

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI  
FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD  
KATEDRA FYZIKY

**Nestacionární model pro vysokovýkonové  
pulzní magnetronové rozprašování  
kovů**

Milada Krejčová

bakalářská práce

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI  
Fakulta aplikovaných věd  
Akademický rok: 2012/2013

## ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Milada KREJČOVÁ**  
Osobní číslo: **A10B0248P**  
Studijní program: **B3918 Aplikované vědy a informatika**  
Studijní obor: **Aplikovaná a inženýrská fyzika**  
Název tématu: **Nestacionární model pro vysokovýkonové pulzní magnetronové rozprašování kovů**  
Zadávající katedra: **Katedra fyziky**

### Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Studium literatury o magnetronovém naprašování a jeho modelování pomocí globálních zákonů zachování.
2. Seznámit se s nestacionárním modelem pro vysokovýkonové pulzní magnetronové rozprašování. Doplnit model o potřebné parametry pro alespoň dva různé materiály terče.
3. Provést počítačové simulace vysokovýkonových pulzních magnetronových výbojů s různými materiály terče. Prozkoumat vliv vstupních parametrů modelu na sledované výbojové charakteristiky. Provést kvalitativní diskusi výsledků.

Rozsah grafických prací:

Rozsah pracovní zprávy: **50-80 stran**

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná**

Seznam odborné literatury:

**Podle pokynů vedoucího bakalářské práce.**

Vedoucí bakalářské práce: **Mgr. Andrea Dagmar Pajdarová, Ph.D.**

Katedra fyziky

Konzultant bakalářské práce: **Ing. Tomáš Kozák**

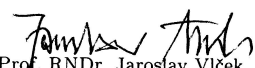
Nové technologie pro informační společnost

Datum zadání bakalářské práce: **1. května 2012**

Termín odevzdání bakalářské práce: **31. května 2013**

  
Doc. Ing. František Vávra, CSc.  
děkan



  
Prof. RNDr. Jaroslav Vlček, CSc.  
vedoucí katedry

V Plzni dne 15. května 2012

## PROHLÁŠENÍ

Předkládám tímto k posouzení a obhajobě bakalářskou práci zpracovanou na závěr studia na Fakultě aplikovaných věd Západočeské univerzity v Plzni.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracovala samostatně a výhradně s použitím odborné literatury a pramenů, jejichž úplný seznam je její součástí.

V Plzni dne 16. srpna 2013

.....

# Poděkování

Chtěla bych poděkovat za cenné rady své vedoucí bakalářské práce Mgr. Andree Dagmar Pajdarové Ph.D i konzultantovi Ing. Tomáši Kozákovi, Ph.D.

## Anotace

Předkládaná bakalářská práce se v úvodu zabývá využitím plazmových technologií. Dále popisuje základy magnetronového naprašování, jejich vývoj a použití, přičemž se zaměřuje především na vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování. Poté rozebírá základní metody modelování a simulace plazmatu a zabývá se jednotlivými modely pro vysokovýkonové pulzní magnetronové výboje. Ve zvolených metodách zpracování popisuje, jak byl doplněn stávající nestacionární model pro vysokovýkonové pulzní magnetronové rozprašování kovů o parametry nutné k modelování rozprašování tantalu, titanu a zirkonia. Ve výsledcích jsou ukázány a diskutovány závislosti proudové hustoty na třech různých parametrech - výbojovém napětí  $U_d$ , koeficientu zpětného zachycení sekundárních elektronů terčem  $r$  a hodnotě faktoru určujícího sekundární emisi elektronů z terče po dopadu iontu rozprašovaného kovu  $s$ .

## Klíčová slova

plazma, vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování, rozprašování kovů, HiPIMS, modelování, simulace, nestacionární globální model

## Abstract

The presented bachelor's thesis is at the beginning focused on using of plasma technologies. Next, it explains basics of magnetron sputtering, its development and use, with focus on High Power Impulse Magnetron Sputtering. Afterwards, it discusses basic methods in modelling and simulation of plasma, with closer look on specific models for High Power Impulse Magnetron Sputtering discharges. The thesis describes how current non-stationary model for High Power Impulse Magnetron Sputtering of metals was supplemented with parameters necessary for modelling of tantal, titanium and zirconium sputtering. The results are presented and discussed, with focus on dependence of current density on three parameters: discharge voltage  $U_d$ , coefficient of recapture of secondary electrons to target  $r$  and factor of secondary emission of electrons from target after impact by ion of sputtered metal  $s$ .

## Key words

plasma, high power impulse magnetron sputtering, sputtering of metals, HiPIMS, modelling, simulation, non-stacionary global model

# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Současný stav problematiky a přehled literatury</b>	<b>11</b>
2.1	Magnetronové výboje pro depozici vrstev . . . . .	11
2.1.1	Vývoj a použití magnetronových výbojů . . . . .	11
2.1.2	Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování . . . . .	14
2.2	Základní metody simulace a modelování plazmatu . . . . .	17
2.2.1	Fluidní model . . . . .	17
2.2.2	Částicové modely . . . . .	19
2.2.3	Hybridní model . . . . .	20
2.3	Modely pro vysokovýkonové pulzní magnetronové výboje . . . . .	21
2.3.1	Parametrický model . . . . .	21
2.3.2	Nestacionární model . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Cíle</b>	<b>31</b>
<b>4</b>	<b>Zvolené metody zpracování</b>	<b>32</b>
4.1	Rozšíření modelu . . . . .	32
4.2	Program pro výpočet rozprašovacích výtěžků . . . . .	33
4.2.1	Tantal . . . . .	34
4.2.2	Titan . . . . .	35
4.2.3	Zirkonium . . . . .	36
4.2.4	Měď . . . . .	37
4.3	Data z databáze Mezinárodní agentury pro atomovou energii . . . . .	38
<b>5</b>	<b>Výsledky a diskuze</b>	<b>41</b>
<b>6</b>	<b>Závěr</b>	<b>49</b>
	<b>Literatura</b>	<b>50</b>



# Kapitola 1

## Úvod

Slovo plazma pochází z řečtiny a znamená „něco uzpůsobeného“. Ve fyzice se však jedná o soubor volně se pohybujících neutrálních a elektricky nabitých částic. Celkově se však plazma jeví jako elektricky neutrální, jelikož obsahuje téměř stejný počet částic nabitých kladně a záporně.

Plazma je nejrozšířenějším skupenstvím látky ve vesmíru, tvoří až 99% jeho viditelné hmoty [4]. Lidé se s ním setkávají už od úsvitu věků, kdy nejdříve plazma pozorovali v podobě slunečního kotouče na jasné obloze, na zamračené obloze zase viděli blesky a v noci jako zdroj tepla a světla používali oheň. V severních oblastech se navíc podívovali nad krásami polární záře.

V současnosti se s plazmatem setkáváme mnohem častěji díky jeho bohatému technickému využití. Mimo obecně známých plazmových obrazovek jsou to například:

- Plazmové svařování
- Plazmové řezání
- Plazmové naprašování
- Tokamak
- Plazmové motory
- Plazmové zbraně

### **Plazmové svařování**

Používá se na spoje letadel, kosmických raket a v těžkém průmyslu. Má totiž užší elektrický oblouk než běžné svařování [7].

### **Plazmové řezání**

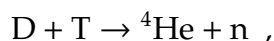
Taví vodivý materiál vysokoteplotním plazmovým svazkem. Má vysokou rychlost řezání a dosahuje vysoké kvality [7].

### Plazmové naprašování

Má velký rozsah využití. Používá se například v optice na antireflexní vrstvy brýlových čoček, v lékařství na snížení koeficientu tření kloubních náhrad a ve strojírenství na odolnější nástroje jako jsou třeba vrtáky, frézy či pily.

### Tokamak

Jedná se o jednu z nejslibnějších variant jak uspokojit stále rostoucí spotřebu energie a nahrazení již docházejících fosilních paliv. Funguje na principu transformátoru, kde místo sekundární cívky se nachází prstenec plazmatu. Bohužel se zatím jedná jen o vědecké zařízení nevhodné pro komerční využití, protože v současnosti se vyskytuje stále řada technických problémů pro dosažení podmínek jaderné fúze. Funguje na principu chemické reakce:



kde D je deuterium ( ${}^2\text{H}$ ), T tritium ( ${}^3\text{H}$ ) a n je neutron. Současné tokamaky však s tritiem nepracují kvůli jeho vzácnosti a radioaktivitě (má poločas rozpadu asi 12 let). Používat by ho však měl tokamak ITER, který se právě staví nedaleko francouzského Marseille. Očekává se od něj, že se stane průkopníkem konceptu fúzních elektráren [20].

### Plazmové motory

Mají se stát levnější alternativou k aktuálně používaným motorům v kosmonautice – raketovým a jaderným. Měl by být použitelný pro manévrování na nízkých orbitách (úklid kosmického odpadu) i na cesty k jiným planetám naší sluneční soustavy. V současnosti jsou však tyto motory nespolehlivé, což dokládá například let japonské sondy Hayabusa [16].

### Plazmové zbraně

Zatím se spíše jedná o projekty na papíře. Teoreticky by měl laserový impuls zionizovat vzduch (na plazma), kudy by pak měl cestou nejmenšího odporu projít elektrický impuls. Praktickému využití však brání mnoho faktorů, například hrozba spálení elektroniky ve zbrani či přeskočení výboje jinam než je zamýšlený terč [8].

Tato práce se věnuje plazmovému naprašování.

# Kapitola 2

## Současný stav problematiky a přehled literatury

### 2.1 Magnetronové výboje pro depozici vrstev

V současnosti se nejčastěji v praxi využívají při plazmovém naprašování magnetronové výboje. Magnetron je přístroj, který se používá k prodloužení dráhy elektronů pomocí magnetického pole, a tak k zvýšení účinnosti ionizace v plazmatu.

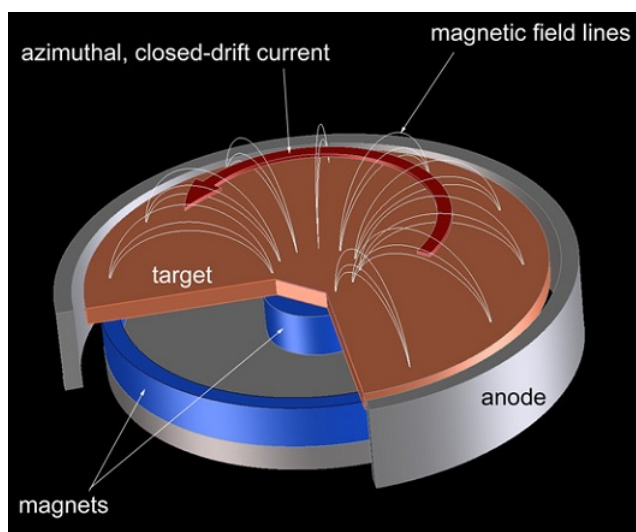
Princip této přípravy tenkých vrstev spočívá v bombardování terče (katody) ionty generovanými ve výboji a urychlenými aplikovaným napětím. To způsobí rozprášení atomů terče, které se pak usadí v podobě tenkého filmu na substrátu. Z povrchu terče jsou po dopadu iontu též emitovány sekundární elektrony, které jsou nutné k udržení rozprašovacího výboje, protože ionizují pracovní plyn i rozprášené atomy terče.

#### 2.1.1 Vývoj a použití magnetronových výbojů

Za zakladatele naprašování vrstev je považován William Grove, který v polovině 19. století zkoumal elektrické vlastnosti plynů při nízkých tlacích [2]. Používal při pokusech Faradayův princip induktivního generátoru pulzů vysokého napětí. Tyto pulzy byly generovány pomocí periodického přerušování proudu. Dalším průkopníkem v oblasti naprašování byl Arthur Wright [2]. Zabýval se vyšetřováním stability pulzačně naprášených filmů z různých prvků v nízkotlakém prostředí při vystavení atmosférickému tlaku. Tyto filmy byli na naše současné poměry velmi porézní z důvodu používání vyšších tlaků než jaké se využívají dnes.

Největšího rozvoje bylo dosaženo na přelomu 50. a 60. let 20. století díky vylepšení vakuových technologií. Byly rozšířeny možnosti deponování velkého množství materiálů včetně dielektrik [9]. V této době se často používali výboje s malým poměrem stran  $L/R < 1$ , kde  $R$  je poloměr výboje a  $L$  je délka výboje. Typickou vzdáleností bylo několik centimetrů. Pro komerční použití se vyžadovalo vysoké napětí – řádově 2 - 5 kV. Již na konci 30. let Penning navrhl řešení na snížení nároků na napětí použitím magnetického pole pro prodloužení životnosti sekundárních elektronů a jejich zachycení v okolí terče

[9]. Tím také zvýšil rozsah tlaků, při kterém bylo možné výboje udržet. Vyvinula se dutá cylindrická katoda nazvaná magnetron.



Obrázek 2.1: **Ilustrace rovinného magnetronu.** V řezu magnetronu jsou magnety. Kolem magnetů je anoda a nad magnety je terč. Dále jsou tu zakresleny magnetické siločáry a červenou šipkou je naznačen směr proudu elektronů. Převzato z [2].

Dalším krokem ve vývoji (70. léta minulého století) byl rovinný magnetron [2], jehož ilustrace je na obrázku 2.1 a schéma zapojení na obrázku 2.2, na kterém je znázorněna i přielektrodová oblast (*angl.* sheath). Jedná se o kladně nabitou část plazmatu, jelikož v ní převládají ionty. Jako zdroj magnetického pole se používají permanentní magnety, elektromagnety, či jejich kombinace. Většinou se používají magnetrony s anodou kolmou na terč, ale občas se dají nalézt i s anodou rovnoběžnou s terčem. Pozice anody je velmi důležitá pro interakci mezi plazmatem a substrátem. Pokud anoda zastíní plazmový výboj, plazma bude v okolí substrátu velmi slabé a bude velmi malá i pravděpodobnost na vytvoření kvalitního povlaku na substrátu.

