

SIMULAÇÃO DA DEPOSIÇÃO DE FILMES FINOS ATRAVÉS DO PROGRAMA SIMTRA

Julio César Sagás¹, Júlia Karnopp².

¹ Orientador, Departamento de Física CCT – julio.sagas@udesc.br

² Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Física CCT - bolsista PIVIC/UDESC.

Palavras-chave: Filmes. Simulação. SIMTRA.

Uma das maneiras mais usais de se modificar as propriedades superficiais de um material é revesti-lo com um filme fino com as propriedades desejadas. Em particular, na deposição de filmes finos por pulverização catódica (*magnetron sputtering*) átomos são ejetados da superfície de um alvo por bombardeamento iônico. Os íons são gerados em um plasma magneticamente confinado em frente ao alvo. Entre as variações do sistema *magnetron sputtering*, destaca-se o sistema *triodo magnetron sputtering*, em que uma tela aterrada é inserida entre o alvo e o substrato. Os átomos ejetados são transportados na fase vapor até uma superfície, onde depositam-se formando um filme fino. 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 a formação do filme. 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.

De acordo com este objetivo, foi usado o programa SIMTRA (Simulation of Metal Transport), disponibilizado gratuitamente pelo grupo DRAFT da Universidade de Ghent na Bélgica [1, 2]. Ele utiliza o método de Monte Carlo para descrever o transporte dos átomos ejetados do alvo durante a fase de vapor. Calcula o livre caminho médio e as colisões durante o transporte, 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. É preciso fornecer alguns dados iniciais, como temperatura, pressão, gás e metal utilizado, número de átomos ejetados, as distribuições angular e de energia dos átomos ejetados, o perfil da zona de erosão do alvo e a geometria do reator, desenhando todas as peças presentes nele.

Para as simulações, foi desenhado o reator utilizado no Laboratório de Plasmas, Filmes e Superfícies do CCT/UDESC, utilizado gás argônio, temperatura de 300 K, as distribuições angular e de energia dos átomos ejetados foram calculadas pelo programa SRIM. Foram feitas simulações para alguns valores de pressão entre 0,0 e 1,0 Pa, para 10^6 átomos ejetados de um alvo de titânio, sem e com tela a uma distância fixa do alvo. Também, foi simulado para 10^7 átomos, com uma pressão de 0,4 Pa, para alvos de titânio, alumínio, cobre e gadolínio, primeiramente sem a tela e depois variando a distância dela até o alvo entre 10 e 40 mm.

Foram analisados, utilizando gráficos, o perfil de deposição, a energia média e o cosseno do ângulo de incidência dos átomos na superfície onde são colocadas as amostras dentro do reator, pois eles interferem nas propriedades do filme. A partir dos dados obtidos das simulações em que foi mudado o valor da pressão, concluiu-se que a energia média com que os átomos se depositam diminui com o aumento da pressão (Fig. 1). Isto acontece porque com o aumento da

pressão aumenta o número de colisões entre os átomos ejetados e os átomos do gás, como nas colisões os átomos perdem energia, a energia média deles é menor quando eles encontram a superfície. A presença da tela não altera o valor da energia média. Com as simulações em que foi mudada a distância tela-alvo, percebeu-se que não há alteração do valor da energia média e do ângulo de incidência dos átomos. No entanto, esses valores variam para cada elemento usado como alvo, pois dependem das características de cada um. Em todas as simulações, a tela interferiu na quantidade de átomos depositados na superfície analisada (Fig. 2), porque uma parte dos átomos passa a se depositar na tela e não mais nas outras superfícies do reator.

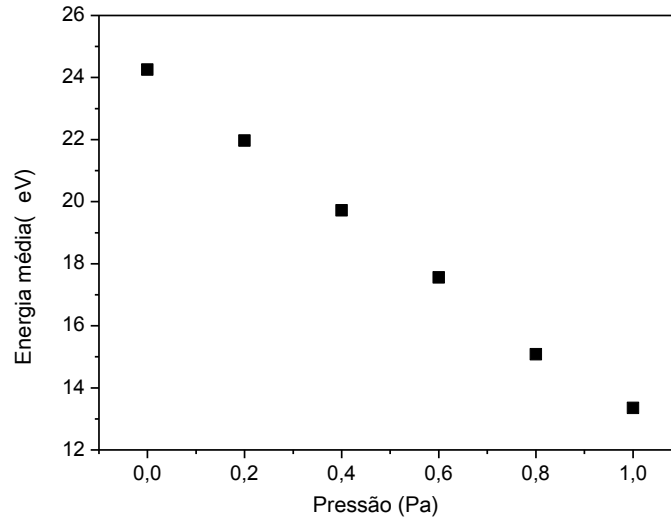


Fig. 1 Energia média dos átomos de titânio em função da pressão para simulações sem a tela.

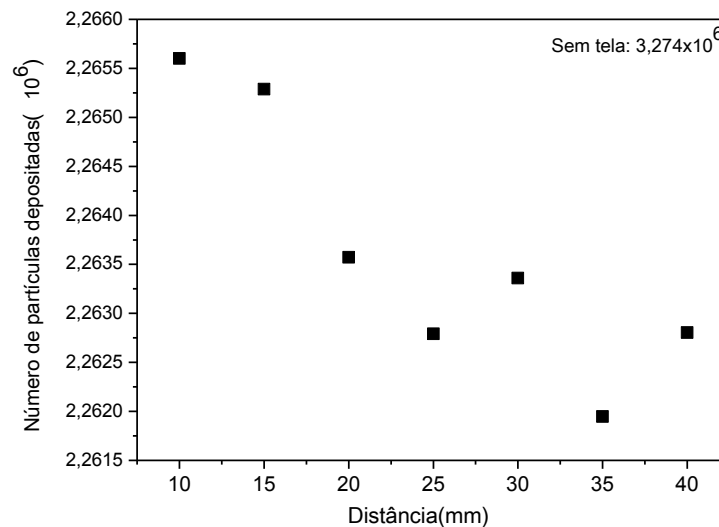


Fig. 2 Número de átomos de cobre depositados em função da distância tela-alvo e o valor para a simulação sem a tela.

Referências:

- [1] K. Van Aeken, S. Mahieu, D. Depla. Journal of Physics D.: Applied Physics 41 (2008) 20530, doi:10.1088/0022-3727/41/20/205307
- [2] D. Depla, W.P. Leroy. Thin Solid films 520 (2012) 6337, DOI 10.1016/j.tsf.2012.06.032