

ZÁPADOČESKÁ UNIVERZITA V PLZNI
FAKULTA APLIKOVANÝCH VĚD
KATEDRA FYZIKY



**Simulace transportu rozprášených atomů
v magnetronových výbojích**

Bakalářská práce

Vedoucí práce:
Ing. Tomáš Kozák, Ph.D.

Vypracoval:
Marek Bělohoubek

Plzeň 2017/2018

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím uvedených zdrojů a literatury.

v Plzni dne 28. 5. 2018

.....

Marek Bělohoubek

Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat vedoucímu své bakalářské práce Ing. Tomáši Kozákovi, Ph.D. za jeho vedení, cenné rady při vypracování a za jeho ochotu a vstřícnost. Dále bych rád poděkoval své rodině a blízkým, jenž mě podporovali po dobu celého mého studia.

Abstrakt

Tato práce se zabývá simulací transportu neutrálních částic v magnetronových výbojích za nízkých tlaků. Zkoumá procesy v prostoru zadané geometrie a popisuje chování pracovního plynu během rozprašování kovového terče. V práci je shrnuta teorie magnetronového naprašování a numerické metody Direct Simulation Monte Carlo a popsán princip a možnosti použitého programu, který implementuje tuto metodu. Jsou provedeny simulace rozprašování titanu v argonové atmosféře při konstantním i pulzním výbojovém proudu. Je vypočítán celkový tok atomů terčového materiálu na substrát a rozdělovací funkce jejich energie. Diskutován je vliv fyzikálních veličin tlaku pracovního plynu a výbojového proudu a citlivost výsledků na vybraných parametrech numerického modelu.

Klíčová slova: magnetronové naprašování, metoda Direct Simulation Monte Carlo, transport rozprašených atomů, zředování pracovního plynu

Abstract

The main subject of this thesis is a simulation of transport of neutral particles in magnetron discharges at low pressure. It focuses on processes in the specified geometry and describes interaction of argon process gas with the sputtered metal. The theory of magnetron sputtering and of the Direct Simulation Monte Carlo numerical method is described. A computer program implementing this method is used for simulations of sputtering of a titanium target in argon atmosphere by constant and pulsed discharge currents. The total flux of atoms onto a substrate and their energy distribution is calculated. The effect of argon pressure and discharge current, as well as the effect of selected parameters of the numerical model are discussed.

Keywords: magnetron sputtering, method of Direct Simulation Monte Carlo, transportation of sputtered atoms, dilution of the working atmosphere

Obsah

1	Úvod	1
2	Současný stav problematiky	3
2.1	Způsoby depozice tenkých vrstev	3
2.2	Magnetronové naprašování	3
2.2.1	Vyvážený a nevyvážený magnetron	5
2.2.2	Reaktivní naprašování	5
2.2.3	Parametry depozice	7
2.3	Interakce iontů s povrchy	7
2.3.1	Charakteristika režimů interakce	8
2.3.2	Energiové a úhlové rozdělení rozprášených atomů	9
2.4	Interakce atomů plynu	10
2.4.1	Druhy a parametry binárních srážek	11
2.4.2	Modely pružných srážek	12
2.5	Simulace transportu částic	14
2.5.1	Metoda Monte Carlo	14
2.5.2	Metoda Direct Simulation Monte Carlo	14
3	Cíle bakalářské práce	18
4	Návrh modelu	19
4.1	Geometrie	19
4.2	Interakce částic	21
4.2.1	Interakce s povrchy	21
4.2.2	Interakce mezi atomy	23
4.3	Parametry simulace	24
5	Výsledky a diskuze	26
5.1	Vliv tlaku pracovního plynu	26
5.2	Vliv výbojového proudu	30
5.2.1	Tlak pracovního plynu 0,5 Pa	30
5.2.2	Tlak pracovního plynu 1 Pa	31
5.2.3	Pulzní výbojový proud	33
5.3	Vliv srážkového modelu	36
5.4	Vliv váhy simulačních částic	36

5.5	Celkový tok atomů titanu na terč	38
6	Závěr	40
7	Značení	42
8	Seznam obrázků a tabulek	44
9	Seznam použité literatury	47

1 Úvod

Studium tenkých vrstev je důležitou součástí moderní fyziky. Využívají se k povrchovým úpravám, kde tenká, řádově nano- až mikrometry, nanosená vrstva dodá původnímu materiálu nové vlastnosti.

