

A deposição de filmes por *magnetron sputtering* consiste na remoção de átomos de um alvo por bombardeamento iônico, sendo os íons gerados em um plasma magneticamente confinado em frente ao alvo. Os átomos removidos se depositam nas superfícies internas. Na presença de um gás reativo, ocorrem reações químicas no filme e na superfície do alvo, formando um filme composto e dando origem à histerese nas curvas do processo.

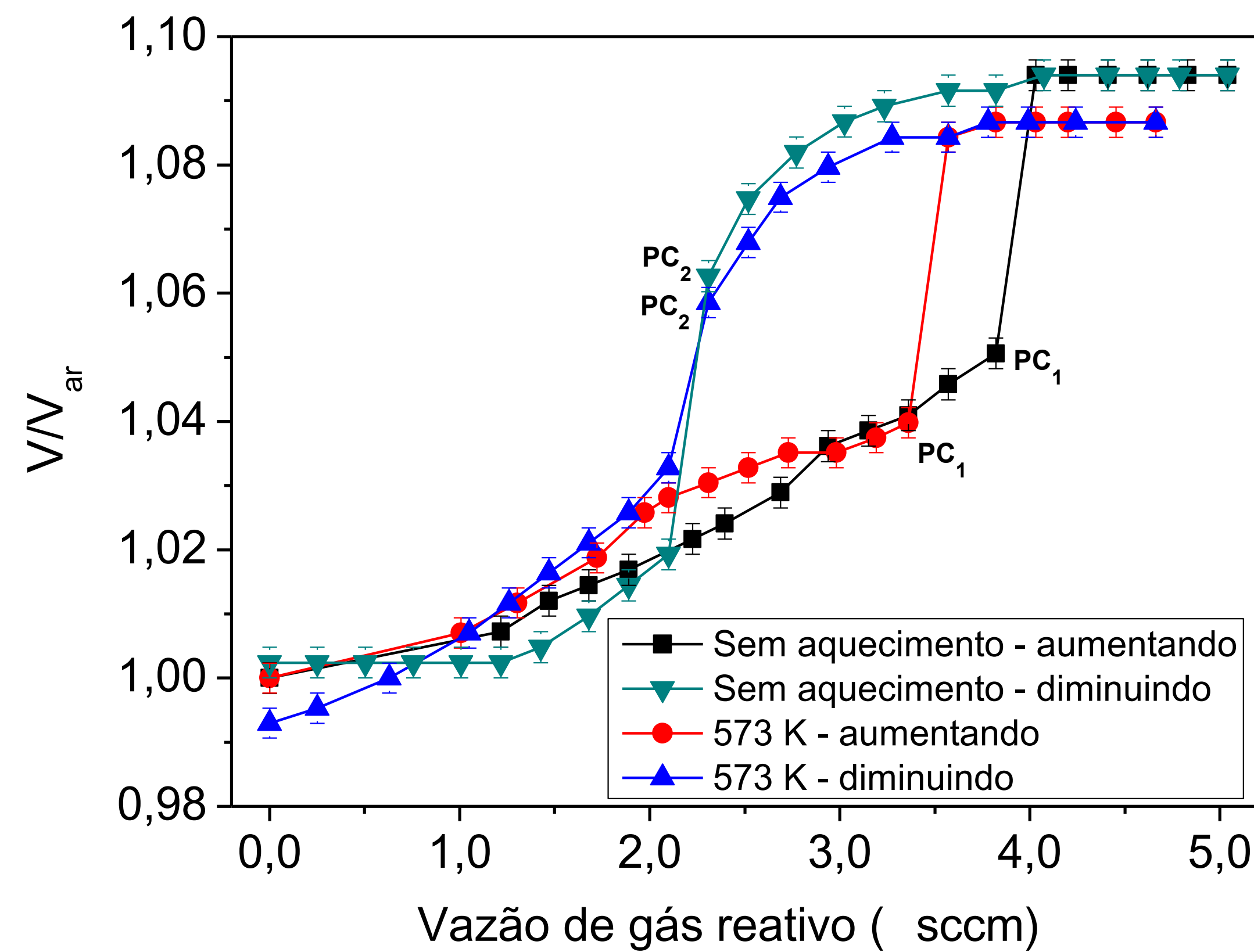


Figura 1: Curvas de histerese da tensão da descarga obtidas experimentalmente onde PC1 e PC2 correspondem ao primeiro e segundo pontos críticos respectivamente.