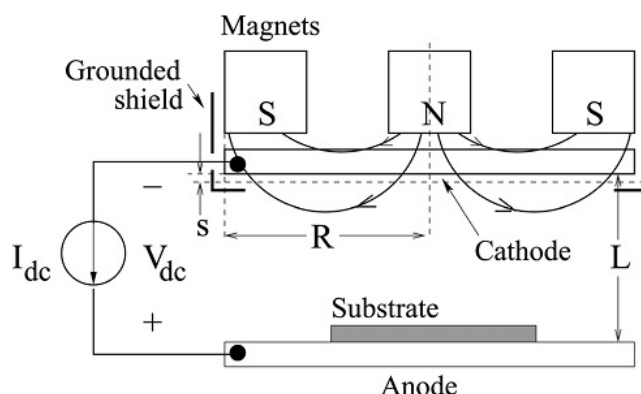
Windows a Savvides zavádějí v 80. letech rozdělení typů magnetronů na tři skupiny [9]:

- Vyvážený (konvenční) magnetron
- Nevyvážený magnetron typu 1
- Nevyvážený magnetron typu 2

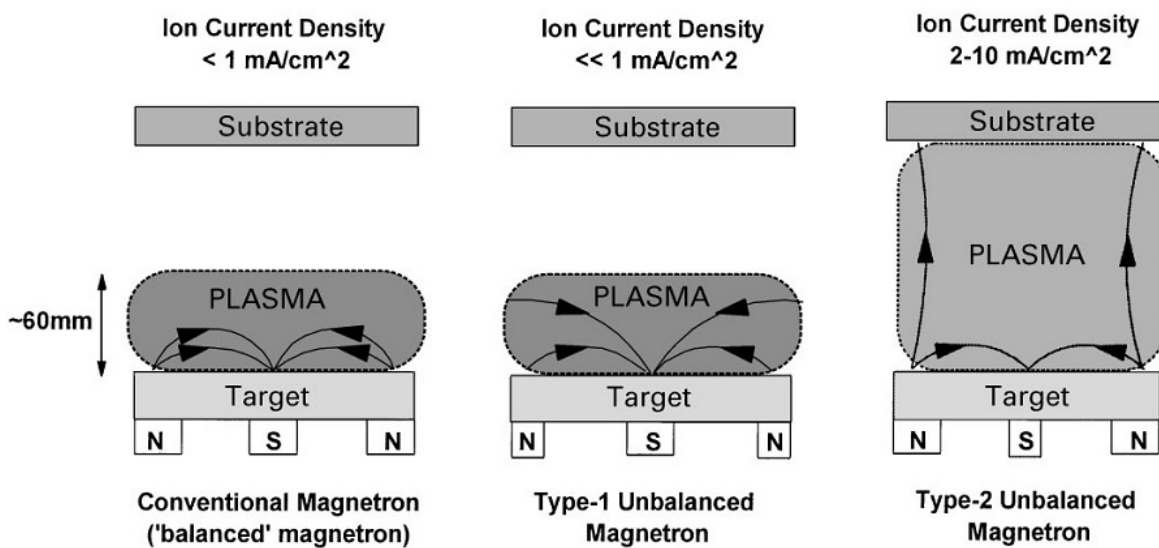
Rozdíly mezi nimi jsou nejvíce patrné z obrázku 2.3, kde je vidět, že hlavní konstrukční rozdíl je v poměru velikostí magnetů. Vyvážený magnetron má oblast plazmatu jen cca 60mm od povrchu terče. Nevyvážený magnetron typu 1 (dominantní jižní pól) má stejnou oblast plazmatu, magnetické pole znázorněné siločárami však není tak těsně uzavřené, proto se nejméně využívá. Nevyvážený magnetron typu 2 má oblast

## 2.1 Magnetronové výboje pro depozici vrstev

plazmatu rozšířenou až k substrátu, a má tak nejvyšší proudovou hustotu na substrát ze všech konfigurací, což jej činí nejvýhodnějším pro depozici vrstev.



Obrázek 2.2: Schéma zapojení stejnosměrného rovinného magnetronu. V horní části jsou nakresleny magnety. Strany katody jsou uzemněny. Příelektrodová oblast je označena jako  $s$ .  $V_{dc}$ , resp.  $I_{dc}$  reprezentují napětí, resp. proud dodané do výboje zdrojem.  $R$  je poloměr katody a  $L$  vzdálenost anody a katody. Převzato z [9].



Obrázek 2.3: Schématické znázornění typů magnetronů. Vždy nad každým typem magnetronu je napsáno jaké dosahuje hustoty proudu iontů na substrát. Dále se dá z tohoto schématu přečíst rozložení plazmy pro jednotlivé typy. Převzato z [10].

### 2.1.2 Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování

Pokud máme ve vakuové komoře umístěn magnetron společně s reaktivním plynem (reaktivní depozice), často dochází k nechtěnému jevu – obloukům. Typickým projevem těchto oblouků je vysoký proud a nízké napětí. To způsobí tvorbu kapek na terči, které pak po rozprášení mohou snížit kvalitu filmu. V 90. letech bylo dokázáno, že při použití pulzů o střední frekvenci (cca 100 Hz [18]) se dá vznik oblouků omezit. Proto se začaly používat pulzní magnetrony. Ty však mají nízkou depoziční rychlost<sup>1</sup> (typicky jednotky  $\mu\text{m/h}$ ) a nejsou moc vhodné pro komerční použití [10]. To však neplatí pro vysokovýkonové magnetrony. Vzniklo tedy vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování (HiPIMS – z *angl.* High Power Impulse Magnetron Sputtering). Moderní zdroje těchto pulzů jsou vybaveny detekcí a potlačením oblouků. Jedním z možných řešení problémů s reaktivní depozicí je nastavení velmi krátkého pulzu (méně jak 50  $\mu\text{s}$ ).

HiPIMS používá vysokovýkonové pulzy o frekvenci okolo 1kHz [22] s obvykle nízkým poměrem délky pulzu napětí k periodě. Tím vytváří plazma o vysoké hustotě. Maximum elektronové hustoty je v rozsahu  $10^{18} - 10^{19} \text{m}^{-3}$ , což řádově odpovídá střední volné dráze elektronu o délce 1 cm či méně.

Tvarem napěťových pulzů bývá většinou trojúhelník. Při náběhu pulzu se zvyšuje hustota plazmatu, a klesá tím odpor. Výboj většinou charakterizuje tvar průběhu proudu, či proudové hustoty. Z fyzikálního hlediska je pro popis chování výboje vhodnější proudová hustota, jelikož není závislá na velikosti a tvaru terče a výboje lze snadněji porovnávat.

Při použití krátkých pulzů nedochází k dosažení maxima výbojového proudu. To naznačuje, že při použití dlouhých pulzů (řádově až ms) by bylo možné pozorovat nové jevy, jako jsou například výrazné *zřed'ování* pracovního plynu, či *samorozprašování* materiálu terče.

#### Zřed'ování

Tok rozprášených částic z terče má značný vliv na pracovní plyn před terčem. Ten je totiž díky srážkám s rozprášenými atomy terče lokálně odsunut a dojde k jeho zahřátí, a tak poklesne jeho hustota v blízkosti terče. Toto snížení je ekvivalentní snížení tlaku pracovního plynu v komoře, odtud název *zřed'ování*.

Rozprášené atomy mají při opouštění terče typickou kinetickou energii několik eV. To dává velkou šanci na snížení tlaku pracovního plynu řádově až o desítky procent, zvláště je-li použit relativně vysoký tlak.

#### Samorozprašování

Po ionizaci se rozprášené atomy terče mohou podílet na rozprašování. Tomuto jevu se říká samorozprašování. V 80. letech Hosokawa ukázal [2], že jakmile zahájí vysokovýkonové rozprašování, argonový plyn již není potřeba k udržení výboje.

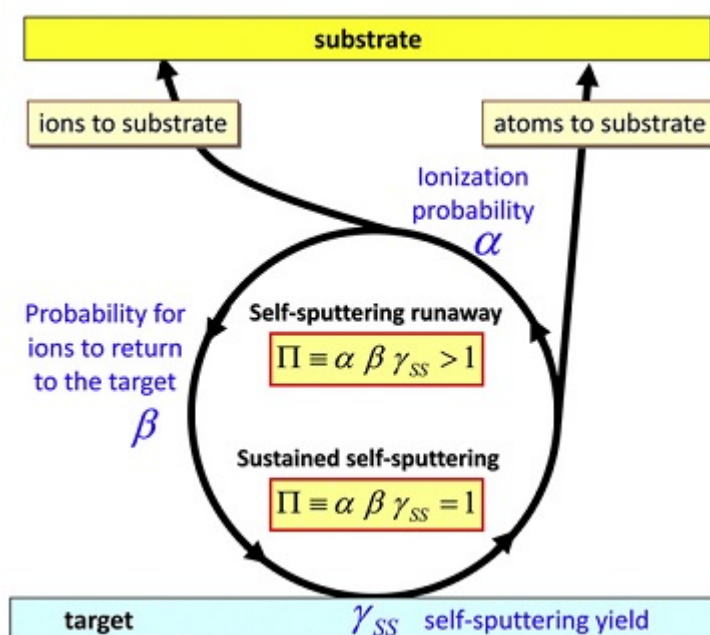
---

<sup>1</sup>Rychlost nanášení vrstev.

Podmínkou pro udržení samorozprašování je

$$\Pi \equiv \alpha\beta\gamma_{ss} = 1, \quad (2.1)$$

kde  $\alpha$  je pravděpodobnost, že rozprašený atom se stane iontem,  $\beta$  je pravděpodobnost návratu nového iontu k terči a  $\gamma_{ss}$  je samorozprašovací výtěžek. Tento stav, se nazývá stacionární (*angl.* steady-state). Pokud platí, že  $\Pi > 1$ , musí nutně docházet k úniku iontů k substrátu. Situaci mezi stacionárním stavem a únikem přehledně vysvětluje obrázek 2.4. Ve stacionárním stavu je relativní stabilita samorozprašování dosažena díky záporné zpětné vazbě.



Obrázek 2.4: Ilustrace samorozprašování. Platí-li  $\Pi = 1$ , máme ustálený cyklus samorozprašování, je-li  $\Pi > 1$  nastává únik iontů na substrát. Převzato z [2].

### Ochlazování elektronů

Během jevu nazvaného ochlazování elektronů (*angl.* electron cooling) se elektrony, které podstoupily excitační či ionizační srážku, přesouvají z chvostu rozdělovací funkce dle energie do jejího těla, což se projeví snížením střední kinetické teploty elektronů. Tento jev je velmi výrazný při rozprašování kovových terčů, jelikož excitační a ionizační meze kovů jsou podstatně nižší než tyto meze u inertních plynů využívaných jako plyny pracovní (např. argon).

### Sekundární emise elektronů

Sekundární emise elektronů je jev emise elektronu v důsledku dopadu částice (především iontu) na povrch materiálu terče. Tyto elektrony jsou považovány za hnací sílu

HiPIMS. Dodávají totiž do výboje energii, kterou získají při průchodu přes elektrické pole přielektrodové oblasti.

Podle experimentálních dat pro výtěžek sekundárních elektronů  $\gamma_{SE}$  po dopadu iontu platí [13]:

$$\gamma_{SE} \approx 0,016(\varepsilon_{iz} - 2\varepsilon_{\phi}), \quad (2.2)$$

kde  $\varepsilon_{\phi}$  je výstupní práce elektronů z kovu (tabelované hodnoty) a  $\varepsilon_{iz}$  ionizační energie dopadajícího iontu.



## 2.2 Základní metody simulace a modelování plazmatu

Díky rozvoji počítačové techniky se modelování plazmatu v poslední době stává cenným nástrojem v pochopení fyziky plazmatu a přispívá k vylepšování plazmových zařízení. Ovšem i přes tento rozvoj jsou možnosti simulace omezené – není možné řešit všechny jevy do hloubky v rámci jednoho modelu. Proto se musí zvolit jednodušší přístup a zanedbat procesy, které pravděpodobně nejsou podstatné, a naopak se musí podchytit procesy hlavní. Kvůli zanedbávání je důležité také daný model validovat, ověřit správnost činnosti modelu, a verifikovat, tj. ověřit jeho správnost srovnáním buď s jiným modelem, nebo vhodnější je porovnat získaná řešení s experimentálními výsledky.

Zjednodušené numerické modely mají potenciál předpovídat výsledky experimentů a umožňují optimalizovat zdroje plazmatu.

Pro nízkoteplotní plazma se používají tři typy přístupů k modelování:

- Fluidní modely
- Částicové modely
- Hybridní modely

Žádný z těchto přístupů nelze považovat za nejlepší. Všechny mají svá pro a proti. Volba typu modelu proto závisí na tom, jaký jev potřebujeme modelovat.

Chyby v simulacích nejsou jen numerického rázu, ale jsou také způsobeny nepřesností vstupních parametrů, což ovlivňuje spolehlivost modelu.

### 2.2.1 Fluidní model

Fluidní model popisuje plazma pomocí hustoty, střední rychlosti a střední energie jednotlivých typů částic. Tyto hodnoty jsou získány pomocí řešení rovnic kontinuity, toku a bilance energie. Obvykle mají při zanedbání elektrického pole tvar pro *elektrony*:

$$\frac{\partial \mathbf{n}_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = S_e , \quad (2.3)$$

$$-\mu_e \mathbf{E} - \nabla (n_e D_e) = \mathbf{\Gamma}_e , \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial (n_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{5}{3} \epsilon_e \mathbf{\Gamma}_e - \frac{2}{3} \kappa \nabla \varepsilon_e \right) = -e \mathbf{\Gamma}_e \cdot \mathbf{E} - n_e \varepsilon_e \nu_{iz} , \quad (2.5)$$

*ionty*:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_i = S_i , \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{\Gamma}_i + \nabla \cdot (\mathbf{\Gamma}_i \mathbf{u}_i) = \frac{Z_i e n_i}{M_i} \mathbf{E} - \frac{\nabla (n_i T_i)}{M_i} \nu_{iN} \mathbf{\Gamma}_i , \quad (2.7)$$

pole:

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \nabla \phi) = -e(Z_i n_i - n_e) . \quad (2.8)$$

Rovnice 2.3 a 2.6 jsou rovnice kontinuity, 2.4 a 2.7 rovnice toku, 2.5 bilance energie a 2.8 je Poissonova rovnice. U iontů se obvykle předpokládá, že mají stejnou teplotu jako pracovní plyn, proto se pro ně neřeší rovnice energetické bilance.