Užití tenkých vrstev zasahuje do mnoha oblastí od strojírenství, kde je požadována zvýšená tvrdost a odolnost proti otěru (např. u rezných nástrojů) či odolnost vysokoteplotní u turbínových lopatek či leteckých komponentů, přes dekorativní materiály a energetiku v podobě kontaktů v polovodičích až po reflexní a antireflexní vrstvy v optice.

Jednou ze základních metod depozice tenkých vrstev je magnetronové naprašování. To patří mezi PVD (*Physical Vapor Deposition*) metody a využívá dopadu urychlených iontů na terč, jehož atomy jsou rozprášeny a následně nanášeny na připravený substrát. Díky využití vyšších energií částic (oproti jiným PVD metodám) je možné pracovat za nižších teplot. Další výhodou pak představuje vyšší variabilita při ovlivňování struktury rostoucí vrstvy.

Původní naprašovací proces byl znám již ve druhé polovině 19. století, rozprašovací zařízení zvané magnetron se však objevilo až kolem roku 1970. Na ten o 15 let později navázal objev nevyváženého magnetronu, jenž spustil masivní vlnu zájmu o tuto technologii. Značné pozornosti se dostalo reaktivnímu magnetronovému naprašování, kde využití reaktivního plynu umožňuje jednodušší tvorbu tenkých vrstev ze sloučenin. Další posun technologie pak na přelomu tisíciletí zaručilo zavedení pulzního magnetronového naprašování (HiPIMS – *High-power impulse magnetron sputtering*). To pracuje s vysokou hustotou plazmatu v oblasti terče, jež roste úměrně s rostoucím výkonem zdroje. Nežádoucí jevy v podobě tání terče a nedostatečného chlazení zdroje pak kompenzuje právě pulzním charakterem dodávaného výkonu. Výsledkem je vysoký stupeň ionizace, jež se kladně odráží na zvýšení kvality povrchu deponované vrstvy se zvýšenou schopností adheze.

Tato práce se zabývá simulací transportu rozprášených atomů v magnetronových výbojích, primárně pak přenosem neutrálních atomů rozprášených na substrát. Cílem je vytvoření simulace, která umožní určit množství a energie částic dopadajících na substrát, a to v závislosti na parametrech procesu (resp. jeho modelu). Těmito parametry jsou kupříkladu materiál terče, pracovní tlak a typ srážkového modelu. Zatímco množství dopadajících částic lze relativně snadno určit z měření depoziční rychlosti vrstev, měření energiového rozdělení dopadajících částic je mnohem složitější a časově náročnější. Z počí-

tačové simulace taktéž získáme informace o rozložení částic v celém objemu vakuové komory. Informace získané ze simulací přispějí k pochopení procesů ve výboji a umožní tak lépe navrhnout podmínky pro vytvoření vrstvy požadovaných vlastností.

Modelování pohybu a interakcí částic má pravděpodobnostní charakter. K jeho popisu je použita metoda Monte Carlo (MC). Jedná se o numerickou metodu s historií sahající až do druhé poloviny 18. století, jež se využívá k popisu stochastických jevů. Z rozličných MC metod sloužících k simulaci transportu částic je pak použita metoda Direct simulation Monte Carlo (DSMC).

2 Současný stav problematiky

Deponované tenké vrstvy na substrátu je třeba chápat jako jeden celek, neboť svých fyzikálně-chemických vlastností tenká vrstva dosahuje právě až ve spojení s daným substrátem. Na tyto vlastnosti má kromě zvolené kombinace substrát-vrstva vliv i míra adheze vrstvy k substrátu.

2.1 Způsoby depozice tenkých vrstev

Mezi základní metody nanášení tenkých vrstev patří CVD (*Chemical Vapor Deposition*) a PVD (*Physical Vapor Deposition*) metody. Primárním rozdílem mezi CVD a PVD je odlišný způsob zisku nanášených částic. Metody CVD využívají chemických procesů v objemu plazmatu za vysokých teplot (950 – 1050 °C) a jsou výhodné pro tvorbu silných vrstev, vynikají svou odolností vůči opotřebení a vysokou adhezí [1]. Výhodou jsou také poměrně nízké pořizovací a provozní náklady.

