

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

Júlia Karnopp<sup>1</sup>, Julio César Sagás<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> Orientador, Departamento de Física CCT – julio.sagas@udesc.br.

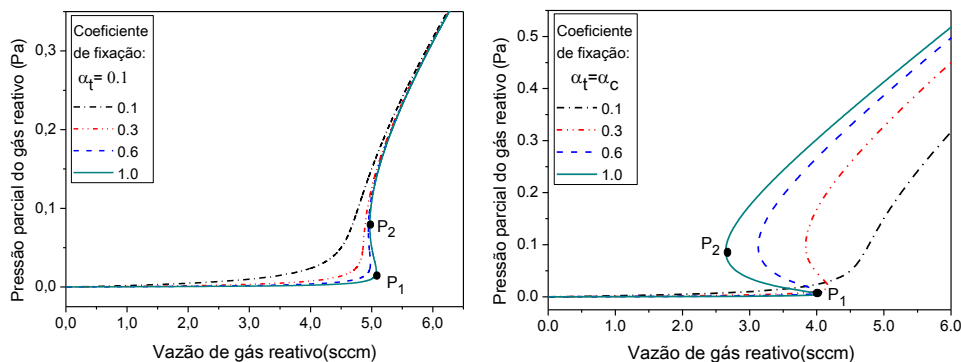
Palavras-chave: Simulação. Deposição Reativa. Adsorção.

Um processo muito utilizado para modificar as propriedades de uma superfície é a deposição de filmes finos por pulverização catódica (*magnetron sputtering*). Neste processo, íons gerados em um plasma magneticamente confinado colidem em um alvo arrancando átomos desta superfície. Estes átomos são transportados na fase de vapor e depositam nas superfícies internas, formando o filme. Geralmente, o alvo é constituído de um material metálico, portanto quando se deseja a deposição de um composto, utiliza-se a técnica de deposição reativa. Nesta técnica, um gás reativo é inserido no processo e adsorvido no alvo e nas demais superfícies, formando um composto. A formação de composto no alvo causa seu envenenamento causando a histerese de diversos parâmetros de operação em função da vazão de gás reativo. A deposição reativa depende de parâmetros como a temperatura do substrato, sendo necessário estudar o efeito desta no processo, pois é comum aquecer o substrato durante a deposição de filmes.

A adsorção é a adesão dos átomos ou moléculas de um fluido em uma superfície. Estes átomos/moléculas são atraídos a fim de reduzir a energia livre da superfície. A interação entre a superfície e o adsorbato pode ser física (fisissorção), com fracas ligações entre superfície e a substância adsorvida, ou química, com a formação de ligações químicas (quimissorção). Para estudar o processo de adsorção geralmente são utilizadas isotermas de adsorção que fornecem a fração da superfície ocupada em função da pressão a temperatura constante. Existem vários modelos teóricos que descrevem essas isotermas, como os de Freundlich, Langmuir, Kisiuk e BET (Brunauer, Emmett and Teller).

A deposição reativa pode ser qualitativamente simulada através do modelo de Berg [1], que descreve as características gerais do processo, como a histerese [2]. O modelo considera que além da formação de composto pela adsorção também pode ocorrer a implantação do gás reativo [3]. O processo de adsorção é descrito pelo coeficiente inicial de fixação para o alvo ( $\alpha_t$ ) e para o substrato ( $\alpha_c$ ), considerados constantes no modelo original de Berg. Este coeficiente fornece a probabilidade de um átomo/molécula ser adsorvido na superfície, sendo definido como a razão entre o número de átomos/moléculas adsorvidos na superfície pelo número total que colide nela. Para analisar os efeitos da temperatura do substrato serão modificadas as equações do modelo abrindo os termos referentes ao coeficiente de fixação e para isto, pretende-se utilizar os modelos existentes para descrever adsorção.

Primeiramente, foram realizadas simulações utilizando o modelo de Berg para analisar a influência deste coeficiente na curva de histerese. Foi variado o valor do coeficiente de fixação para o substrato mantendo o coeficiente para o alvo fixo em 0,1 (Fig. 1a) e variando o coeficiente do alvo de modo que os coeficientes do alvo e do substrato sejam iguais (Fig. 1b).



**Fig. 1:** Curva de histerese simuladas utilizando o modelo de Berg variando o valor do coeficiente de fixação para o substrato ( $\alpha_c$ ) e mantendo o coeficiente para o alvo ( $\alpha_t$ ) fixo em 0,1 (a) e com o coeficiente do alvo igual ao do substrato ( $\alpha_t = \alpha_c$ ) (b). O primeiro ponto crítico,  $P_1$ , indica quando o alvo é envenenado e segundo ponto crítico,  $P_2$ , é o ponto em que o alvo é desvenenado.

A formação de composto no alvo diminui o número de átomos ejetados e, conseqüentemente, diminui a quantidade de átomos de metal depositados. Desta forma, há menos átomos disponíveis no substrato para o gás reagir. Quando o substrato está todo coberto com composto a pressão aumenta abruptamente. Mantendo o coeficiente de fixação do alvo fixo, nota-se que o primeiro ponto crítico (ponto onde a pressão começa a subir abruptamente) é deslocado para maiores valores de vazão. Isto ocorre porque o consumo de gás no substrato aumenta com  $\alpha_c$ . Este maior consumo não leva a um aumento de pressão, pois o baixo valor de  $\alpha_t$ , garante que o alvo demore a envenenar, garantindo um fluxo de metal para o substrato. Para pequenos valores de  $\alpha_c$ , como 0,1, a curva não apresenta histerese, pois o consumo de gás no substrato é baixo. O ponto em que o alvo desvenena (segundo ponto crítico) praticamente não muda.

Aumentando o coeficiente de fixação do alvo aumenta a fração de composto nele e com isso diminui a quantidade de átomos ejetados para reagir com o gás reativo no substrato. Como  $\alpha_c$  aumenta também, a fração de composto no substrato aumenta, saturando mais rápido e provocando o envenenamento do alvo em valores menores de vazão de gás. Para os coeficientes iguais a 0,1, não há histerese. O segundo ponto crítico muda nas simulações. Este ponto depende principalmente da taxa de *sputtering*, mas com o aumento do coeficiente de fixação do alvo e o aumento da formação de composto no alvo há uma redução na taxa de *sputtering*, exigindo que a vazão seja reduzida para que ocorra o desvenenamento.

#### Referências:

- [1] Berg, S.; Nyberg, T. Fundamental understanding and modeling of reactive sputtering processes. *Thin Solid Films*, v. 476, n. 2, abr. 2005, p.215-230.
- [2] Sagás, J.C. et al. Modeling reactive sputter deposition of titanium nitride in a triode magnetron sputtering system. *Surf. Coat. Technol.*, v. 206, jul. 2011, p.1765-1770.
- [3] Berg, S.; Särhammar, E.; Nyberg, T. Upgrading the “Berg-model” for reactive sputtering processes. *Thin Solid Films*, v. 565, feb, 2014, p. 186-192.