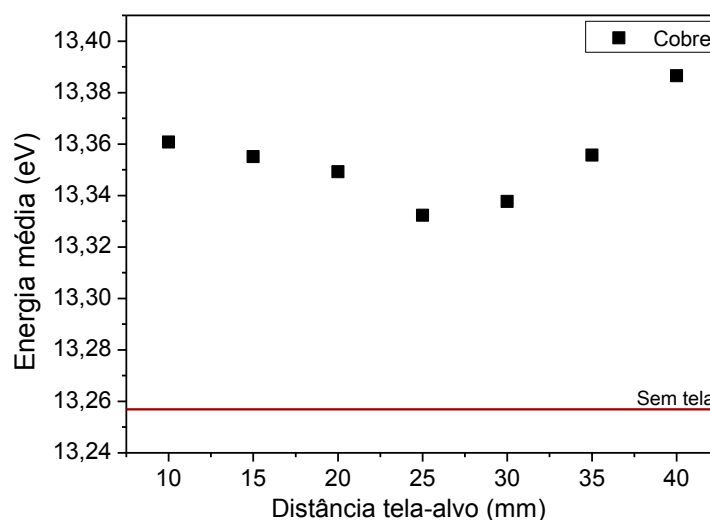


Figura 19: Energia média em função da distância tela-alvo para o cobre a uma pressão de 0,4 Pa.

Contudo a distância tela-alvo não interfere no efeito que a tela causa, o valor da energia média é praticamente o mesmo para todas as distâncias (Fig. 19).

4. Conclusão

As simulações possibilitaram analisar o processo de deposição de filmes finos por *magnetron sputtering*. Foi observado que a pressão interfere no número de átomos depositados, na energia e no ângulo com que essas partículas atingem o substrato. A tela diminui a deposição nas outras superfícies do reator, mas não altera o ângulo de incidência. As simulações que incluíam a tela e a máscara mostraram que a presença de superfícies entre o substrato e o alvo interfere na energia média com que os átomos chegam no substrato, à medida que são acrescentadas essas superfícies a energia média aumenta. As simulações variando a distância tela-alvo mostraram que o efeito da tela sobre a deposição e a energia é o mesmo independente da distância tela-alvo.

Referências bibliográficas

- DEPLA, D.; LEROY, W.P. Magnetron sputter deposition as visualized by Monte Carlo modeling. **Thin Solid Films**, v. 520, p.6337-6354, ago. 2012.
- FONTANA, Luís César. **Estudo da Deposição de Filmes de Ti E TiN e Desenvolvimento do Sistema Modificado Triodo-Magnetron-Sputtering**. 121 f. - Curso de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 1997.
- MAHIEU, S. et al. Monte Carlo simulation of the transport of atoms in DC magnetron sputtering. **Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms**, v. 243, p.313-319, 2006.
- THOMPSON, M.W. Atomic collision cascades in solids. **Vacuum**, v. 66, n. 2, p. 99-114, 2002.
- VAN AEKEN, K; MAHIEU, S; DEPLA, D. The metal flux from a rotating cylindrical magnetron: a Monte Carlo simulation. **Journal Of Physics D: Applied Physics**, v. 41, out. 2008.
- ZIEGLER, James F. **SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter)**. Disponível em: <<http://www.srim.org/>>