Veličiny použité v rovnicích 2.3 - 2.8 mají následující význam:  $e$  je elementární náboj,  $Z_i e$  je náboj daného typu iontů,  $\mathbf{u}_e$  je střední rychlost elektronu,  $\mathbf{u}_i$  je střední rychlost iontu,  $n_e$  se nazývá elektronová hustota a  $n_i$  se nazývá iontová hustota,  $\Gamma_e$ , které je definováno jako  $\Gamma_e = n_e \mathbf{u}_e$ , je tok elektronů,  $\Gamma_i$ , které je definováno jako  $\Gamma_i = n_i \mathbf{u}_i$ , je tok iontů,  $S_e$  jsou zdrojové procesy pro elektrony,  $S_i$  jsou zdrojové procesy pro ionty,  $m_e$  je hmotnost elektronu,  $M_i$  je hmotnost iontu,  $\nu_{iz}$  je frekvence přenosu elektronové srážkové ionizace,  $\nu_{iN}$  je srážková frekvence přenosu hybnosti iontu,  $T_e$  je elektronová teplota a  $T_i$  je iontová teplota,  $\mu_e$ , dané rovnicí  $\mu_e = \frac{e}{m_e \nu_{iN}}$ , je elektronová pohyblivost,

$D_e$ , které je definováno jako  $D_e = \frac{kT_e}{m_e \nu_{eN}}$ , se nazývá difúzní konstanta,  $\epsilon_c$ , definováno jako  $\epsilon_c = \epsilon_c(T_e)$ , je ztráta energie elektronu při tvorbě páru elektron-iont,  $\epsilon_e$ , definováno vztahem  $\epsilon_e = \frac{3}{2} kT_e$ , se nazývá střední energie elektronu,  $\kappa$ , dané vztahem  $\kappa = \frac{5}{2} n_e D_e$ , je koeficient tepelné vodivosti,  $\phi$  se nazývá elektrický potenciál,  $\mathbf{E}$ , dané rovnicí  $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ , je intenzita elektrického pole a  $\epsilon_0$  je permitivita vakua

V tomto modelu vystupuje ještě jedna rovnice, a to průměrná srážková frekvence. Má tvar

$$\nu = \frac{1}{n_{sp}} \int_0^\infty n_N \sigma_{sp,N}(\epsilon) \epsilon f_{sp}(\epsilon) d\epsilon , \quad (2.9)$$

kde  $n_{sp}$  je hustota daného typu částic,  $n_N$  je hustota neutrálního plynu,  $\sigma_{sp,N}(\epsilon)$  je srážkový účinný průřez,  $\epsilon$  relativní kinetická energie a  $f_{sp}$  je rozdělovací funkce částic podle energie (*angl.* Electron Energy Distribution Function, zkratka EEDF), jejím příkladem je maxwellovská nebo druyvesteynovská rozdělovací funkce. Nejčastěji se však ve fluidních modelech používá maxwellovská rozdělovací funkce ve tvaru

$$f_{sp}(\epsilon, kT) = 2 \sqrt{\frac{\epsilon}{\pi (kT)^3}} \cdot e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (2.10)$$

kde  $kT$  je termodynamická teplota přenásobená Boltzmannovou konstantou  $k = 1,381 \cdot 10^{-23}$  J/K.

Hlavní výhodou fluidního modelu je jeho výpočetní rychlost, přičemž model je především vhodný pro výboje ve vyšších tlacích, kde nelokální efekty nejsou tak důležité vzhledem k častým kolizím [11].

### 2.2.2 Částicové modely

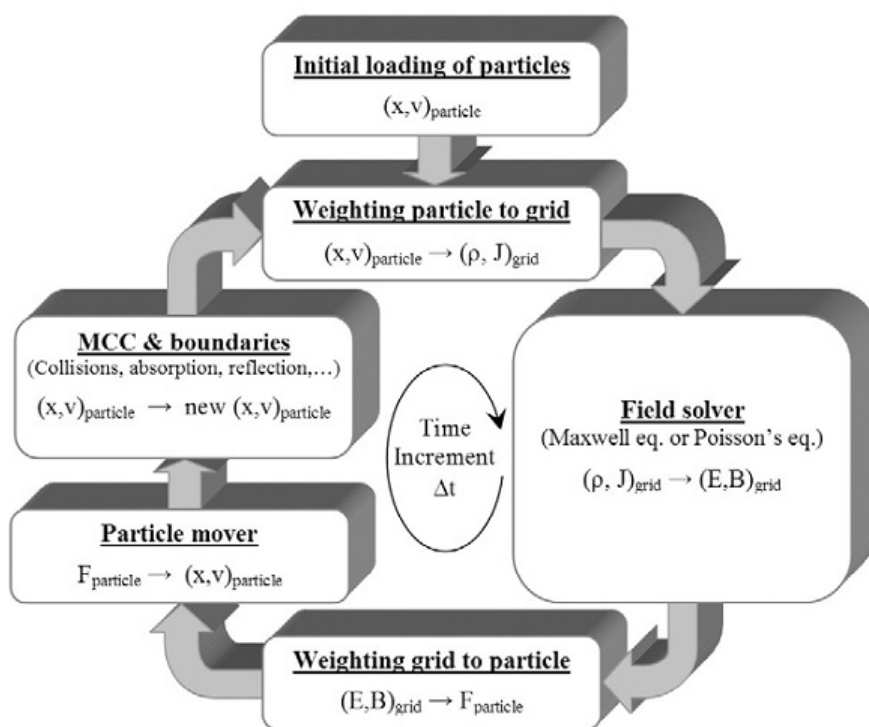
Jejich příkladem jsou modely typu Particle-in-cell (dále jen PIC). Tyto modely popisují plazma pomocí tzv. *superčástic*, kdy každá superčástice zastupuje  $10^5$  až  $10^7$  skutečných částic. Jejich počet se může při výpočtu měnit, viz např. [12]. Pro výpočet pohybu superčástic se používají Newton – Lorentzovy rovnice pohybu a Maxwellovy rovnice. Typicky se simulují pouze elektrony a ionty. U elektricky neutrálních částic (např. pracovní plyn) se předpokládá rovnoměrné rozložení na pozadí. Jednotlivé kroky modelu (znázorněné na obr. 2.5) jsou následující:

1. Počáteční načtení poloh a typů částic (buď ze souboru, nebo jsou tyto polohy určeny z tlaků)
2. Vážení částic k mřížce, kdy děláme průměty těchto částic na uzlové body mřížky a určujeme tak elektrický náboj připadající na uzel sítě
3. Použití řešiče na elektrostatické nebo elektromagnetické pole (tímto řešičem může být např. metoda konečných prvků)
4. Vážení mřížky k částici, kdy děláme opačný postup k bodu 2, tj. ze znalosti polí v uzlových bodech určujeme sílu působící na nabitě částice
5. Pohnutí s částicemi dle sil, které na částice působí
6. Provedení srážkových procesů metodou Monte-Carlo a započtení interakcí částic s hranicemi simulční oblasti.

Body 2 až 6 se opakují za inkrementace času.

PIC je mnohem detailnější než fluidní model avšak za cenu delšího výpočetního času, který je přímo úměrný počtu superčástic. Existují však snahy, jak dobu běhu programu zkrátit (např. delší časové kroky).

PIC je vhodný pro simulace procesů za nízkých tlaků (řádově jednotky Pa).



Obrázek 2.5: Kroky modelu PIC. Kroky jsou následující: počáteční načtení částic, vážení částice do mřížky, řešení elektrostatičkého či elektromagnetického pole, vážení mřížky k částici, pohyb částicemi, Monte-Carlo srážky a okrajové podmínky (absorpcce, odraz,...). Všechny kroky kromě prvního se opakují za zvyšování času. Převzato z [11].

### 2.2.3 Hybridní model

Je to mezistupeň mezi fluidním modelem a PIC (i v délce výpočtu). Ionty se modelují jako tekutina (*angl.* fluid) a elektrony jako částice, popř. obráceně (pokud se elektrony chovají podle Maxwellovy rozdělovací funkce). Kritická část je tedy přechod mezi výše zmíněnými modely. Požadavky na časový krok se v těchto simulacích liší.

## 2.3 Modely pro vysokovýkonové pulzní magnetronové výboje

V současné době se pro vysokovýkonové pulzní magnetronové výboje používají dva různé modely:

- Parametrický model – používá sadu vstupních parametrů, které jsou v něm měněny v jistém intervalu hodnot, k testování chování výboje (tj. jeho odpovědi na změnu vstupních parametrů), je však navržen jen k popisu stacionárních dějů.
- Nestacionární model – jedná se o fluidní model popisující časový vývoj objemově průměrovaných plazmových charakteristik (např. koncentrace částic, jejich teplot, apod.).

### 2.3.1 Parametrický model

Parametrický model se též nazývá modelem fenomenologické rovnováhy, popř. stacionárním modelem (*angl.* steady-state).

Základy tohoto modelu byly vyvinuty v nedávné době Davidem J. Christiem [5]. Dále se však rozšiřuje a vylepšuje. Základem vylepšení provedeného Vlčkem a Burcalovou [21] je rozšíření o rovnici rovnováhy pro sekundární elektrony, což umožnilo vyhodnotit množství rozprášených ionizovaných atomů mířících zpět k terči.

Testovacím parametrem je podíl toku iontů terče v celkovém toku částic zpět na terč  $m_t$  definovaný vztahem

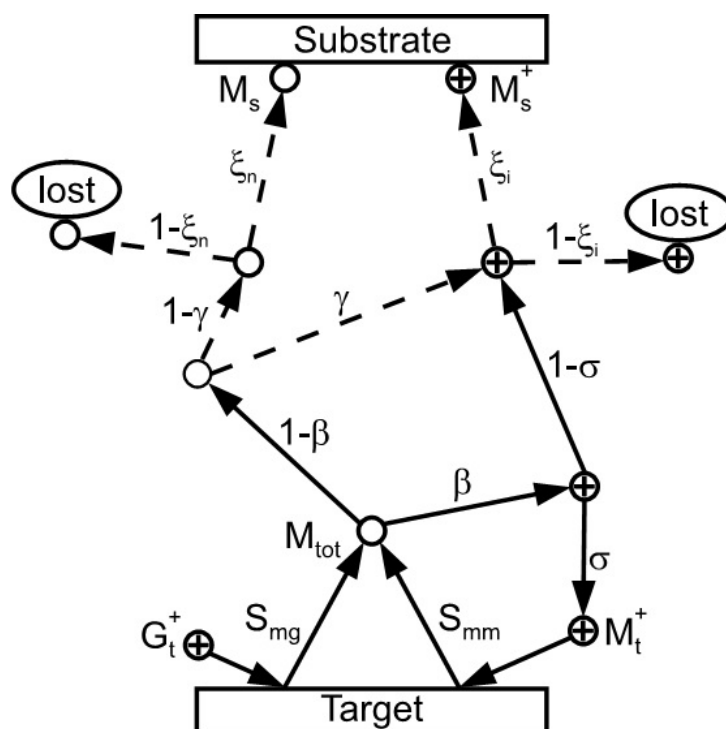
$$m_t = \frac{M_t^+}{G_t^+ + M_t^+} , \quad (2.11)$$

kde  $G_t^+$  je tok iontů pracovního plynu na terč a  $M_t^+$  je tok iontů rozprášeného materiálu zpět na terč. Pro parametr  $m_t$  musí platit

$$0 \leq m_t \leq 1 . \quad (2.12)$$

Hodnota tohoto parametru je spojena s výkonovou hustotou, rozprašovacími výtěžky terče, ionizační energií rozprášených atomů a ionizačními účinnými průřezy.

V následujícím textu dolní index  $mg$  značí, že se jedná o částice pracovního plynu a  $mm$  o materiál terče. Pro potřebu tohoto modelu je nutno znát, jak vyplývá z obrázku 2.6, rozprašovací výtěžky  $S_{mg}$  a  $S_{mm}$ , koeficienty sekundární elektronové emise  $\gamma_{mg}$  a  $\gamma_{mm}$ , ionizační energie pracovního plynu a atomů materiálu terče a parametry charakterizující ztráty sekundárních elektronů před terčem  $d_e$  a  $r$ . Parametr  $d_e$  je podíl sekundárních elektronů ztracených při difúzi na substrát a na stěny vakuové komory před vytvořením elektron-iontového páru a  $r$  představuje pravděpodobnost zpětného zachycení elektronu na terči. Dále je potřeba vědět ionizační procesy poblíž terče ( $k_g$ ,  $k_m$ ) a v plazmovém výboji ( $\gamma$ ) a relativní ztráty iontů a neutrálních částic materiálu terče při jejich přenosu na substrát ( $\xi_i/\xi_n$ ).



Obrázek 2.6: Ilustrace toků ve fenomenologickém modelu.  $G_t^+$ , resp.  $M_t^+$  jsou celkové toky iontů materiálu terče a pracovního plynu na terč.  $S_{mg}$  a  $S_{mm}$  jsou rozprašovací výtěžky pracovního plynu a materiálu terče.  $M_{tot}$  je celkový tok atomů kovu z terče. Parametr  $\beta$  je stupeň ionizace rozprášených atomů před terčem. Parametr  $\sigma$  je zlomek ionizovaných atomů proudících zpět na terč. Parametr  $\gamma$  je stupeň přídavné ionizace rozprášených atomů v objemu plazmatu, a  $\theta_n$  a  $\theta_i$  jsou transportní parametry neutrálních částic a iontů terče. Převzato z [21].

Tyto znalosti umožňují parametrickému modelu vypočítat podíl ionizovaných rozprášených atomů tekoucích zpět na terč ( $\sigma$ ), stupeň ionizace rozprášených atomů ( $\beta$ ), normalizovaný rychlostní koeficient ( $\alpha$ ) úměrný poměru depoziční rychlosti k hustotě výkonu dodaného na terč a ionizovaný podíl atomů terče v toku na substrát .

V porovnání s experimentálními výsledky se ukazuje, že parametr  $s$ , který charakterizuje sekundární emisi elektronů vyvolanou dopadem iontu materiálu terče, musí mít pro měď hodnotu znatelně vyšší než 0,5. To je dáno pravděpodobným příspěvkem kinetické emise elektronů ze „znečištěného“ terče nebo pravděpodobnými vyššími excitovanými stavy iontů  $Cu^+$  [21].

### 2.3.2 Nestacionární model

Jedná se o model založený na globálním popisu plazmatu, tedy o fluidní model, přičemž hustoty částic i jejich toky jsou integrovány přes makroskopické objemy.

Jak je vidět na obrázku 2.7, v modelu jsou definovány dvě zóny (tj. makroskopické objemy) popisující válcově symetrický výboj (v cylindrických souřadnicích  $r$  a  $z$ ). Zóna I zastupuje plazma o vysoké hustotě, kde elektrony jsou udržovány v oblasti silným magnetickým polem, což zajišťuje dostatečnou ionizaci atomů. Zóna II zastupuje zbytek objemu výboje, kde je obvykle velmi slabé magnetické pole, a tedy plazma má nižší hustotu.

