

ANÁLISE TEÓRICA E EXPERIMENTAL DO EFEITO DA TEMPERATURA NA DEPOSIÇÃO REATIVA DE FILMES POR PULVERIZAÇÃO CATÓDICA

Júlia Karnopp¹, Julio César Sagás,²

¹ Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Física CCT - bolsista PIVIC/UDESC

² Orientador, Departamento de Física CCT – julio.sagas@udesc.br

Palavras-chave: *magnetron sputtering*, temperatura do substrato, filmes finos.

A deposição reativa por *magnetron sputtering* é um dos métodos mais utilizados para a deposição de filmes. Neste processo, um gás reativo é inserido na câmara, reagindo com os átomos metálicos depositados e formando o filme. Estas reações ocorrem também na superfície do cátodo (alvo) ocasionando o chamado envenenamento. A dependência do consumo de gás reativo com a fração de composto nas superfícies ocasiona a histerese nas curvas de processo (pressão, tensão, etc) em função da vazão de gás reativo, tornando o processo instável. As curvas de histerese são caracterizadas por dois pontos críticos: o primeiro, que corresponde ao envenenamento do alvo (aumentando a vazão) e o segundo, que corresponde ao desenvenenamento (diminuindo a vazão).

Diversos parâmetros afetam o comportamento da curva de histerese, sendo a maioria incluída no chamado modelo de Berg [1] que simula qualitativamente este processo. Contudo, tal modelo não inclui explicitamente a temperatura do substrato, parâmetro que é comumente variado nos experimentos e que possui papel relevante sobre as propriedades do filme. Portanto, o objetivo deste trabalho é incluir a temperatura do substrato no modelo e analisar qualitativamente os efeitos causados por ela no processo de deposição.

Com este objetivo, foram utilizados os modelos de Langmuir [2] e Kisliuk [2,3] para a adsorção de gás na superfície. Nesses modelos a dependência com a temperatura do substrato é explicitada no coeficiente de fixação que foi substituído nas equações do modelo de Berg. Para o modelo de Kisliuk, o fator K foi mantido igual a 1, mantendo a mesma dependência do coeficiente de fixação com a fração de composto apresentada pelo modelo de Berg.

Após as modificações, foram realizadas simulações variando a temperatura do substrato. Também foi variada a razão entre o fator de frequência de dessorção e adsorção (K_{des}/K_{ads}) que aparece no modelo de Kisliuk. Os resultados das simulações foram comparados com curvas de histerese obtidas experimentalmente. Tais curvas foram obtidas em um sistema *triodo magnetron sputtering* utilizando um alvo de titânio (99,5%) em uma atmosfera de argônio e nitrogênio. A pressão de argônio foi mantida em torno de 0.40 Pa e a corrente foi mantida constante em 1.00 A.

Experimentalmente, observa-se que com o aumento da temperatura o primeiro ponto crítico é deslocado para valores menores de vazão do gás reativo e o segundo ponto crítico não é afetado. Incluindo o coeficiente de fixação do modelo de Langmuir no modelo de Berg não é possível obter o mesmo comportamento, a curva de histerese é deslocada para o lado oposto ao observado nos experimentos. Isto é consequência da equação usada para o coeficiente de fixação que é uma função crescente da temperatura. Com o aumento da temperatura, aumenta o consumo de gás na área de coleção, assim o primeiro ponto crítico é deslocado para valores maiores de vazão, uma vez que o primeiro ponto crítico coincide com o máximo consumo de gás na área de coleção.

Como o modelo de Langmuir não é adequado para descrever a dependência com a temperatura, foi utilizado também o modelo de Kisliuk. As curvas de histerese obtidas utilizando este modelo estão de acordo com o comportamento observado experimentalmente, o primeiro ponto crítico é deslocado para valores menores de vazão de gás com o aumento da temperatura. Para este modelo o coeficiente de fixação é uma função decrescente da temperatura do substrato, assim, aumentando a temperatura o consumo de gás no substrato torna-se menor, o que está diretamente ligado ao aumento da dessorção com o aumento da temperatura. E o segundo ponto crítico praticamente não é afetado por este parâmetro, pois depende principalmente do rendimento de *sputtering* que não foi modificado nas simulações.

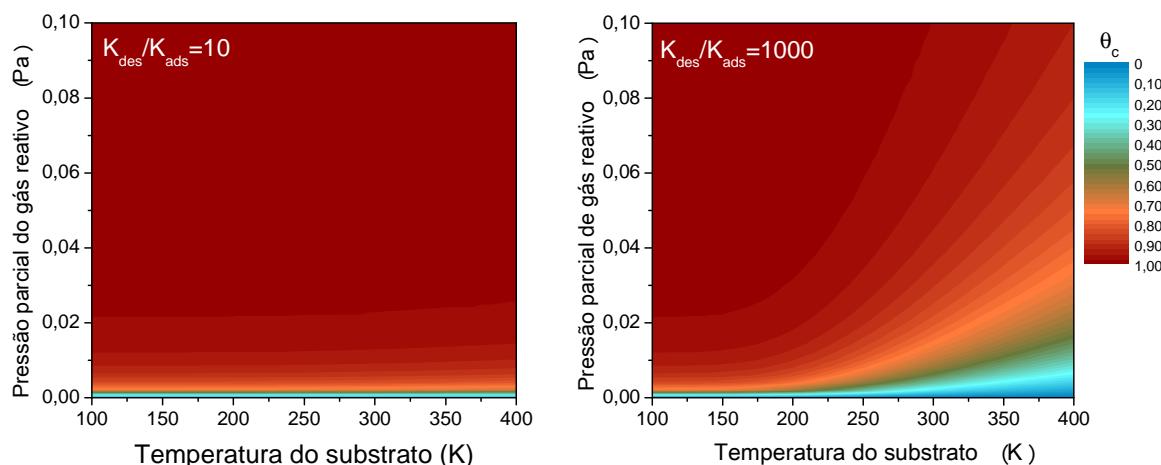


Fig. 1 Gráfico para a fração de composto em função da temperatura e pressão para a razão entre o fator de frequência de dessorção e adsorção igual a 10 (a) e 1000 (b).

A figura 1 mostra a fração de composto na superfície em função da temperatura do substrato e da pressão parcial de gás reativo utilizando o modelo de Kisliuk. O fator de frequência está associado a probabilidade de a molécula adsorver ou dessorver da superfície. Quanto maior for a razão entre esses fatores, maior é a probabilidade de a molécula dessorver, diminuindo a taxa de adsorção. Portanto, para uma mesma pressão e temperatura a fração de composto na superfície diminui com o aumento desta razão. Para altos valores da razão, (Fig. 1b), é necessária uma pressão maior para que toda a superfície seja coberta por composto.

É possível observar também que à medida que aumenta a temperatura do substrato diminui a fração de composto na superfície, devido à diminuição da taxa de adsorção. Para temperaturas menores que cerca de 200 K, a razão entre as probabilidades e a temperatura não interferem na formação de composto, pois para baixas temperaturas o coeficiente de fixação é praticamente constante e muito próximo de 1, o que faz com que a superfície seja coberta totalmente por composto já para baixas pressões de gás reativo.

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)