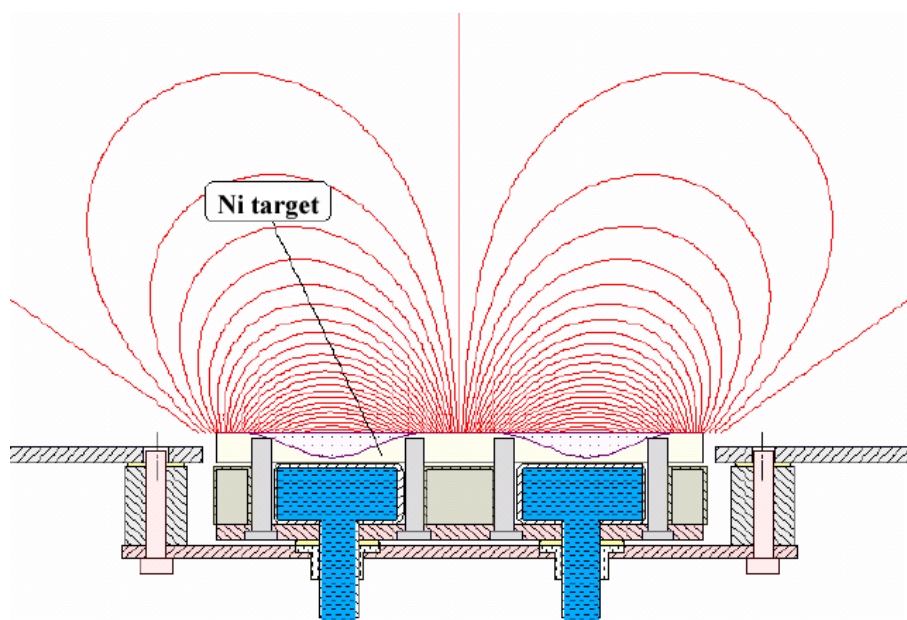
Druhý způsob depozice vrstev představují PVD metody. Jejich fyzikální podstatou je vypařování nebo rozprašování materiálu za přítomnosti nízkého tlaku. Oproti CVD metodám jsou jejich hlavními přednostmi nižší požadovaná teplota, malá a homogenní tloušťka vrstvy a v neposlední řadě také prakticky nulový ekologický dopad, kdy se při procesu depozice neuvolňují žádné toxické látky. Jednou z hojně užívaných PVD metod je magnetronové naprašování. Díky využití magnetronu je možné udržovat výboj při nižším napětí i tlaku, přičemž energie částic je oproti jiným PVD metodám řádově vyšší. Výsledná vrstva je tak deponována rychleji a je prvkově čistší [2]. Navíc lze pomocí předpětí na substrátu taktéž řídit množství energie dopadajících částic na vrstvu a v rámci průmyslového využití lze povlakovat i větší plochy [1, 2, 3].

2.2 Magnetronové naprašování

Magnetronové naprašování se řadí mezi PVD metody, kdy se pevný materiál přeměňuje na plyn. Částice tohoto plynu poté kondenzují na substrátu a tvoří tak požadovanou vrstvu [1]. K uvolnění atomů z pevného terče je zapotřebí energie, jejímž primárním nositelem jsou v daném případě (namísto vysoké teploty) ionty pracovního plynu, kterým je vakuová komora naplněna. Před rozprašováním terčem se vytvoří plazma a vlivem záporného napětí na terči se kladné ionty urychlují, na tento terč dopadají a předávají zde část

své kinetické energie. Pokud je energie dostatečně velká k překonání povrchové vazby, dojde k vyražení atomu z terče. Ten následně prochází výbojem a dopadá na substrát, kde vytváří tenkou vrstvu. Obecně lze rozprašovat libovolný materiál, jehož tenze par (čili nejnižší tlak, za něhož může látka existovat v kapalném nebo pevném stavu za dané teploty) je dostatečně nízká na to, aby mohl být vložen do vakua. V praxi jsou však preferované konkrétní prvky, kupříkladu Cu, Ti, Al, W, Mo, Cr či Si.