O rozměrech zón se dle [14] předpokládá:

- Zóna I: má tvar poloviny toroidu o rozměrech  $r_{rt} = w_{rt} = d_t/4$  a  $l = w_{rt}/2$ . Význam těchto veličin je znázorněn na obr. 2.7, tedy  $r_{rt}$  je vzdálenost středu Zóny I do osy vakuové komory,  $w_{rt}$  je průměr Zóny,  $d_t$  je průměr terče,  $l$  je tloušťka Zóny
- Zóna II: je určena vzdáleností  $L$  (od terče k substrátu) a poloměrem vakuové komory  $R$

Hraniční podmínky jsou rozděleny na čtyři skupiny:

1. Povrch mezi zónou I a terčem  $S_t$
2. Povrch mezi zónami  $S_b$
3. Stěny komory  $S_r$ , pro něž platí  $r = R$
4. Hranice u substrátu  $S_z$ , která je ve vzdálenosti  $z = L$  od terče

Tento model předpokládá, že rozdělení hustoty částic se dá rozdělit na dvě části. Jednou je závislost pouze na čase, druhá je závislost pouze na poloze v prostoru, tj.

$$N(\mathbf{x}, t) = n(t)\tilde{n}(\mathbf{x}) . \quad (2.13)$$

Tento model sleduje elektrony, ionty a atomy pracovního plynu i terče, pro které musí platit zákon zachování počtu částic (*angl.* particle conservation equation)

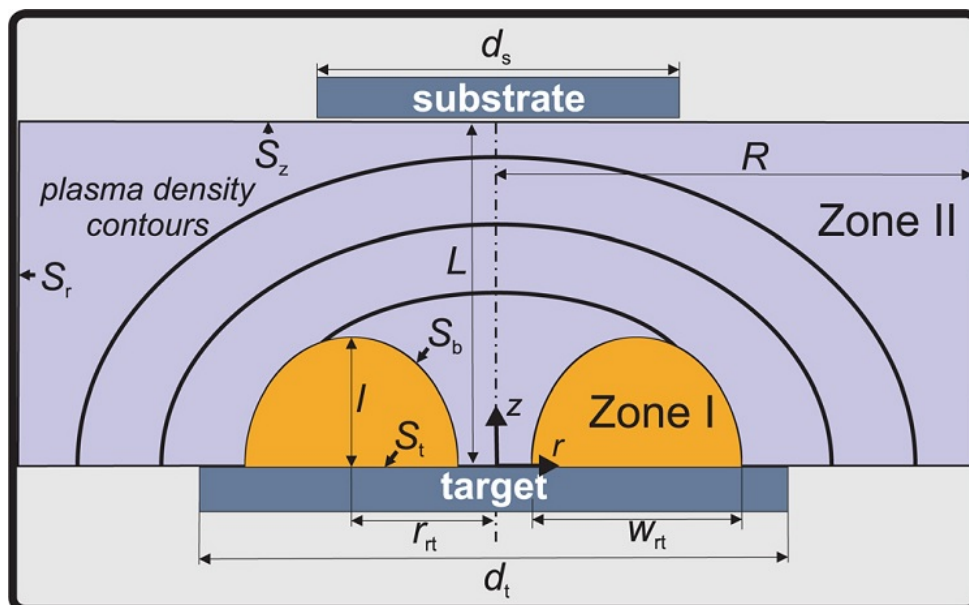
$$\tilde{V} \frac{dn(t)}{dt} + \sum_i n(t)u_i(t)\tilde{S}_i = \sum_c n_{c1}(t)n_{c2}(t)\mathcal{K}_c(t)\tilde{V}_c , \quad (2.14)$$

kde  $u_i$  je průměrná rychlost částice přes  $i$ -tou hranici,  $n_{c1}$  a  $n_{c2}$  jsou hustoty kolidujících částic a  $\mathcal{K}_c$  je odpovídající rychlostní srážková konstanta (*angl.* collision rate constant). Zbývající členy jsou integrály definované vztahy

$$\tilde{V} = \int_V \tilde{n}(\mathbf{x})d\mathbf{x} , \quad (2.15)$$

$$\tilde{S}_i = \int_{S_i} \tilde{n}(\mathbf{x})d\mathbf{x} , \quad (2.16)$$

$$\tilde{V}_c = \int_V \tilde{n}_{c2}(\mathbf{x})\tilde{n}_{c2}(\mathbf{x})d\mathbf{x} , \quad (2.17)$$



Obrázek 2.7: **Ilustrace geometrie modelu.** Oblast mezi substrátem a terčem je rozdělena do dvou zón. Oblast vysoké hustoty plazmatu (Zóna I) je označena okrovou barvou. Zbýlá část simulační oblasti tvoří Zónu II. Plasma density contours jsou vrstevnice hustoty plazmatu. Převzato z [14].

kde  $\tilde{n}$  je funkce prostorového rozložení příslušných částic.

V tomto modelu se částice dělí na následující skupiny:

- Elektrony:
  1. Termalizované - charakterizovány pomocí elektronové rozdělovací funkce dle energie, značka  $n_e$
  2. Rychlé - nebo-li též sekundární, počáteční energii dostávají z přielektrodové oblasti, značka  $n_{ef}$
- Atomy plynu:
  1. Termalizované - teplota  $T$ , značka  $n_g$
  2. Rychlé - přímá rychlost  $u_s$  odpovídá průměrné rychlosti rozprášených atomů z terče, značka  $n_{gf}$
  3. Jednou ionizované - značka  $n_{gi}$
- Atomy kovu:
  1. Termalizované - teplota  $T$ , značka  $n_m$
  2. Rychlé - přímá rychlost  $u_s$  odpovídá průměrné rychlosti rozprášených atomů z terče, značka  $n_{mf}$



3. Jednou ionizované, značka  $n_{mi}$

Pro Zónu I je použita konstantní funkce rozložení hustoty

$$\tilde{n}_C(r, z) = 1 \quad (2.18)$$

pro oba typy elektronů, termalizované atomy a ionty. Důvodem této konstantnosti je relativně malý rozměr této zóny, jejíž objem se vypočítá podle vztahu

$$V_I = \pi^2 r_{ri} l^2 . \quad (2.19)$$

Naopak Zóna II má objem větší a dá se určit dle rovnice

$$V_{II} = \pi R^2 L - V_I = \pi R^2 L - \pi^2 r_{ri} l^2 . \quad (2.20)$$

Přesto se stále pro hustotu termalizovaných atomů plynu používá konstantní funkce (kvůli rovnováze mezi přítokem a odtokem danou tlakem a difúzí na stěny). Ovšem prostorové rozložení hustoty nabitých částic a ohřátých kovových atomů má už předpis nekonstantní, a to

$$\tilde{n}_p^{II}(r, z) = \left[ - (1 - h_r) \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \left[ 1 - (1 - h_z) \left( \frac{z}{L} \right)^2 \right] , \quad (2.21)$$

kde  $h_r$  a  $h_z$  jsou stěnové parametry. Pro ionty byly analytické vztahy určeny Godyakem a Maximovem [1]. Mají podobu

$$h_{r,i} = 0,8 \left( 4 + \frac{R}{\bar{\lambda}_i} \right)^{-1/2} , \quad (2.22)$$

$$h_{z,i} = 0,86 \left( 2 + \frac{L}{\bar{\lambda}_i} \right)^{-1/2} . \quad (2.23)$$

Pro termalizované atomy rozprašovaného kovu byly využity vztahy vycházející z hraničních podmínek pro difuzi

$$h_{r,m} = \left[ 1 + \frac{2R\gamma}{\pi\bar{\lambda}_m(2-\gamma)} \right]^{-1} , \quad (2.24)$$

$$h_{z,m} = \left[ 1 + \frac{2L\gamma}{\pi\bar{\lambda}_m(2-\gamma)} \right]^{-1} . \quad (2.25)$$

V těchto posledních čtyřech vztazích platí

$$\bar{\lambda} = \frac{kT}{\sqrt{2}p\sigma} , \quad (2.26)$$

přičemž  $\bar{\lambda}$  je průměrná střední volná dráha iontu nebo atomu,  $k$  je Boltzmannova konstanta,  $T$  je termodynamická teplota plynu,  $\gamma$  je odpovídající koeficient přilnavosti

(angl. sticking coefficient) a  $\sigma$  je účinný průřez přenosu náboje mezi ionty a atomy plynu nebo elastický účinný průřez mezi atomy kovu a plynu.

Prostorové rozložení hustoty rychlých neutrálních atomů v Zóně I ( $\tilde{n}_E^I$ ), resp. v Zóně II ( $\tilde{n}_E^{II}$ ) je aproximováno funkcí

$$\tilde{n}_E^I(r, z) = f(r, z) \exp \left[ \frac{-\sqrt{(r - r_{rt})^2 + z^2}}{\lambda_f^I} \right], \quad (2.27)$$

resp.

$$\tilde{n}_E^{II}(r, z) = f(r, z) \exp \left[ \frac{-\sqrt{(r - r_{rt})^2 + z^2} - l}{\lambda_f^{II}} \right], \quad (2.28)$$

kde funkce  $f(r, z)$  má tvar

$$f(r, z) = \int_0^{2\pi} \int_{r_{rt} - \frac{w_{rt}}{2}}^{r_{rt} + \frac{w_{rt}}{2}} \frac{3z^3 r_0 dr_0 d\phi}{(r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos \phi + z^2)^{2,5}}. \quad (2.29)$$

Pro jednoduchost se předpokládá, že atomy a ionty mohou být charakterizovány konstantní teplotou  $T$ , poté můžeme použít jediné rozložení termalizovaných elektronů z rovnice zachování energie elektronů

$$\tilde{V}_{n_e} \frac{d\varepsilon_e(t)}{dt} + \sum_i \mathcal{E}_i(t) = \sum_c n_{c1}(t) n_{c2}(t) \mathcal{K}_c(t) \tilde{V}_c, \quad (2.30)$$

kde hustota energie elektronů  $\varepsilon_e$  je definována vztahem

$$\varepsilon_e = \frac{3}{2} n_e k T_e, \quad (2.31)$$

přitom  $\mathcal{E}_i$  je celkový energetický tok přes hranice zón,  $n_{c1}$  a  $n_{c2}$  jsou hustoty interagujících částic v binární srážce a  $\mathcal{K}_c$  je odpovídající poměrová konstanta pro změnu hustoty energie při srážce.

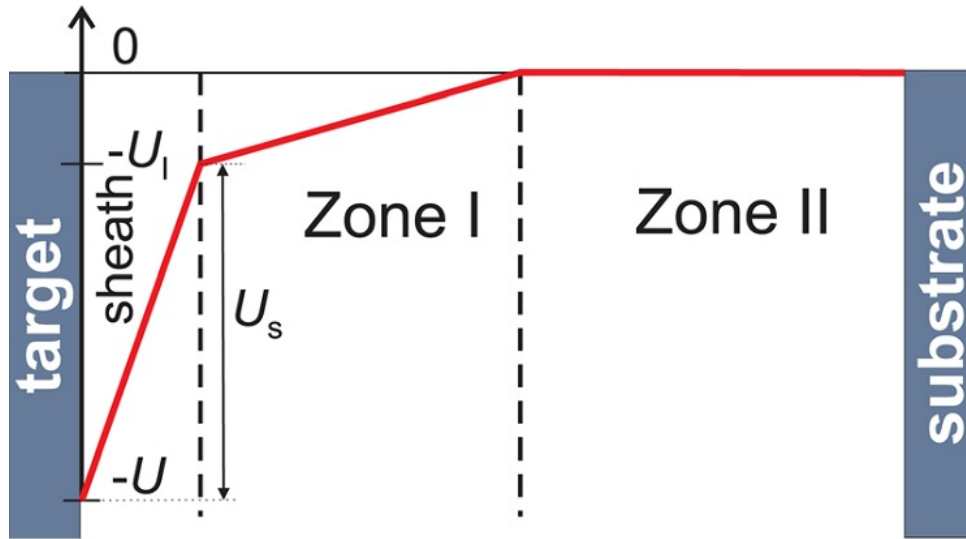
Elektrostatický potenciál v Zóně II je volen nulový. Pro Zónu I se předpokládá konstantní elektrické pole definované potenciálovým spádem  $U_I$  mezi potenciálem Zóny II a potenciálem přielektrodové oblasti. Potenciálový spád  $U_s$  přes přielektrodovou oblast je definován vztahem

$$U_s = U - U_I, \quad (2.32)$$

kde  $U$  je napětí na terči, viz obrázek 2.8.

Difúzní koeficient pro všechny částice je obecně vyjádřen jako

$$D = \frac{8}{\pi} \lambda \bar{v}, \quad (2.33)$$



Obrázek 2.8: **Ilustrace elektrostatického potenciálu v modelu.** V Zóně II se předpokládá nulový potenciál, v Zóně I je potenciálový pokles  $U_I$ , a tedy potenciálový pokles v přielektrodeové oblasti je podle vztahu  $U_s = U - U_I$ . Převzato z [14].

kde  $\lambda$  je střední volná dráha difundujících částic a  $\bar{v}$  je jejich tepelná rychlost. Aby se zabránilo divergenci difúzního koeficientu při nízkých tlacích, je nastaveno jeho maximum jako

$$D = \frac{1}{4} \bar{v} l , \quad (2.34)$$

což odpovídá tepelnému toku částic.

Pro pracovní plyn se předpokládá nulový koeficient přilnavosti k povrchu stěn vakuové komory. Ionty plynu se při dotyku se stěnou neutralizují a jsou vráceny zpět do objemu plazmatu. Vzduch vysávaný vakuovou aparaturou, která je v modelu realizována dírou do vakua, je soustavně doplňován, takže tlak zůstává konstantní.

Toky termalizovaných atomů kovu jsou dány průměrnou rychlostí  $\bar{v}_m/2$ , kde  $\bar{v}_m$  je tepelná rychlost kovových atomů. Toky mezi zónami pro atomy terče jsou aproximovány pomocí difúzní rovnice

$$M_b = \frac{D_m}{l} (n_m^I - n_m^{II}) S_b , \quad (2.35)$$

kde difúzní koeficient  $D_m$  je vypočten za pomoci vztahu pro střední volnou dráhu

$$\lambda_m^I = \frac{1}{\sqrt{2} (n_g^I \sigma_{mg} + n_m^I \sigma_{mm})} , \quad (2.36)$$

kde  $\sigma_{mg}$  a  $\sigma_{mm}$  jsou účinné průřezy pro elastický rozptyl atomů terče na pracovním plynu a na atomech terče. Vztah pro atomy pracovního plynu je dán analogicky.

Tok rozprášených atomů terče je dán vztahem

$$M_{f,t} = -G_{i,t} Y_g (U_s) - M_{i,t} Y_m (U_s) , \quad (2.37)$$

kde  $G_{i,t}$ , resp.  $M_{i,t}$  je tok pracovního plynu, resp. kovových atomů k terči,  $Y_g$ , resp.  $Y_m$  je rozprašovací výtěžek pracovního plynu, resp. iontů terče, který závisí na energii iontu získané v přielektrodové oblasti. Všechny rozprášené částice mají stejnou rychlost  $u_s$  vypočítanou ze vztahu

$$u_s = \sqrt{\frac{\varepsilon_{sb}}{m_m}} , \quad (2.38)$$

kde  $\varepsilon_{sb}$  je povrchová vazbová energie. Nahradíme-li  $u_s$  za průměrnou rychlost, pak jsou všechny ostatní toky rychlých atomů dány vztahem

$$F_i = n(t)u_i(t)\tilde{S}_i \quad (2.39)$$

za použití příslušných hustot a integrálů distribučních funkcí.

Předpokládá se tzv. Bohmova rychlost pro ionty na rozhraní plazmatu a přielektrodové vrstvy. Ta je definovaná vztahem

$$u_B = k_{bv} \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}} , \quad (2.40)$$

kde  $m_i$  je hmotnost iontu a bezrozměrný faktor  $k_{bv}$  je dán rovnicí

$$k_{bv} = \left[ \frac{kT_e}{2} \int_0^\infty \frac{g_e(\varepsilon)}{\varepsilon} d\varepsilon \right]^{-0,5} , \quad (2.41)$$

kde  $g_e(\varepsilon)$  je rozdělovací funkce elektronů v závislosti na jejich energii.