As curvas experimentais (Fig. 1) foram obtidas com alvo de titânio (99,5%) em uma atmosfera de argônio (0,40 Pa) e nitrogênio e operando com corrente constante de 1,0 A.

O processo de deposição pode ser simulado qualitativamente pelo modelo de Berg [1]. A formação do composto ocorre através da adsorção do gás reativo. Esta taxa é dependente do coeficiente de fixação, que é função da temperatura. Contudo, o modelo de Berg não considera a dependência com a temperatura do substrato.

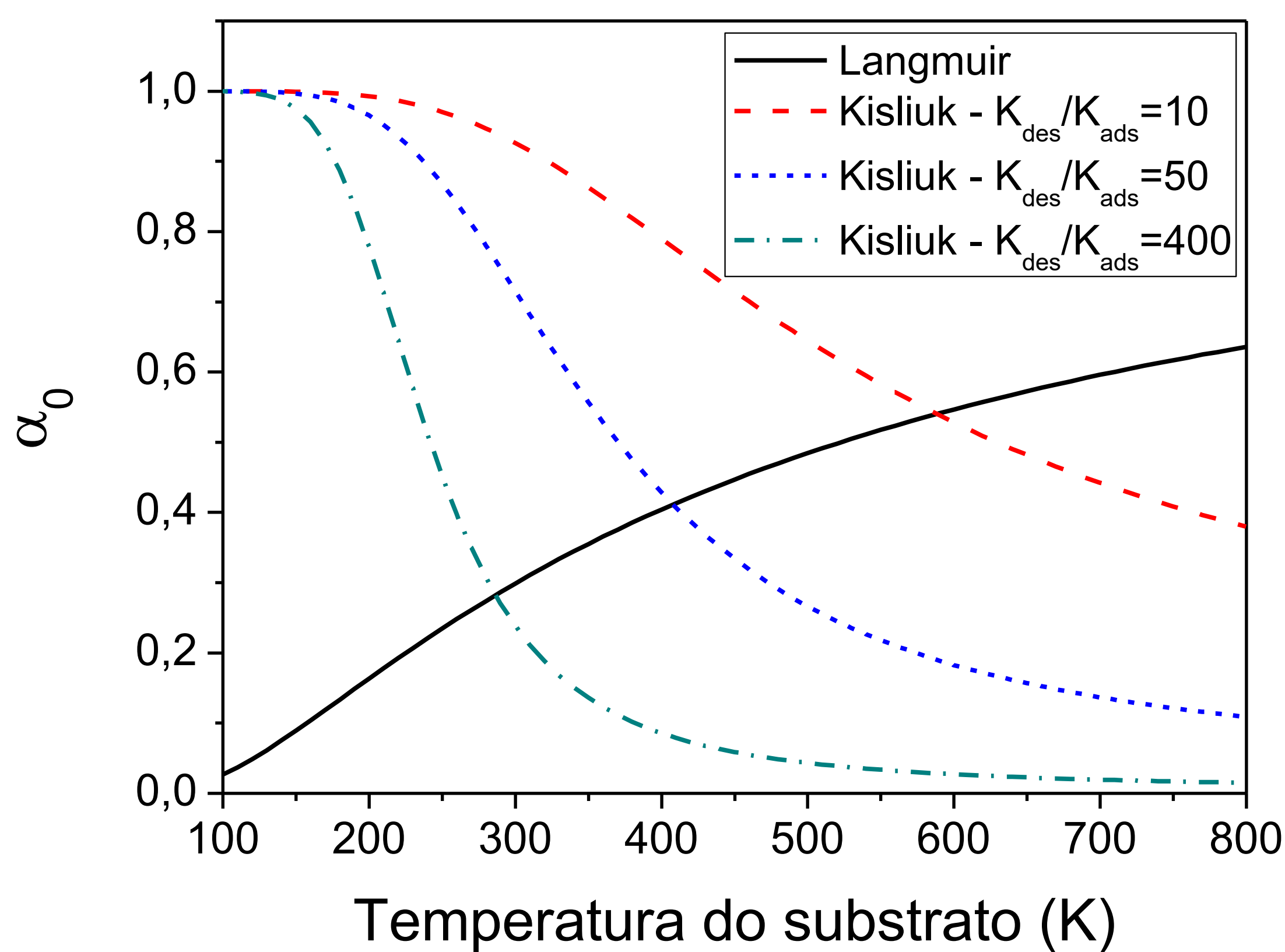


Figura 2: Dependência do coeficiente de fixação inicial com a temperatura do substrato para os modelos de Langmuir e Kisliuk para a adsorção.