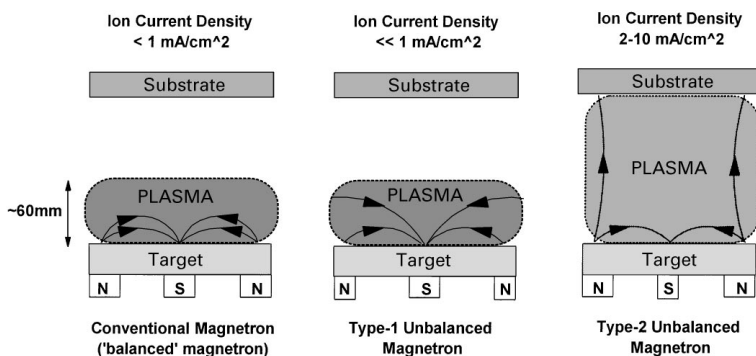
Kromě samotných atomů terče mohou být vyraženy taktéž sekundární elektrony. V případě magnetronového naprašování je pak za pomoci permanentního magnetu či elektromagnetu vytvořeno před rozprašovaným pevným terčem magnetické pole (jak ukazuje obr. 1), jež zachycuje jednotlivé elektrony a zakřivuje jejich dráhu [2]. Tyto elektrony se pohybují po šroubovicích podél siločár v blízkosti katody, čímž se krom dráhy letu prodlužuje taktéž doba jejich setrvání v oblasti výboje. Díky tomu se zvyšuje pravděpodobnost ionizace dalších atomů, dochází ke zvýšení proudu iontů bombardujících terč a v důsledku toho k vyšší rychlosti samotné depozice. To vše při relativně nízké požadované teplotě pracovního plynu (150 – 500 °C) [3].



Obrázek 1: Schematické znázornění magnetronu. Převzato z [4].

2.2.1 Vyvážený a nevyvážený magnetron

Magnetické pole, jež má klíčový vliv na parametry depozice, je vytvářeno dvojicí magnetů kruhového tvaru. První magnet je umístěn uprostřed terče, druhý pak na jeho vnější hraně. V závislosti na tom, zda-li vnitřní a vnější magnet vytváří stejně silné magnetické pole, dělíme magnetrony na vyvážené (CM - *Conventional magnetron*) a nevyvážené (UM - *Unbalanced magnetron*). V případě vyváženého magnetronu, kdy vnější i vnitřní magnet tvoří stejně silná magnetická pole, je hustota plazmatu vysoká primárně v oblasti kolem terče [5]. To umožňuje použití substrátu se zvýšenou teplotní citlivostí, jelikož kolem něj je hustota plazmatu nízká. U nevyváženého magnetronu je vždy jeden ze dvou magnetů silnější. Typicky se pak jedná o magnet vnější, což způsobuje zvětšení oblasti hustého plazmatu až k substrátu, čímž se zesiluje iontový tok na substrát [2]. Schematické znázornění obou případů je vidět na obr. 2.



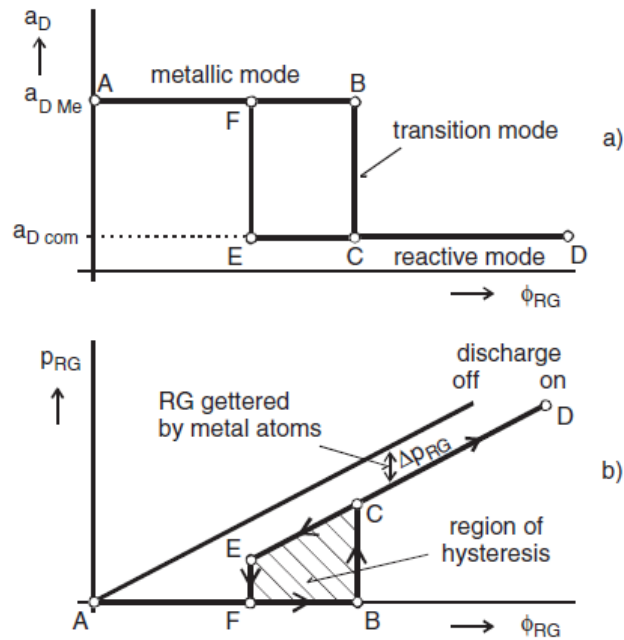
Obrázek 2: Schematické znázornění vyváženého a nevyváženého magnetronu (se silnějším a slabším vnitřním magnetem). Převzato z [2].