Tok kovových iontů mezi zónami je vyjádřen jako

$$M_{i,b} = \frac{D_{mi}}{l} \left( n_{mi}^I - n_{mi}^{II} - n_{mi} \frac{eU_I}{kT} \right) S_b + R_{mf,i} \exp\left( -\frac{eU_I}{m_m u_s^2} \right) , \quad (2.42)$$

kde je také započítán potenciálový spád přes Zónu I ( $U_I$ ). Poslední člen této rovnice vyjadřuje rychlé ionty, které jsou schopné přejít přes potenciálovou bariéru Zóny I,  $R_{mf,i}$  je totiž rychlost generování iontů pocházejících od rychlých neutrálních atomů.

Časově závislá střední volná dráha iontů je určena podle vztahu

$$\lambda_{mi}^I = \left[ \sqrt{2} \left( n_g^I \sigma_{mg,ct} + n_m^I \sigma_{mm,ct} \right) + \frac{v_{ii,C}}{\bar{v}_m} \right]^{-1} , \quad (2.43)$$

kde  $\sigma_{mg,ct}$ , resp.  $\sigma_{mm,ct}$ , je účinný průřez přenosu náboje získatelný např. v [17]. Coloumbovská srážková frekvence  $v_{ii,C}$  je určena podle vztahu

$$v_{ii,C} = \frac{\left( n_{gi}^I + n_{mi}^I \right)^{3/2} e^4 \ln \Lambda}{12\pi^{3/2} \varepsilon_0^2 \left( n_{gi}^I m_g + n_{mi}^I m_m \right)^{1/2} (kT)^{3/2}} , \quad (2.44)$$

kde  $\ln \Lambda = 10$ , viz [15]. Pro ionty plynu platí analogické vztahy.

Hustoty elektronů jsou vypočteny podle podmínek kvazineutality. Jejím příkladem je

$$n_e = n_{gi} + n_{mi} - n_{ef} . \quad (2.45)$$

Pro vyjádření toků termalizovaných elektronů mezi zónami se používá součin elektronového toku a průměrné přenášené energie  $k_w kT_e$ , kde parametr  $k_w$  je dán vztahem

$$k_w = \frac{\int_0^\infty \varepsilon^{1,5} g_e(\varepsilon) d\varepsilon}{kT_e \int_0^\infty \varepsilon^{0,5} g_e(\varepsilon) d\varepsilon} . \quad (2.46)$$

Přesun termalizovaných elektronů mezi zónami je popsán rovnicí difúze

$$E_b = \frac{D_e}{l} \left( n_e^I - n_e^{II} + n_e^I \frac{eU_I}{kT_e^I} \right) S_b , \quad (2.47)$$

kde platí pro difúzní koeficient

$$D_e = \frac{1}{\omega_{ge} \tau_c} \frac{kT_e^I}{eB} , \quad (2.48)$$

kde součin  $\omega_{ge} \tau_c$  je konstantní vstupní parametr roven 16, což odpovídá Bohmově difúzi elektronů [14].

Tok sekundárních elektronů z terče je

$$E_{f,t} = -(1 - r) (G_{i,t} \gamma_g + M_{i,t} \gamma_m) , \quad (2.49)$$

kde  $\gamma_g$ , resp.  $\gamma_m$  je koeficient sekundární emise elektronů pracovního plynu, resp. terčového materiálu a  $r$  je koeficient zpětného zachycení elektronů zpět na terči. Předpokládá se, že sekundární elektrony se vyskytují pouze v Zóně I, proto jejich tok do Zóny II je nulový.

Dále je v modelu použit vztah pro potenciálový spád v Zóně I

$$\frac{dU_I}{dt} = \frac{eI^2}{\varepsilon_0 V_I} (G_{i,b} + M_{i,b} - G_{i,t} - M_{i,t} - E_b + E_{f,t}) . \quad (2.50)$$

Všechny binární srážky jsou popsány vztahem

$$R_c = n_{c1} n_{c2} \mathcal{K}_c , \quad (2.51)$$

což odpovídá třetímu členu v rovnici 2.14. Pro různé typy srážek (ionizace, excitace a elastický rozptyl) jsou různé koeficienty  $\mathcal{K}_c$ . Pro např. ionizaci plynu je srážková konstanta stanovena rovnicí

$$K_{ef,gi} = M \frac{N_{gi}}{\tau n_g} , \quad (2.52)$$

kde  $N_{gi}$  je průměrné množství iontů plynu vytvořených jedním sekundárním elektronem,  $\tau$  je průměrná doba života sekundárního elektronu a  $n_g$  je hustota plynu. Koeficient  $M$  hodnotí množství generovaných iontů jedním rychlým elektronem během vytváření elektron-iontového páru v přielektrodové oblasti.

Tento model potřebuje mít dodané parametry komory a geometrie terče, magnetické indukce  $B$  a průběh napětí na terči  $U(t)$ . Dále se potřebují data charakterizující chování

### 2.3 Modely pro vysokovýkonové pulzní magnetronové výboje

---

materiálu terče, rozprašovací výtěžky, koeficienty sekundární emise elektronů a částic plazmatu, srážkové účinné průřezy a rozdělovací funkce elektronů dle energie. Musí se navolit parametry  $s$  a  $r$ . Parametr  $s$  je definován vztahem

$$\gamma_m = s\gamma_g , \quad (2.53)$$

kde za  $\gamma_g$  se dosadí empirický vztah pro emisi sekundárních elektronů (viz. rovnice 2.2). Parametr  $r$  je podle [14] závislý na tlaku pracovního plynu a na geometrii magnetického pole.

# Kapitola 3

## Cíle

Cíle této bakalářské práce jsou:

1. Studium literatury o magnetronovém naprašování a jeho modelování pomocí globálních zákonů zachování.
2. Seznámení se s nestacionárním modelem pro vysokovýkonové pulzní magnetronové rozprašování. Doplnit model o potřebné parametry pro alespoň dva různé materiály terče.
3. Provést počítačové simulace vysokovýkonových pulzních magnetronových výbojů s různými materiály terče. Prozkoumat vliv vstupních parametrů modelu na sledované výbojové charakteristiky. Provést kvalitativní diskuzi výsledků.

# Kapitola 4

## Zvolené metody zpracování

### 4.1 Rozšíření modelu

Do modelu byly přidány prvkové konstanty (viz tabulka 4.1), rozprašovací výtěžky (viz kapitola 4.2) a veličiny z databáze Mezinárodní agentury pro atomovou energii (*angl.* Evaluated Nuclear Data File, zkratka ENDF). Z ní byly vytvořeny parametrové knihovny (\*.mat), které jsou použity ve funkcích typu *QelkovENDF.m<sup>2</sup>* (elastické účinné průřezy), *QexkovENDF.m<sup>2</sup>* (excitační účinné průřezy) a *QizkovENDF.m<sup>2</sup>* (ionizační účinné průřezy). Další knihovny typu *EF30\_kov.mat*, obsahující parametry rychlých a termalizovaných elektronů, byly vytvořeny pomocí k tomu určené funkce *EFgentable.m*, která je součástí modelu, a knihovny typu *QatomArkov.mat<sup>2</sup>*, obsahující data pro účinné průřezy pro elastické srážky a pro přenos náboje mezi argonem a kovem, byly vytvořeny za pomoci již předdefinované matice *QatomArCu.mat*, obsahující tatáž data, ale jen pro měď, vzorce (3.4.28) z [15] a údaje z tabulky uvedené v [17] (viz tabulka 4.1).

Při rozšiřování modelu byla zachována stávající struktura programu.

---

<sup>2</sup>Vždy za slovo *kov* v názvu podprogramu se zvolí jedna ze tří variant přidávaných chemických značek prvků – Ta, Ti, Zr.



## 4.2 Program pro výpočet rozprašovacích výtěžků

Tabulka 4.1: **Prvkové konstanty a jejich zdroje.** Poloměr atomu je udáván pro kovy z empirických dat, pro argon jsou to vypočtené hodnoty, protože empirická hodnota není k dispozici. Konstanty pro měď a pro argon jsou jen pro porovnání.

Prvek	Výstupní práce [eV]	Rel. atom. hmotnost [-]	Hustota [kg · m <sup>3</sup> ]	Poloměr atomu [m]	Účinný průřez výměny náboje [m <sup>2</sup> ]	Ionizační energie [eV]
Zr	4,30	91,22	6511	0,155·10 <sup>-9</sup>	20·10 <sup>-19</sup>	6,63
Ti	4,45	47,87	4507	0,140·10 <sup>-9</sup>	19·10 <sup>-19</sup>	6,83
Ta	4,10	180,95	16650	0,145·10 <sup>-9</sup>	17·10 <sup>-19</sup>	7,55
Cu	4,40	63,55	8940	0,135·10 <sup>-9</sup>	16·10 <sup>-19</sup>	7,73
Ar	–	39,95	1616	0,071·10 <sup>-9</sup>	6·10 <sup>-19</sup>	15,80
Zdroj	[3]	[23]	[23]	[23]	[17]	[19]

## 4.2 Program pro výpočet rozprašovacích výtěžků

K výpočtu rozprašovacích výtěžků byl použit program SDTrimSP [6], který je založen na bázi atomárních srážek modelu Monte-Carlo.

Pro tento nestacionární model je zapotřebí mít funkční předpis závislosti rozprašovacího koeficientu na energii. Ta se hledá ve tvaru

$$y = a \cdot (x - b)^c , \quad (4.1)$$

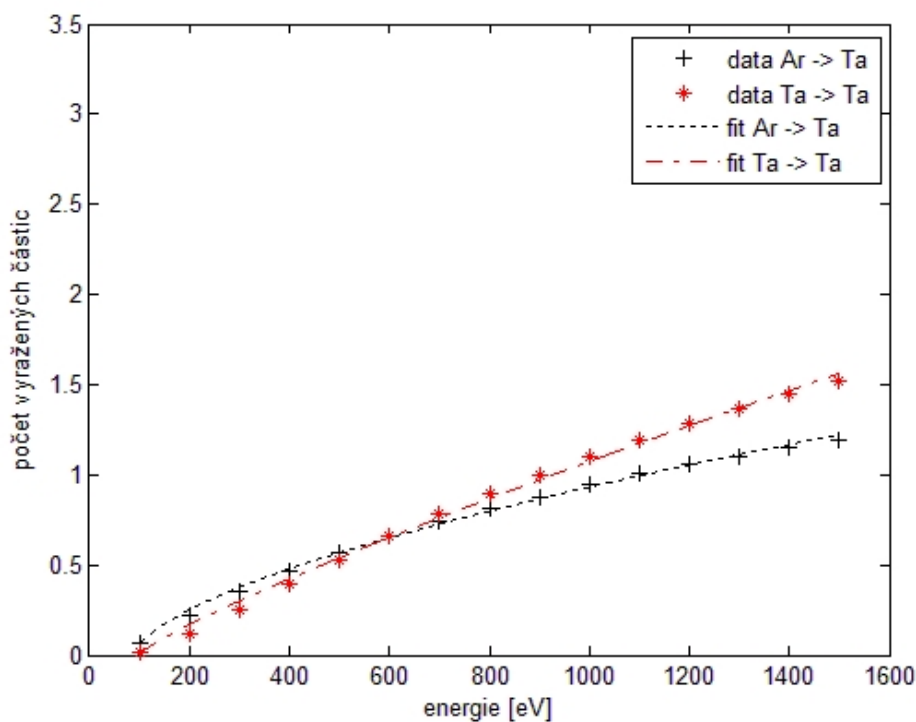
v čemž pomohl nástroj *cftool* (určený k prokládání křivek zadanými body) v systému MATLAB díky možnosti volby vlastního typu rovnice. Během výpočtu fitu byla nastavena 95% přesnost výpočtu. V této rovnici je  $y$  rozprašovací koeficient,  $x$  energie dopadající částice a  $b$  má význam minimální energie nutné pro rozprášení.

### 4.2.1 Tantal

V následující tabulce 4.2 jsou vypočtené hodnoty parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $c$  pro tantal rozprašovaného ionty tantalu a argonu. Jejich předpis je uveden v rovnici 4.1. Dle obrázku 4.1 lze rozpoznat přijatelnou kvalitu fitů.

Tabulka 4.2: Hodnota parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $c$  prokládané křivky 4.1 při rozprašování tantalu. Uvedené hodnoty jsou vždy na maximální počet platných číslic neovlivněných chybou.

Srážka	$a$	$b$	$c$
Ta $\rightarrow$ Ta	0,003304	100	0,85
Ar $\rightarrow$ Ta	0,01357	91,36	0,6207



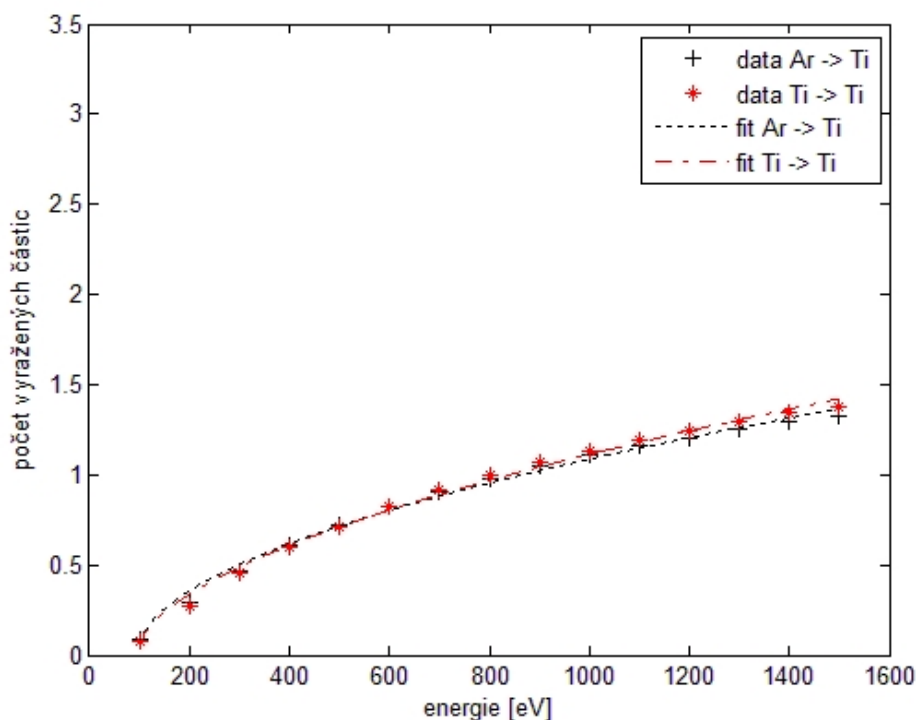
Obrázek 4.1: Závislost počtu vyražených částic Ta na energii dopadajících iontů Ta a Ar

### 4.2.2 Titan

V tabulce 4.3 jsou uvedené hodnoty parametrů  $a, b, c$  pro titan rozprašovaného ionty titanu a argonu na základě fitování dat získaných programem SDTrimSP. Jejich předpis je opět uveden v rovnici 4.1. Dle obrázku 4.2 lze rozpoznat přijatelnou kvalitu proložení křivkami.