Para incluir a dependência com a temperatura, a taxa de adsorção foi reescrita com base nos modelos de Langmuir [2] e Kisliuk [2,3] para adsorção, abrindo o coeficiente de fixação, considerado constante no modelo de Berg (Fig. 2).

O modelo de Langmuir não descreve o comportamento experimental.

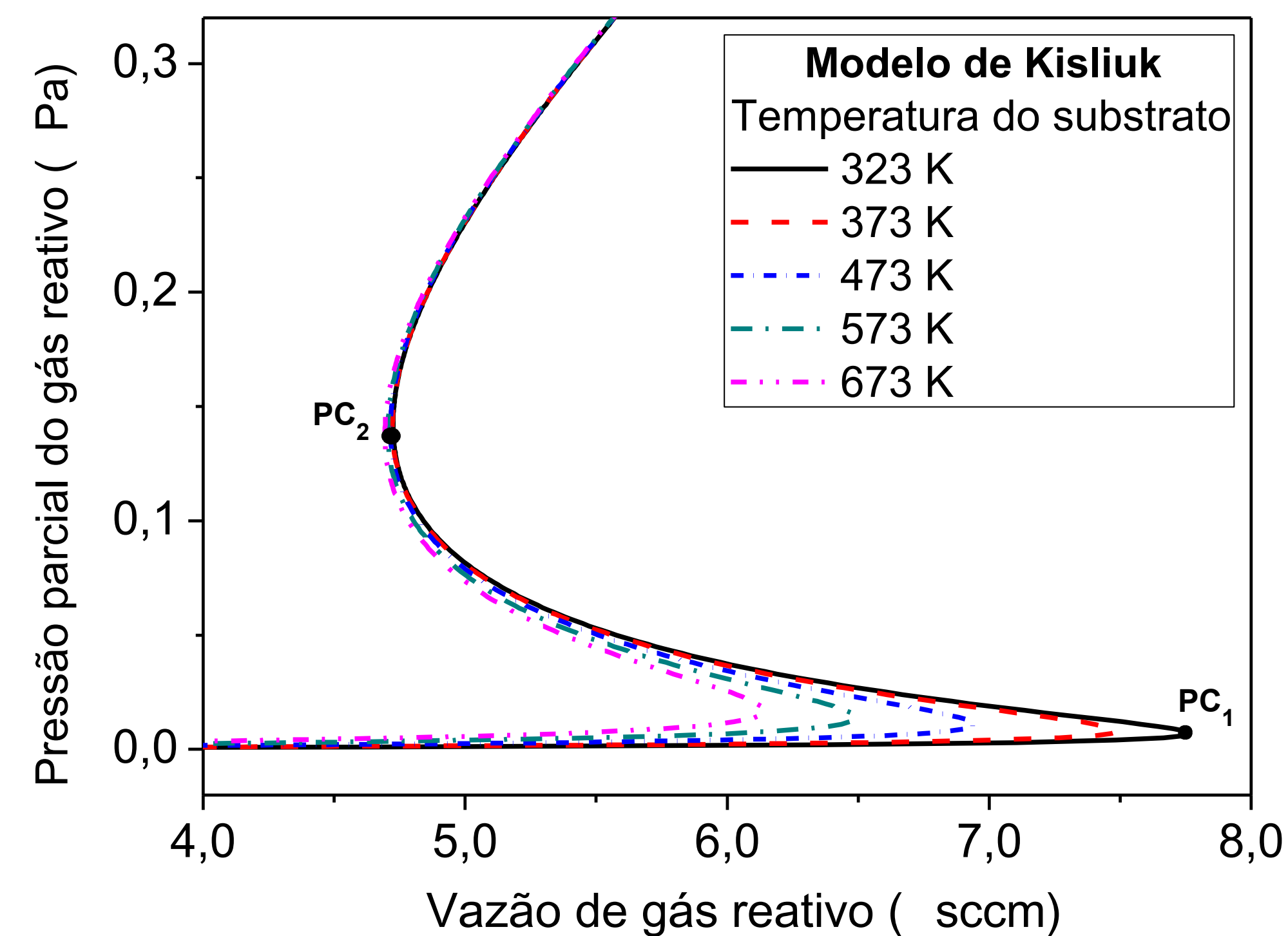
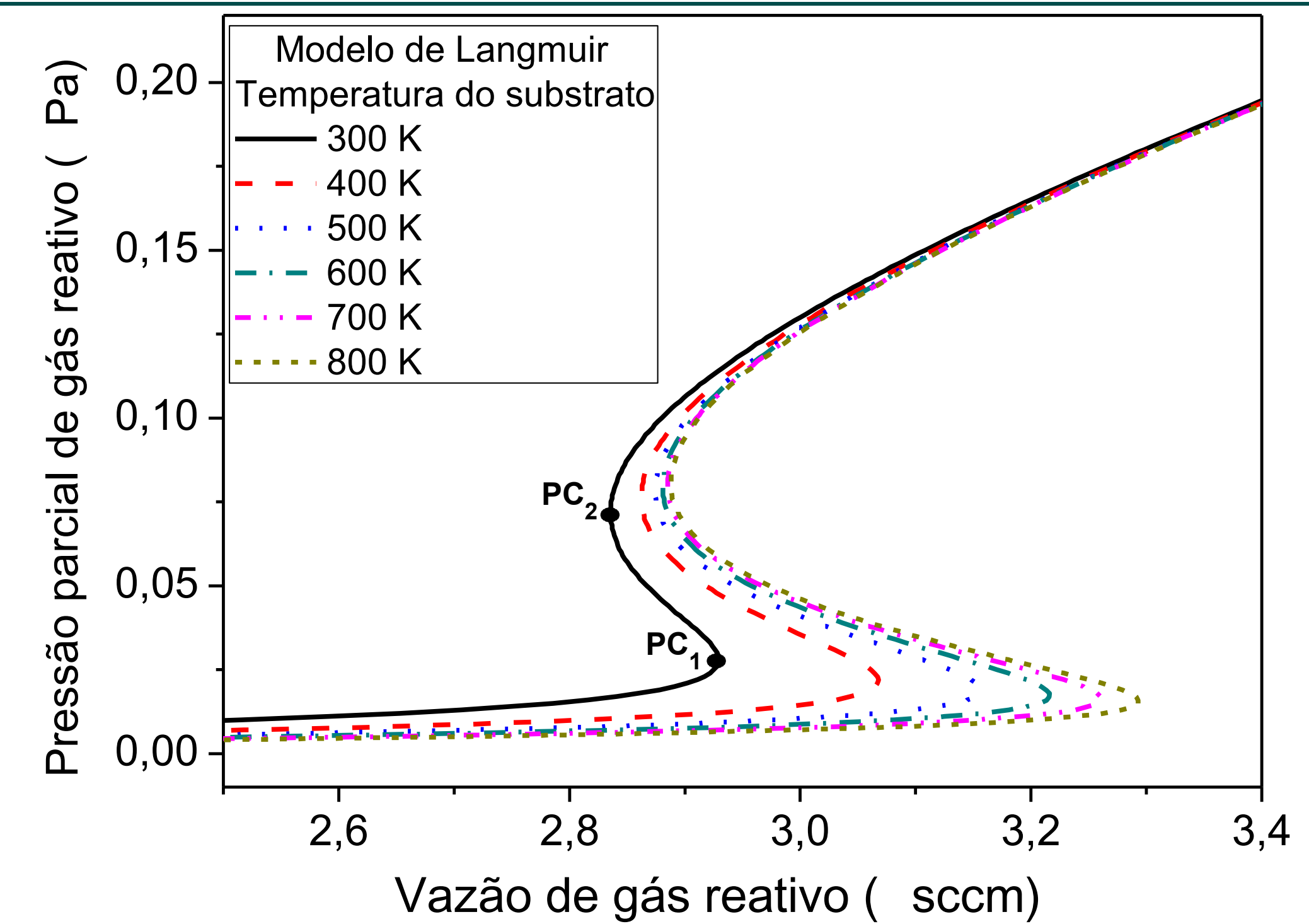