2.2.2 Reaktivní naprašování

Jednou z velice oblíbených technik depozice tenkých vrstev se specifickými vlastnostmi je reaktivní naprašování. Jeho principem je proces rozprašování kovového terče za přítomnosti reaktivního plynu (RG - Reactive gas), na substrátu pak vznikají sloučeniny jako oxidy, nitridy, karbidy či fluoridy [5]. Reaktivní plyn reaguje jak s rozprašeným materiálem, tak se samotným terčem. V závislosti na průtoku reaktivního plynu ve vakuové komoře probíhá reaktivní magnetronové naprašování v kovovém, přechodovém nebo reaktivním

módu. Jednotlivé módy jsou charakterizovány různým stupněm pokrytí terče sloučeninou. V kovovém módu je terč kovový. Při zvýšení průtoku reaktivního plynu dochází k pokrytí terče sloučeninou a výboj přechází do reaktivního módu. Při následném snížení průtoku reaktivního plynu dojde k postupnému očišťování terče a návratu do kovového módu [5]. Přechod mezi těmito módy se vyznačuje hysterézním chováním, viz obr. 3.

Přechod do reaktivního módu má za následek pokles rozprašovacího výtěžku, jelikož čistý materiál má rozprašovací výtěžek vyšší než sloučenina. Hysterézní jev tak vede k poklesu depoziční rychlosti a vnáší do celého procesu nestabilitu, je tudíž nežádoucí a snažíme se o jeho eliminaci. Toho se v praxi dosahuje buďto vysokou čerpací rychlostí nebo omezením toku reaktivního plynu na terč jeho pulzním napouštěním do komory, k čemuž je zapotřebí zavedení zpětnovazebného řízení zajišťující správné nastavení těchto parametrů [5].



Obrázek 3: Znázornění a) závislosti depoziční rychlost a_D na průtoku reaktivního plynu Φ_{RG} a b) závislosti tlaku reaktivního plynu p_{RG} na průtoku reaktivního plynu Φ_{RG} . Převzato z [5].

2.2.3 Parametry depozice

Primárním cílem depozice tenkých vrstev je tvorba vrstev daných fyzikálních a chemických vlastností. Z toho důvodu je žádoucí co možná největší variabilita jednotlivých fyzikálních parametrů celého procesu naprašování. Hodnoty indukce magnetického pole se typicky pohybují v rozmezí 300 – 500 G v závislosti na použitých magnetech a úroveň (poměr) vyvážení se v praxi koriguje nastavitelnou vzdáleností od terče. Tlak pracovního plynu činí řádově desetiný až jednotky pascalů. Limitujícím faktorem jsou na jedné straně podmínky výboje, kdy při malém tlaku dochází k nedostatečnému množství srážek elektronů a nelze zapálit výboj. Na straně druhé pak žádoucí vyšší energií deponovaných částic, která se s rostoucím množstvím srážek rozprášených atomů snižuje. Napětí pro výboj se typicky nastavuje mezi 300 a 700 V, tloušťka terče pak v řádech jednotek milimetrů. Rychlost depozice je dána primárně rychlostí odprašování, která je úměrná proudové hustotě (resp. proudu) na terč. Užívané proudové rozpětí je značně velké (desetiný až desítky ampér) a jeho konkrétní hodnoty se odvíjejí od velikosti terče a kontinuálního či pulzního charakteru magnetronového rozprašování. Odprašování terče je nestejněměrné a je dáno primárně tvarem magnetických siločár. Místo největšího výtěžku terče se pak nazývá erozní zóna. Energie částic dopadajících na substrát se pohybuje nejčastěji do 100 eV a charakter deponované struktury je dán taktéž teplotou substrátu, jež zvyšuje mobilitu částic na jeho povrchu [2, 5].

2.3 Interakce iontů s povrchy

Klíčovou fází depozice metodou magnetronového naprašování je interakce iontů plazmatu s povrchem pevné látky (terčem). Jednotlivé parametry této interakce rozhodují o rozprašovacím výtěžku a v konečném důsledku o rychlosti depozice tenké vrstvy.