Tabulka 4.3: Hodnota parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $c$  prokládané křivky 4.1 při rozprašování titanu. Uvedené hodnoty jsou vždy na maximální počet platných číslic neovlivněných chybou.

Srážka	$a$	$b$	$c$
Ti $\rightarrow$ Ti	0,02497	95,24	0,5576
Ar $\rightarrow$ Ti	0,03139	95,19	0,5205



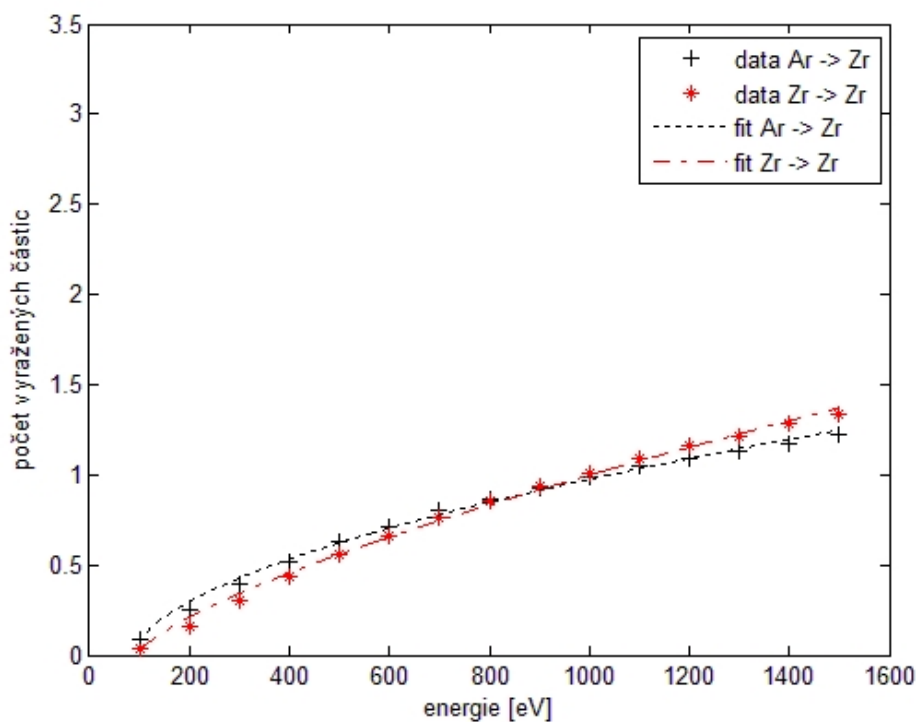
Obrázek 4.2: Závislost počtu vyražených částic Ti na energii dopadajících iontů Ti a Ar

### 4.2.3 Zirkonium

V tabulce 4.4 jsou uvedeny hodnoty parametrů  $a, b, c$  pro zirkonium rozprašované ionty zirkonia a argonu na základě fitování dat získaných programem SDTrimSP. Jejich předpis je uveden v rovnici 4.1. Dle obrázku 4.3 lze rozpoznat přijatelnou kvalitu fitů.

Tabulka 4.4: **Hodnota parametrů  $a, b, c$  prokládané křivky 4.1 při rozprašování zirkonia.** Uvedené hodnoty jsou vždy na maximální počet platných číslic neovlivněných chybou.

Srážka	$a$	$b$	$c$
Zr $\rightarrow$ Zr	0,007382	97,39	0,7208
Ar $\rightarrow$ Zr	0,02098	91,39	0,5634



Obrázek 4.3: Závislost počtu vyražených částic Zr na energii dopadajících iontů Zr a Ar

## 4.2.4 Měď

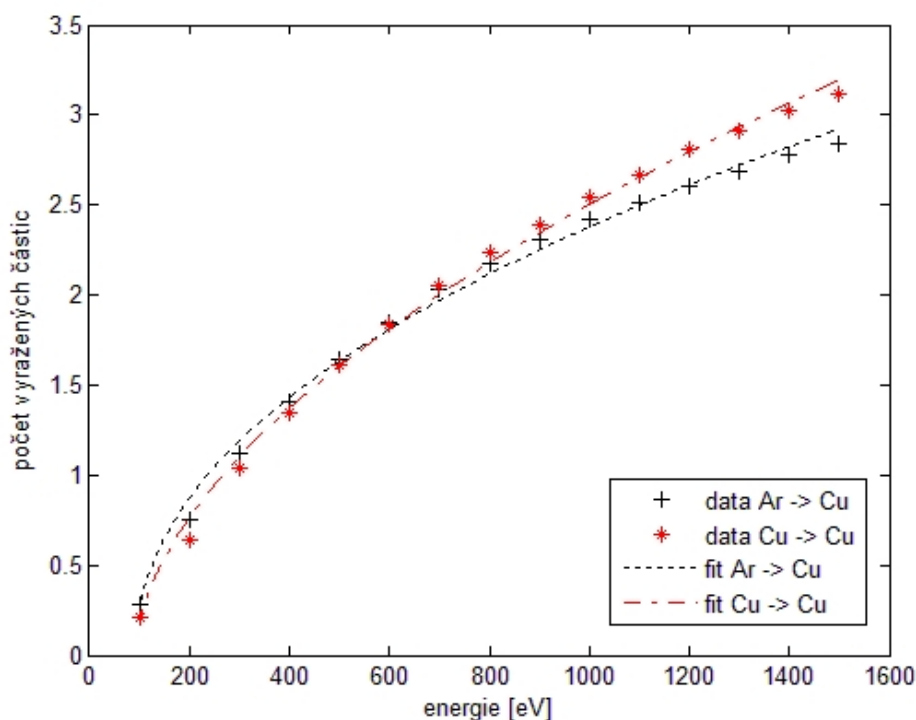
Měď sice byla již v modelu implementovaná, ale fit byl proveden podle předpisu

$$y = a \cdot x^c, \quad (4.2)$$

což není vhodné pro porovnávání. Proto byly tyto hodnoty v modelu změněny podle vzorce 4.1, viz tabulka 4.5.

Tabulka 4.5: Hodnota parametrů  $a$ ,  $b$ ,  $c$  prokládané křivky 4.1 při rozprašování mědi. Uvedené hodnoty jsou vždy na maximální počet platných číslic neovlivněných chybou.

Srážka	a	b	c
Cu → Cu	0,05625	92,45	0,5571
Ar → Cu	0,09616	92,16	0,4709

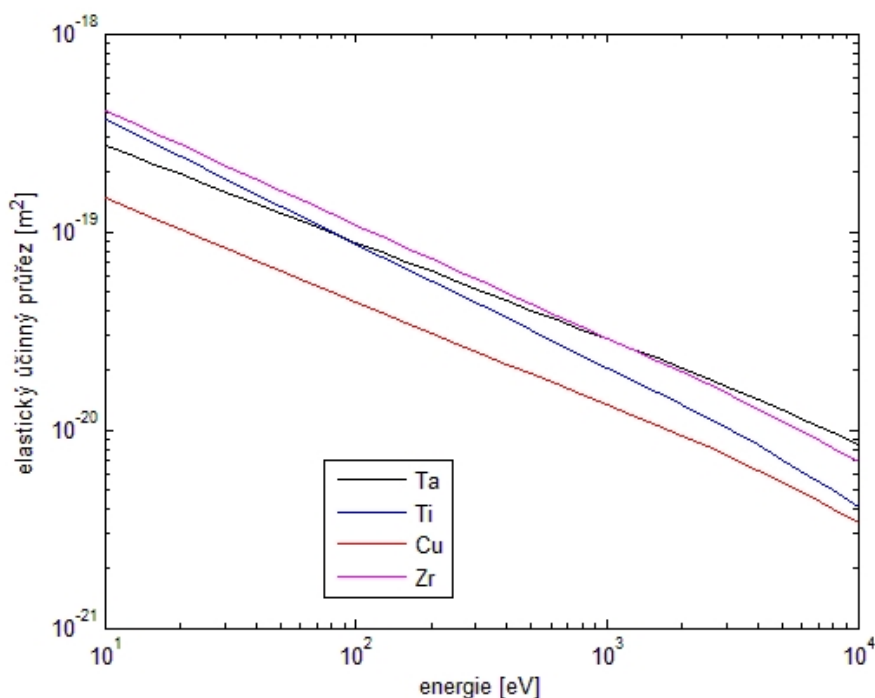


Obrázek 4.4: Závislost počtu vyražených částic Cu na energii dopadajících iontů Cu a Ar

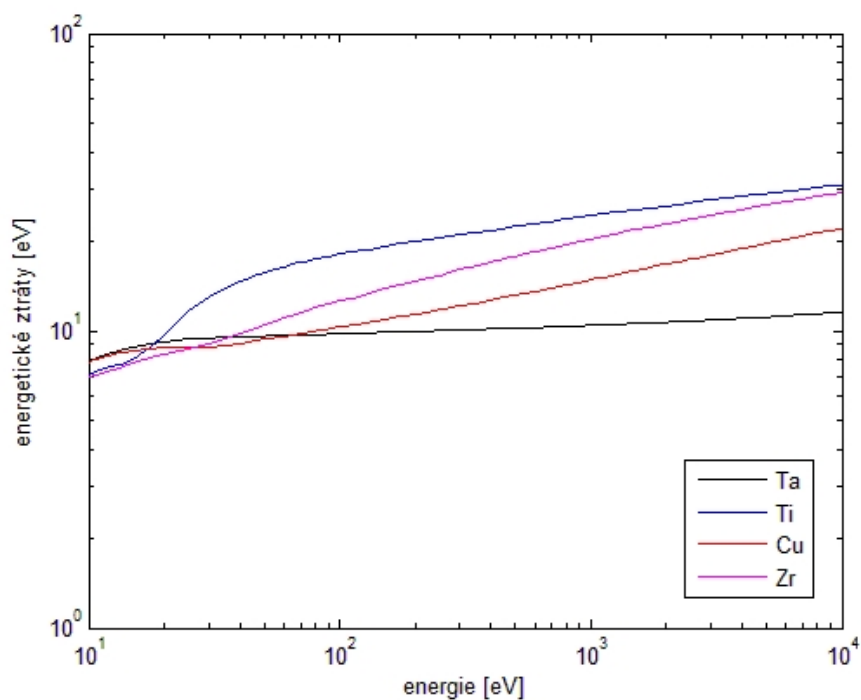
### 4.3 Data z databáze Mezinárodní agentury pro atomovou energii

Data z databáze Mezinárodní agentury pro atomovou energii jsou nazvána anglickým názvem Evaluated Nuclear Data File (zkratka ENDF). Z této databáze se použila data pro elastický rozptylový účinný průřez (*angl.* Elastic Scattering Cross Section), excitační účinný průřez (*angl.* Excitation Cross Section), elektro-ionizační účinný průřez valenční vrstvy (*angl.* Electroionization Subshell Cross Section) a pro energetické ztráty při excitaci elektronu (*angl.* Excitation Electron Average Energy Loss).

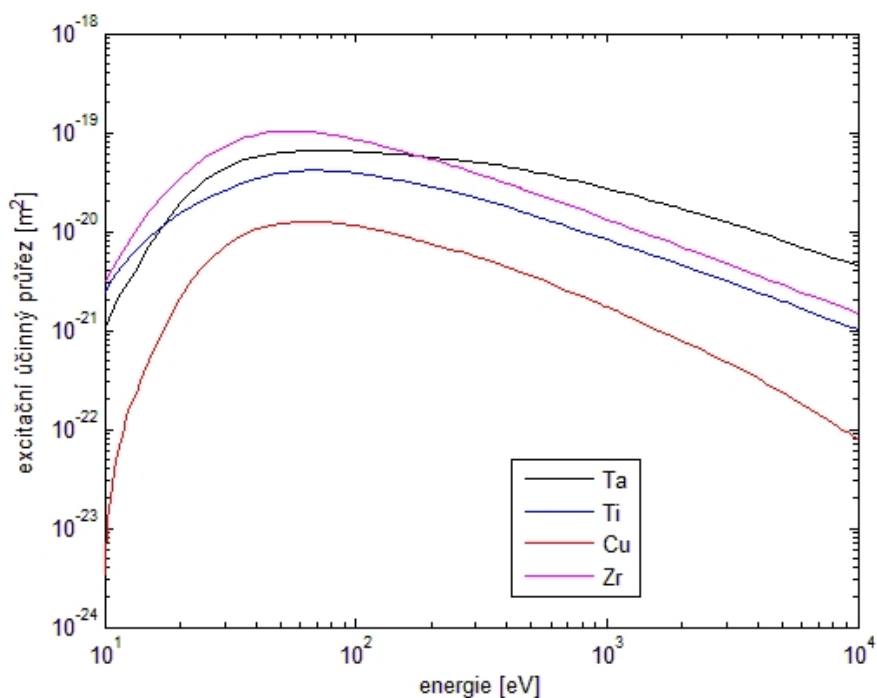
V grafech 4.5, 4.6, 4.7 a 4.8 jsou vykresleny závislosti účinných průřezů získaných z této databáze na energii. Vždy jsou v nich zakresleny 4 prvky - tantal, titan, měď a zirkonium a na obou osách je logaritmická stupnice. Měď tu má pouze informativní charakter, jelikož v modelu nebyla data pro ní přepsána, zůstala tam původní.



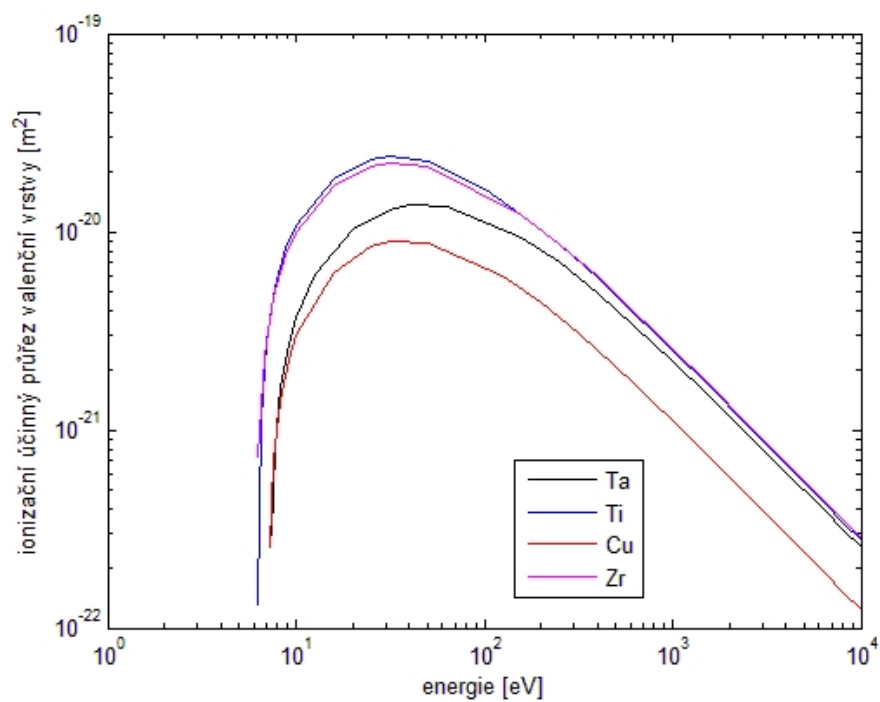
Obrázek 4.5: Závislost elastického rozptylového účinného průřezu při srážce elektronu a atomu kovu na energii.