Figura 3: Curvas de histerese da pressão simuladas variando a temperatura do substrato utilizando os modelos de Langmuir e Kisliuk, onde PC1 e PC2 indicam o primeiro e segundo pontos críticos respectivamente.

Usando o modelo de Kisliuk observa-se um comportamento similar ao experimental (Fig. 3). Com o aumento da temperatura o coeficiente de fixação diminui reduzindo o consumo de gás pelo substrato, o que desloca o primeiro ponto crítico para valores menores de vazão de gás.

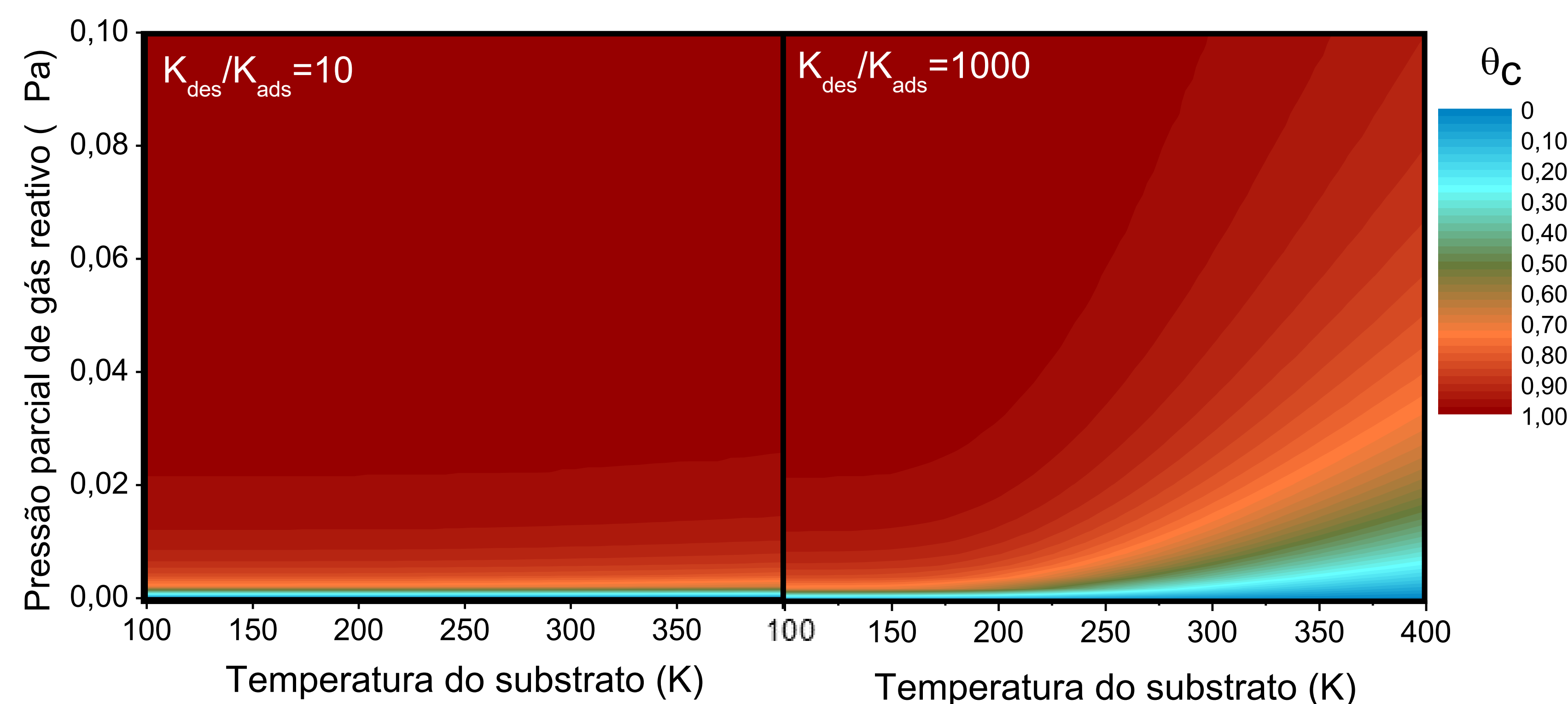


Figura 4: Fração de composto em função da temperatura e pressão para a razão entre o fator de frequência da dessorção e adsorção igual a 10 (a) e 1000 (b).

A razão entre o fator de frequência para a dessorção e adsorção foi variada nas simulações (Fig. 4). Este fator representa a probabilidade de uma molécula de gás quimissorver ou dessorver na superfície a partir do estado precursor. O aumento desta razão leva a uma diminuição da fração de composto no filme.

Referências:

- [1] S. Berg, E. Särhammar, Thin Solid Films, 565, 186–192, (2014)
- [2] W. Ranke, Y. Joseph. Phys. Chem. Chem. Phys, 4, 2483–2498, (2002)
- [3] P. Kisliuk, J. Phys. Chem. Solids, 3, 95-101, (1957)