Po dopadu iontu na povrch terče může nastat více kvalitativně odlišných procesů. Za prvé může dojít k odrazu neutralizovaného iontu od povrchu. V případě druhém iont proniká do struktury pevné látky, kde se v důsledku kaskádového srážkového procesu přeměňuje kinetická energie na teplo. V závislosti na srážkách uvnitř pevné látky může (avšak nemusí) dojít k emisi sekundárních elektronů, rozprášení atomů či iontů materiálu. Nalétávající iont po předání energie zůstává zachycen v pevné látce a způsobuje poruchy krystalové mřížky (vakance, intersticiály). Pro odraz/záchyt iontů povrchem

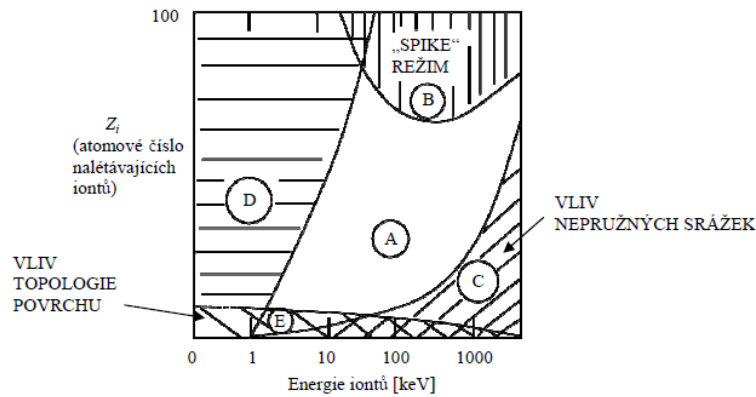
pevné látky platí vztah:

$$R + \eta = 1 \quad (1)$$

kde R představuje koeficient odrazu dopadajících iontů a η je koeficient zachycení iontů na povrchu [6]. Suma těchto koeficientů dává jedničku, což značí, že se jedná o jediné dva možné stavy. Experimentálně pak bylo dokázáno, že pro inertní plyny s rostoucí energií nalétávajících iontů roste i koeficient zachycení [7, 8].

2.3.1 Charakteristika režimů interakce

Vztáhne-li se interakce nalétávajících iontů na povrch terče k atomovému číslu Z_i a energii těchto dopadajících iontů E_{ion} , lze rozlišit 5 různých oblastí, jež se od sebe kvalitativně liší (viz obr. 4). Oblast A představuje lineární izotropní kaskádu. Počet vyražených atomů je závislý na množství předané energie a místě dopadu iontu. Za předpokladu izotropního předávání energie je možno použít transportní teorii, jež je základem pro odvození dalších teoretických vztahů. Díky tomu je jedinou oblastí, kterou lze efektivně analyticky zkoumat. Ve všech zbylých oblastech již v důsledku porušení izotropie (D), vlivu topologie povrchu (E), složitě vyjádřitelným energetickým ztrátám (C) či nelineárním efektům (B) transportní teorii nelze použít a jakákoliv simulace systému je tak neúměrně složitější [6].



Obrázek 4: Schematické znázornění kvalitativně odlišných oblastí interakce nalétávajícího iontu s povrchem terče v závislosti na atomovém čísle Z_i a energii dopadajících iontů E_{ion} . Převzato z [6].

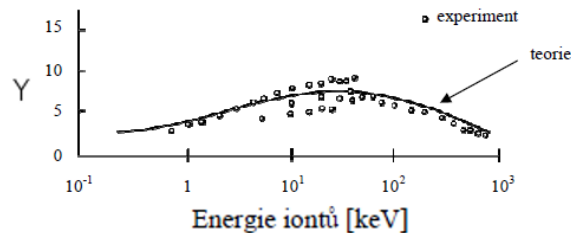
2.3.2 Energiové a úhlové rozdělení rozprášených atomů

Základními parametry interakce iontu s povrchem pevné látky jsou struktura pevné látky (hmotnost jejích atomů a vazebná energie materiálu), dále pak hmotnost, energie a úhel dopadu nalétávajícího iontu. S výjimkou energie a úhlu dopadu se jedná o parametry dané volbou terče a pracovního plynu. V případě magnetronového naprašování je navíc nalétávající iont urychlován elektrickým polem a dopadá tak vždy prakticky kolmo na terč. Jedinou proměnnou tak zůstává energie iontů. Definuje-li se bezrozměrná veličina výtěžek rozprašování Y jako počet rozprášených atomů připadajících na jeden dopadající iont, pak závislost výtěžku rozprašování na energii dopadajících iontů ($Y = Y(E_{\text{ion}})$) bude pro hodnoty $E_{\text{ion}} < 1 \text{ keV}$ přibližně lineárně rostoucí [8]. V dané oblasti se energie předaná částicím pevné látky zvyšuje, čímž se navyšuje i šance na jejich rozprášení. Těmto hodnotám energie pak odpovídá Sigmundův vztah:

