

# Monte Carlo simulace napouštění reaktivního plynu pro reaktivní magnetronové naprašování vrstev

Michal Šula<sup>1</sup>, Tomáš Kozák<sup>2</sup>

## 1 Úvod

Numerické simulace jsou významným nástrojem ve vývoji a výzkumu tenkých vrstev, připravených pomocí plazmových technologií. Jedním z možných přístupů k nanášení tenkých vrstev na substrát je technologie reaktivního magnetronového naprašování. Proces probíhá uvnitř vakuové komory, naplněné inertním pracovním plynem, ke kterému je v případě reaktivního procesu připouštěn ještě plyn reaktivní, např. kyslík nebo dusík. Komora obsahuje magnetron (terč) a substrát, na který nanášena tenká vrstva. Uvnitř komory dojde k zapálení doutnavého výboje, který je zdrojem ionizovaných částic pracovního a reaktivního plynu. Pomocí napětí jsou ionty naváděny na katodu magnetronu, kde bombardují terč a do prostoru z něj odprašují materiál, který následně kondenzuje do vrstvy na protilehlém substrátu.

Na výslednou kvalitu vytvořené vrstvy má tak vliv velké množství kontrolovatelných proměnných, např. parciální tlak inertního a reaktivního plynu uvnitř vakuové komory, výkon dodaný do výboje i pozice napouštěcího zařízení pro reaktivní plyn.

## 2 Definice úlohy

Tato práce se zabývá počítačovou simulací transportu molekul reaktivního plynu uvnitř vakuové komory. Cílem je získat prostorové rozložení hustoty molekul kyslíku a jejich tok na substrát a terč pro speciální systém napouštění reaktivního plynu pomocí trubiček před terčem, v závislosti na průtoku reaktivního plynu, tlaku v komoře a pozici napouštění.

Tento fyzikální problém byl řešen metodou Monte Carlo. Na základě zvolené odborné literatury byl následně vytvořen matematický model, který ovšem v rámci rozsahu práce zohledňoval určitá zjednodušení a omezení oproti reálné situaci.

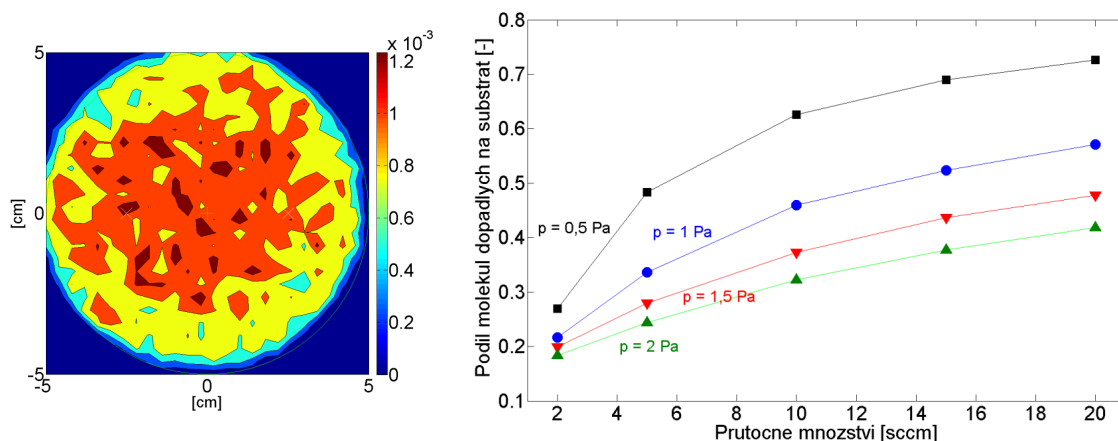
Užitá metoda zpracování fyzikálního problému transportu reaktivního plynu uvnitř vakuové komory předpokládá zanedbání interakcí vlivem přítomnosti plazmatu, elektrického napětí a magnetického pole. Metoda se omezuje pouze na modelování interakcí molekul reaktivního plynu s pracovním plynem a s dopadem molekul reaktivního plynu na povrch terče a substrátu.

## 3 Algoritmus výpočtu

Při spuštění programu načte vstupní parametry výpočtu z příslušného strukturovaného souboru, tedy např. geometrie uvažované vakuové komory nebo vlastnosti uvažovaných plynů. V závislosti na nastaveném tlaku, průtočném množství a umístění výpusti čerpacího zařízení program vygeneruje dané množství sledovaných částic reaktivního plynu a každé přiřadí počáteční

<sup>1</sup> student navazujícího studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná a Inženýrská Fyzika, specializace Matematické modelování, e-mail: sulam@students.zcu.cz

<sup>2</sup> konzultant diplomové práce, e-mail: kozakt@ntis.zcu.cz



**Obrázek 1:** (Vlevo) Relativní rozložení dopadů molekul kyslíku na substrát pro  $p = 2$  Pa,  $q = 20$  sccm (Vpravo) Závislost relativního počtu dopadů na substrát v závislosti na průtoku reaktivního plynu a tlaku.

rychlost danou teplotou plynu a velikosti průtoku plynu napouštěcí trubičkou.

Program poté přechází k výpočtu transportu simulovaných částic prostorem komory. Pro každou částici je vygenerován srážkový atom pracovního plynu. Následuje výpočet pozice binární srážky této dvojice částic a určení vektoru rychlosti molekuly reaktivního plynu po srážce. Po srážce je vygenerován pro částici nový srážkový partner. Tento cyklus se opakuje pro všechny částice reaktivního plynu, dokud neuběhne stanovená délka výpočtu, nebo všechny sledované částice chemisorbují na povrch terče, substrátu či stěny komory.

## 4 Výsledky

Součástí práce je vizualizace výsledných dat pro všechny zkoumané parametry, společně s vysvětlením a významností vlivu na výsledný stav systému. Je demonstrován vliv otočení výpusti napouštěcího zařízení směrem k terči a k substrátu, význam variace tlaku mezi 0,5 Pa až 2 Pa, variace průtočného množství reaktivního plynu mezi 2 sccm až 20 sccm a vzdálenost výpusti od 2 cm až do 3 cm od povrchu terče.

Byly vypočteny podíly molekul reaktivního plynu, které dopadají na substrát v závislosti na průtoku reaktivního plynu a tlaku v komoře, viz Obr. 1 vpravo. Je vidět, že s rostoucím průtokem tento podíl roste, v důsledku vyšší rychlosti reaktivního plynu v ústí napouštěcí trubičky, a že s tlakem tento podíl klesá v důsledku většího množství srážek molekul kyslíku s pracovním plynem.

## Literatura

Kelly, P.J., Arnell, R. D., 2000. Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications. *Vacuum*, Vol. 56. pp 159–172.

Vlček, J., Rezek, J., Houška, J., Kozák, T., Kohout, J., 2015. Benefits of the controlled reactive high-power impulse magnetron sputtering of stoichiometric ZrO<sub>2</sub> films. *Vacuum*, Vol. 114. pp 131–141.

Bird, G.A., 1976. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*, Clarendon Press, Oxford.