Obrázek 4.6: Závislost energetické ztráty při srážce elektronu a atomu kovu na energii při excitaci elektronu.



Obrázek 4.7: Závislost excitačního účinného průřezu při srážce elektronu a atomu kovu na energii.



Obrázek 4.8: Závislost účinného průřezu valenční vrstvy při srážce elektronu a atomu kovu na energii.



# Kapitola 5

## Výsledky a diskuze

V této práci jsem se zaměřila na vliv vstupních parametrů modelu na průběh proudové hustoty.

Vstupní parametry modelu mohou být rozděleny na dvě skupiny. První skupinu tvoří parametry konstantní a jsou přehledně uvedeny v tabulce 5.1. Jejich hodnoty byly zvoleny s ohledem na provedené experimenty [21] i v souladu s již provedenými simulacemi [14]. Součin  $\omega\tau$ , který je též konstantním vstupním parametrem, řídí difuzi elektronů od terče napříč magnetickým polem a uvedená hodnota 16 odpovídá Bohmově difuzi [14]. Druhou skupinu tvoří proměnné parametry, a to výbojové napětí  $U_d$ , hodnota koeficientu zpětného zachycení elektronů na terči  $r$  a hodnota faktoru určujícího sekundární emisi elektronů po dopadu iontu rozprašovaného materiálu  $s$ .

Tabulka 5.1: Konstantní vstupní parametry modelu.

Poloměr komory	20	cm
Vzdálenost terče od substrátu	10	cm
Poloměr terče	10	cm
Poloměr substrátu	5	cm
Délka Zóny I	1,25	cm
Magnetická indukce	400	G
$\omega\tau$	16	
Tlak pracovního plynu (argon)	0,5	Pa

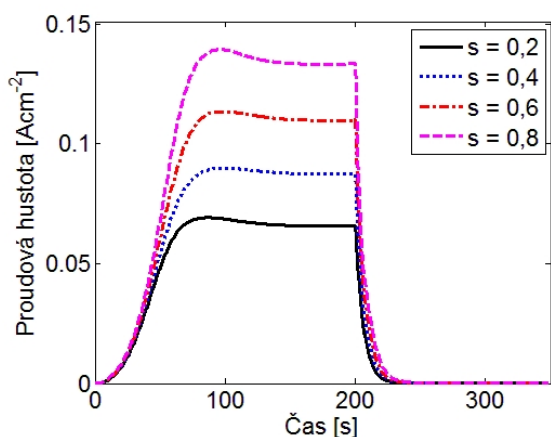
Pro výpočty byly zvoleny dvě hodnoty výbojového napětí  $U_d$ , a to 500 V a 700 V. Při hodnotě 500 V by nemělo docházet k přechodu výboje do rostoucího režimu, tj. režimu, při kterém dochází k neustálému růstu proudové hustoty na terč během pulzu napětí. Pro hodnotu 700 V lze naopak očekávat, že minimálně pro titan dojde k rostoucímu režimu, viz např. [21].

Pro koeficient zpětného zachycení elektronů na terči byly opět zvoleny dvě hodnoty. Jsou jimi  $r = 0,50$  a  $r = 0,75$ . Hodnota parametru 0,5 byla použita při výpočtech para-

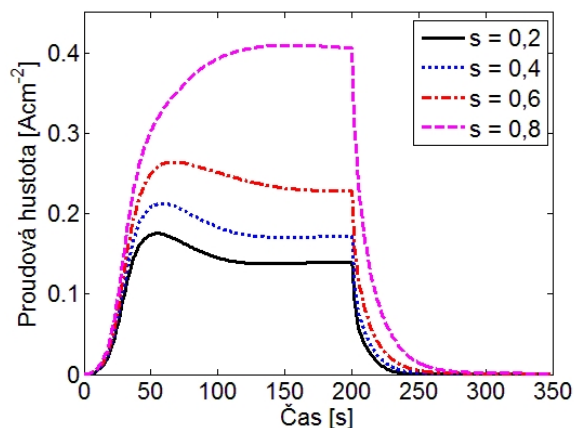
metrického modelu pro měď a titan při tlaku pracovního plynu (argonu) 0,5 Pa. Pro otestování vlivu tohoto parametru byla zvolena hodnota 0,75. Tato hodnota zhruba odpovídá dvojnásobku hodnoty 0,35, která byla nalezena jako optimální pro modelování mědi při tlaku 1 Pa [14].

Koeficient  $s$  určující sekundární emisi elektronů po dopadu iontu rozprášeného materiálu na terč byl pro měď zvolen vzhledem k předchozím výpočtům [14]. V uvedeném článku byla nalezena jeho optimální hodnota  $s = 0,6$ . Proto, aby byl vidět vliv parametru  $s$  na průběh proudové hustoty, byla zvolena množina jeho hodnot  $\{0,2; 0,4; 0,6; 0,8\}$ . Pro tantal, titan a zirkonium by však tyto hodnoty způsobovaly nereálně vysoké proudové hustoty, a to zejména u vyšších hodnot ( $s > 0,3$ ), jak bylo ověřeno výpočty. Proto byla pro hodnoty parametru  $s$  v případě těchto prvků zvolena množina hodnot  $\{0,10; 0,15; 0,20; 0,25\}$ .

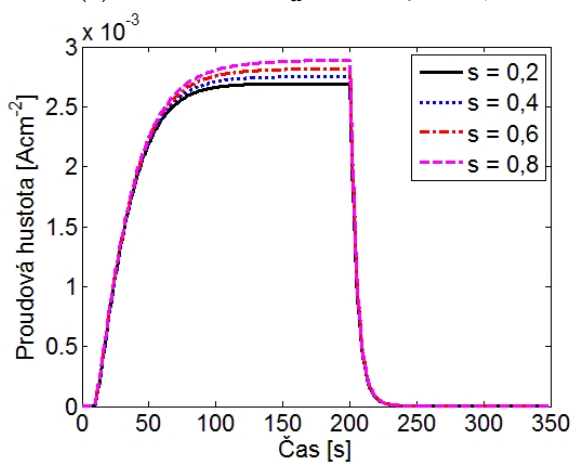
Na obrázcích 5.1 až 5.4 jsou zobrazeny výsledky výpočtů modelu pro výše uvedené parametry a prvky měď, tantal, titan a zirkonium (v tomto pořadí). Z důvodu viditelnosti jsou u podgrafů voleny odlišná měřítka vertikálních os. Ze stejného důvodu se liší i měřítka vertikálních os mezi grafy pro měď a ostatní prvky.



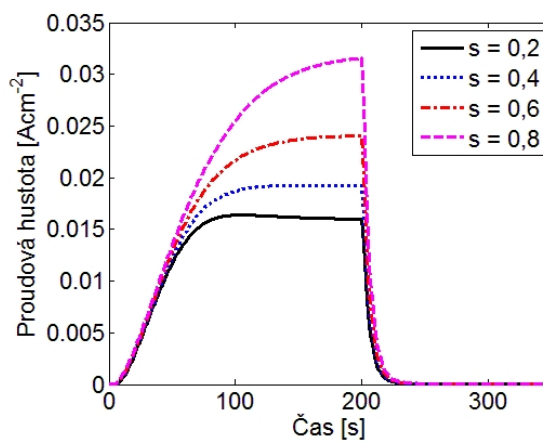
(a) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .



(b) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .

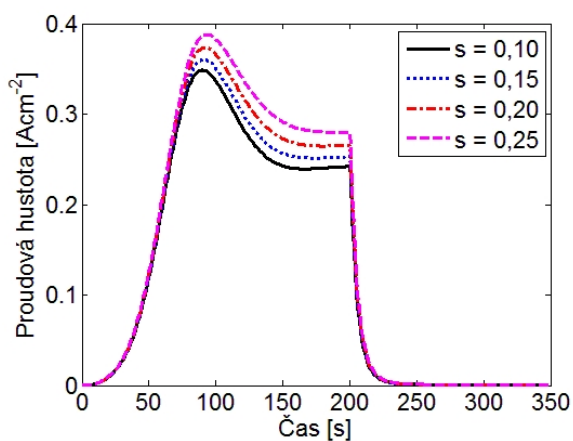
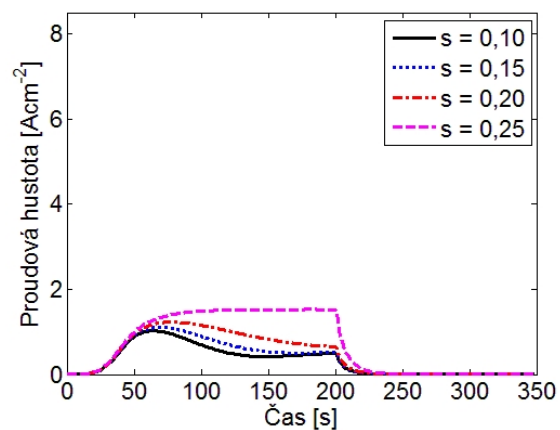
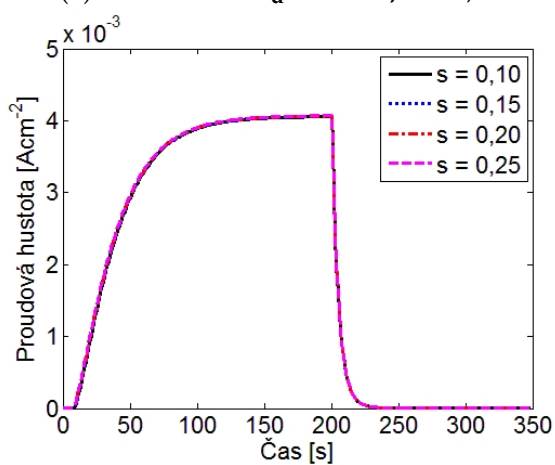
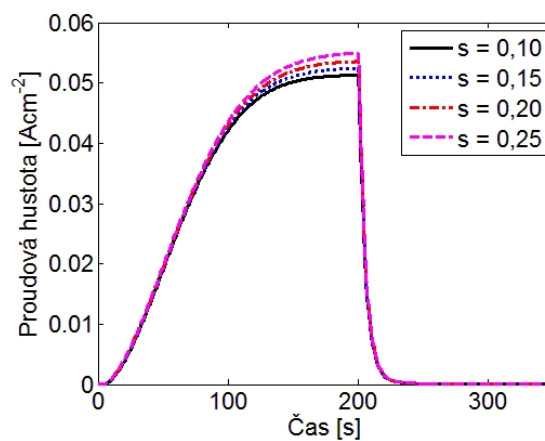


(c) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .

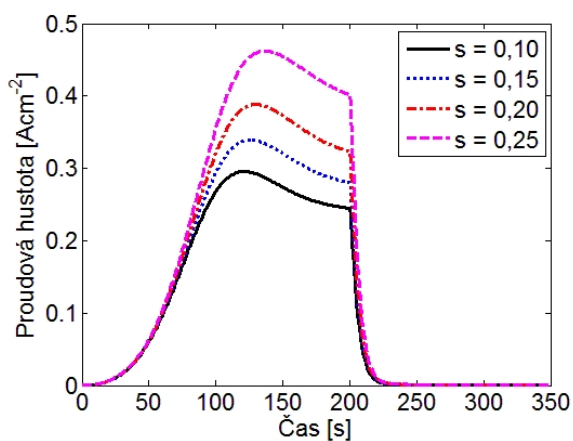
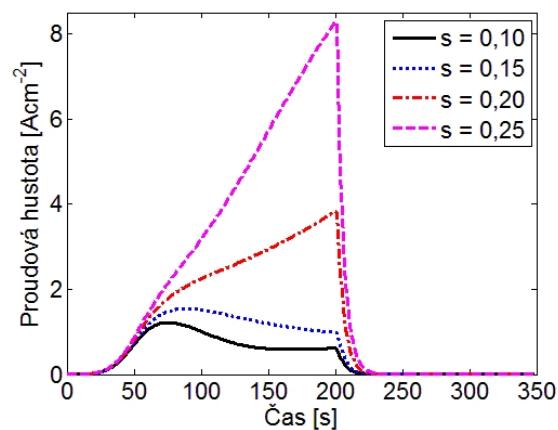
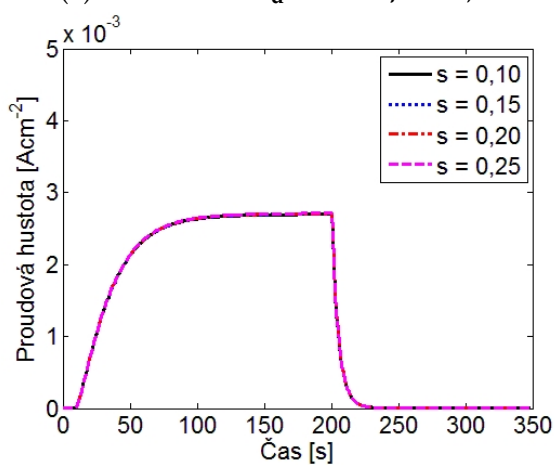
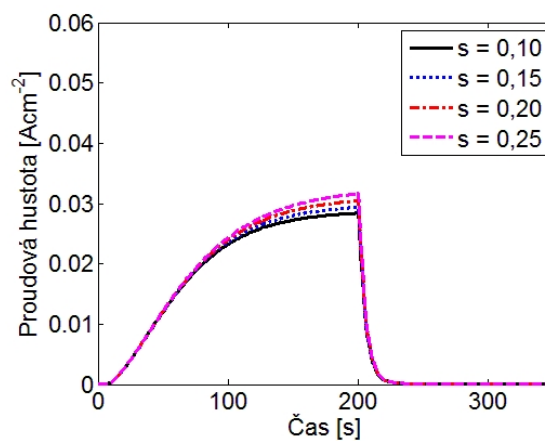


(d) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .

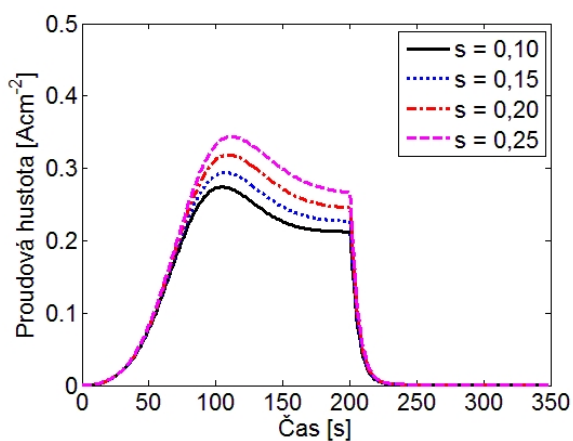
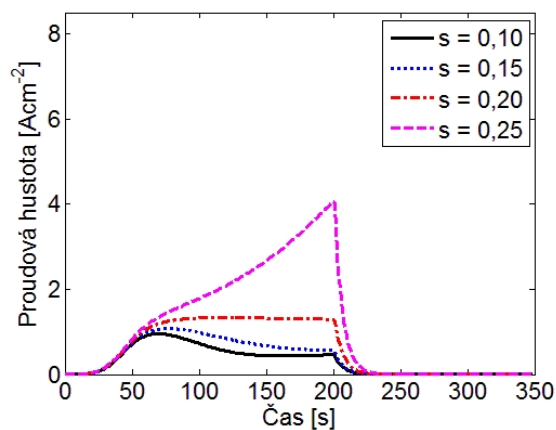
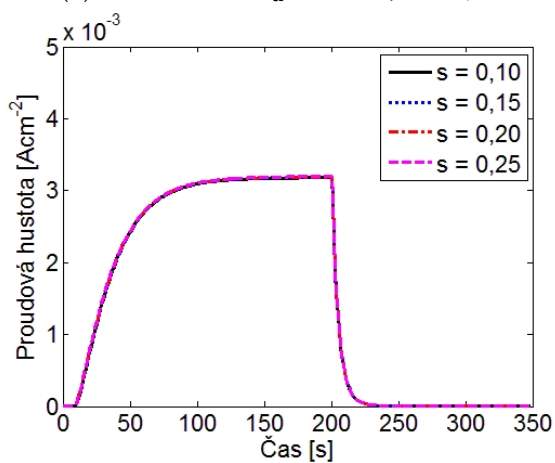
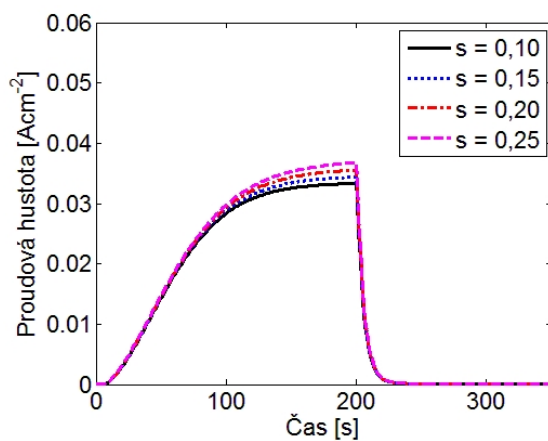
Obrázek 5.1: Vypočtené proudové hustoty při rozprašování mědi pro kombinace parametrů  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$  a  $r = 0,75$ . Stupnice na vertikální ose se na jednotlivých podobrázcích liší.

(a) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(b) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(c) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .(d) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .

Obrázek 5.2: Vypočtené proudové hustoty tantalového terče pro kombinace parametrů  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$  a  $r = 0,75$ . Stupnice na vertikální ose se na jednotlivých podobrázcích liší.

(a) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(b) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(c) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .(d) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .

Obrázek 5.3: Vypočtené proudové hustoty titanového terče pro kombinace parametrů  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$  a  $r = 0,75$ . Stupnice na vertikální ose se na jednotlivých podobrázcích liší.

(a) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(b) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$ .(c) Nastaveno  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .(d) Nastaveno  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,75$ .

Obrázek 5.4: Vypočtené proudové hustoty zirkoniového terče pro kombinace parametrů  $U_d = 500 \text{ V}$ ,  $U_d = 700 \text{ V}$ ,  $r = 0,50$  a  $r = 0,75$ . Stupnice na vertikální ose se na jednotlivých podobrázcích liší.

Z obrázků je patrné, že růst výbojového napětí vede u všech prvků k vzrůstu hodnoty proudové hustoty. To je důsledkem vyšší energie, kterou sekundární elektrony získají v příelektrodové oblasti. Velikost proudové hustoty se dále zvětšuje s růstem parametru  $s$ , což je způsobeno vyšším počtem sekundárních elektronů uvolněných do výboje z terče. Oba jevy (jak růst energie sekundárních elektronů, tak zvýšení jejich počtu) vedou k zvýšení ionizace pracovního plynu i rozprášeného materiálu poblíž terče. Část těchto iontů posléze dopadá zpět na terč, a tak zvyšuje proudovou hustotu. Zbytek iontů je uvolněn směrem k substrátu. S růstem koeficientu  $r$  naopak klesá dosažitelná maximální hodnota proudové hustoty, což je důsledkem poklesu sekundárních elektronů podílejících se na ionizačních srážkách, jelikož větší část těchto elektronů je opět zachycena terčem.

U všech kovů je dobře pozorovatelný výrazný pokles hodnot proudové hustoty pro koeficient zpětného zachycení  $r = 0,75$ . Z experimentů pro měď i titan [21] však plyne, že vypočítané proudové hustoty jsou v tomto případě nereálně malé. Uvedený rozpor jasně ukazuje, že koeficient zpětného zachycení není nepřímo úměrný tlaku pracovního plynu (viz optimální hodnota  $r = 0,35$  pro měď při tlaku pracovního plynu 1 Pa [14]), jak by mohlo vyplývat z prodloužení střední volné dráhy elektronů dané vztahem

$$\lambda = \frac{kT_g}{\sigma_{eg}p_g}, \quad (5.1)$$

kde  $T_g$  je teplota pracovního plynu,  $p_g$  je tlak pracovního plynu a  $\sigma_{eg}$  je úhrnný účinný průřez pro srážku elektronů s atomy pracovního plynu. Porušení této závislosti lze vysvětlit nezapočtením koncentrace rozprášených atomů kovu ve výboji, které při srážkách odklánějí sekundární elektrony z trajektorií, které by je zavedly zpět na terč.

Obrázky 5.1b a 5.1d ukazují, že k přechodu do rostoucího režimu měď potřebuje vysoké hodnoty parametru  $s$  ( $s > 0,8$ ). Vzhledem k předchozím simulacím [14] i provedeným experimentům [21] lze však říci, že takto vysoké hodnoty parametru  $s$  jsou nereálné a u mědi proto nebude za uvažovaných podmínek docházet k rostoucímu režimu. U tantalu (obr. 5.2b) lze pozorovat, že zvyšování koeficientu  $s$  má výraznější vliv pouze pro nastavení  $U_d = 700$  V a  $r = 0,50$ , kdy hodnota parametru  $s = 0,25$  vede ke změně tvaru průběhu proudové hustoty směrem k rostoucímu režimu. Pro nižší hodnoty parametru  $s$  průběh křivky vykazuje pokles proudové hustoty po jejím maximu. Tento průběh indikuje, že ve výboji má velký vliv zředění plynu (viz [9]), které vede k poklesu toku iontů pracovního plynu na terč. Tantal navíc při těchto podmínkách nedokáže pokles iontů argonu kompenzovat ionizací rozprášených atomů a návratem takto vzniklých iontů k terči. Titan (obr. 5.3b) výrazně reaguje na růst parametru  $s$  při nastavení  $U_d = 700$  V a  $r = 0,5$ . Již hodnoty parametru  $s$  mezi 0,15 a 0,20 vedou k přechodu do rostoucího režimu. To znamená, že titan je schopen zředění pracovního plynu velmi dobře kompenzovat návratem svých iontů k terči. Též zirkonium (obr. 5.4b) je schopno dobře doplnit ztrátu iontů argonu svými ionty při nastavení  $U_d = 700$  V a  $r = 0,50$ , k přechodu do rostoucího režimu však dochází až mezi hodnotami parametru  $s$  0,20 a 0,25.

Z porovnaných výsledků pro všechny uvažované kovy při nastavení  $U_d = 700$  V a  $r = 0,50$  plyne, že největší hustoty proudu dosahuje pro zvolené hodnoty parametru  $s$  titan. To je důsledkem jak jeho nízké ionizační energie (pouze 6,83 eV), tak i jeho malé relativní atomární hmotnosti (jen 47,9), viz tab. 4.1. Nízká ionizační energie umožňuje sekundárnímu elektronu vytvořit při stejné jeho počáteční energii v průměru více iontů, které se podílejí na tvorbě výbojového proudu. Nízká hmotnost titanu navíc způsobuje, že rozprášené atomy terče předávají při srážkách menší část své energie atomům argonu, viz závislost ztráty energie nalétávající (zisk energie terčové částice) [15]

$$\Delta E \sim \frac{m_n m_t}{(m_n + m_t)^2}, \quad (5.2)$$

kde  $m_n$  je hmotnost nalétávající a  $m_t$  je hmotnost terčové částice. Tudíž při stejném počtu srážek rozprášených atomů terče a atomů argonu (viz i podobné velikosti atomů v tab. 4.1) předávají rozprášené atomy titanu menší energii atomům argonu, proto nedojde k tak výraznému zahřátí pracovního plynu a v důsledku k jeho zředění.



# Kapitola 6

## Závěr

Prostudovala jsem literaturu o magnetronovém naprašování a jeho modelování jednak pomocí částicových simulací, ale i modelů založených na globálních zákonech zachování. Prostudované prameny jsou uvedeny v seznamu literatury.

Seznámila jsem se s nestacionárním modelem pro vysokovýkonové pulzní magnetronové rozprašování. Tento model jsem doplnila o potřebné parametry pro modelování rozprašování tantalu, titanu a zirkonia.

Provedla jsem sérii simulací vysokovýkonových magnetronových výbojů při rozprašování mědi, tantalu, titanu a zirkonia při tlaku pracovního plynu (argonu) 0,5 Pa a výbojových napětích 500 V a 700 V. Pro tyto podmínky byly měněny parametry zpětného zachycení elektronů terčem  $r$  (dvě hodnoty: 0,50 a 0,75) a koeficienty určující sekundární emisi elektronů z terče po dopadu iontu rozprašovaného materiálu  $s$  (čtyři hodnoty: 0,2; 0,4; 0,6; 0,8 pro měď a 0,10; 0,15; 0,20; 0,25 pro tantal, titan a zirkonium). Provedla jsem též kvalitativní diskuzi získaných výsledků.

Vzhledem k výše uvedenému lze konstatovat, že všechny cíle této bakalářské práce byly splněny.

# Literatura

- [1] ASHIDA S., LEE C., LIEBERMAN, M. A. Spatially averaged (global) model of time modulated high density argon plasmas. *J. Vac. Sci. Technol.* 1995 A **13**
- [2] ANDERS, André. Discharge physics of high power impulse magnetron sputtering. *Surf. Coat. Technol.*, 2011, **205**
- [3] BROŽ, J., ROSKOVEC VI., VALOUCH M. *Fyzikální a matematické tabulky* Praha: SNTL - nakladatelství technické literatury, 1980.
- [4] CHEN, F. F., *Úvod do fyziky plazmatu*. 1. vyd. Praha: Academia, 1984. 328 s.
- [5] CHRISTIE, D. J. Target material pathways model for high power pulsed magnetron sputtering *J. Vac. Sci. Technol.* March/April 2005
- [6] ECKSTEIN, W., DOHMEN, R., MUTZKE A., SCHNEIDER, R. SDTrimSP: A Monte-Carlo code for calculating collision phenomena in randomized targets. *Max-Planck-Institut für Plasmaphysik*, 2007.
- [7] ESAB. *Svařování a pálení Česká republika* [online]. [cit. 25.4.2013]. Dostupné z: <http://www.esab.cz/cz/cz/education/processes.cfm>
- [8] GROHMANN, J. *Armádní noviny* [online]. [cit. 25.4.2013]. Dostupné z <http://www.armadinoviny.cz/technologie-zitrka-zbran-strilejici-blesky-polaserovem-paprsku.html>
- [9] GUDMUNDSSON, J.T., BRENNING N., LUNDIN D., HELMERSSON, U. High power impulse magnetron sputtering discharge. *J. Vac. Sci. Technol.*, 2012 A **30(3)** ISSN 0734-2101
- [10] KELLY, P.J., ARNELL, R.D. Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications. *Vacuum*, **56** 2000, str. 159-172
- [11] KIM, H. C., IZA, F., YANG, S. S., RADMILOVIĆ-RADJENOVIĆ, M., LEE, J.K. Particle a fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2005, ISSN 0022-3727
- [12] KOLEV, I., BOGAERTS, A. PIC - MCC Numerical Simulation of a DC Planar Magnetron. In: *Plasma Process. Polym.* 2006, s. 127-134.

- [13] KOZÁK, Tomáš. *Modelování vysokovýkonových pulzních magnetronových výbojů pro depozici vrstev = Modelling of high-power impulse magnetron discharges for thin film deposition*. Plzeň, 2012. Disertační práce (Ph.D.). Západočeská univerzita v Plzni, Fakulta aplikovaných věd.
- [14] KOZÁK, T., PAJDAROVÁ, A. D. A non-stationary model for high power impulse magnetron sputtering discharges. *Journal of applied physics* 2011 **110** 103303
- [15] LIEBERMAN, M. A. a LICHTENBERG, Allan J. *Principles of plasma discharges and materials processing*. 2nd ed. Hoboken, N.J.: Wiley-Interscience, ©2005. xxxv, 757 s. ISBN 0-471-72001-1.
- [16] OSEL, s.r.o. *OSEL (Objective Source E-Learning)* [online]. [cit. 25.4.2013]. Dostupné z <http://www.osel.cz/index.php?clanek=6557>
- [17] SMIRNOV, B. M. Tables for Cross Section of the Resonant Charge Exchange Process. *Physica Scripta*, 61,595
- [18] STRANAK, V. a spol. Effect of mid-frequency discharge assistance on dual-high power impulse magnetron sputtering. *Surface and Coatings Technology*, 2012, **206**, s. 2801-2809, ISSN 0257-8972
- [19] U.S. Department of Commerce *NIST: National Institute of Standards and Technology* [online]. [cit. 15.4.2013]. Dostupné z: <http://www.nist.gov> , z: [http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels\\_form.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html) a z: <http://t2.lanl.gov/nis/data/endl/endlvii-atomic.html>
- [20] ÚSTAV FYZIKY PLAZMATU AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY *Ústav fyziky plazmatu* [online]. [cit. 25.4.2013]. Dostupné z: <http://www.ipp.cas.cz>
- [21] VLČEK, J., BURCALOVÁ K. A phenomenological equilibrium model applicable to high-power pulsed magnetron sputtering, *Plasma Sources Sci. Technol.* **19** 065010
- [22] VLČEK, J., KUDLÁČEK, P., BURCALOVÁ, K., MUSIL, J. High-power pulsed sputtering using a magnetron with enhanced plasma confinement. *J. Vyc. Sci. Technol.*, 2007A **25**(1). ISSN 0734-2101
- [23] WINTER, Mark. *WebElements: the periodic table on the web* [online]. [cit. 15.4.2013]. Dostupné z: <http://www.webelements.com>
- [24] ZERKIN, Victor. *Evaluated Nuclear Data File (ENDF)* [online]. [cit. 15.4.2013] Dostupné z: <http://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm> a z: <http://t2.lanl.gov/nis/data/endl/endlvii-atomic.html>