$$Y = \frac{3\alpha}{4\pi} \frac{4m_i m_t}{(m_i + m_t)^2} \frac{E_{\text{ion}}}{U_0} \quad (2)$$

kde α je rostoucí monotónní funkce závislá na $\frac{m_i}{m_t}$, U_0 je povrchová vazebná energie materiálu a m_i a m_t jsou hmotnosti nalétávajícího iontu a atomu pevné látky [6].

Pro vysoké hodnoty energie E_{ion} je rozprašovací výtěžek naopak klesající. Důvodem je v tomto případě to, že nalétávající ionty s velkou energií pronikají příliš hluboko do struktury látky a atomy, které získaly energii od iontu, tak již nedokáží materiál opustit. Přímá závislost výtěžku rozprašování na energii dopadajících iontů je dobře patrná z grafu na obr. 5.



Obrázek 5: Znázornění závislosti výtěžku rozprašování Y na energii dopadajících iontů E_{ion} . Převzato z [6].

Obecné vyjádření Sigmundova vztahu pro rozdělovací funkci rozprášených atomů v závislosti na jejich energii a směru má tvar:

$$\frac{d^3Y}{dEd^2\Omega} = F_D \frac{\Gamma_\lambda}{4\pi} \frac{1-\lambda}{NC_\lambda} \frac{E}{E+U_0^{3-2\lambda}} \cos\theta \quad (3)$$

kde Ω je prostorový úhel, E udává energii rozprášené částice a θ úhel, pod nímž rozprášená částice vylétává, F_D představuje „distribuční poškození“, λ je mocninný parametr interakčního potenciálu částic, N je atomová hustota vzorku a C_λ a Γ_λ jsou parametry závislé na formě přenosu energie při kolizi částic [8].

Po zobecnění nahrazením konstant v exponentu fitovacími parametry c a a lze po úpravě získat vyjádření závislé separovaně na veličinách Ω a E . Úhlové rozdělení je závislé na cosinu úhlu θ vylétávajících částic z terče a má následující podobu:

$$\frac{dY}{d\Omega} \propto \cos^c\theta \quad (4)$$

kde y je fitovací parametr. Pro energie pak má výsledná rozdělovací funkce tvar:

$$\frac{dY}{dE} \propto \frac{E}{(E+U_0)^{a+1}} \quad (5)$$

kde a představuje opět fitovací parametr (nejčastěji pro volbu $\lambda = 0$ nabývá hodnoty $a = 2$) [8].

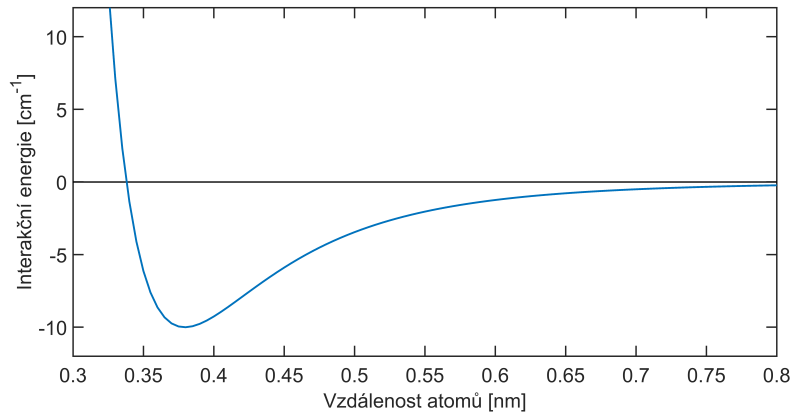
Pro experimentální studium rozprašování se využívají rozličné metody. Ty nejobvyklejší využívají sledování změn hmotnosti či tloušťky terče, sběr rozprašovaného materiálu, iontovou mikroskopií či spektroskopickou metodu. V technické praxi je nejpoužívanějším inertním plynem argon, a to z důvodu spojení vysokého výtěžku rozprašování a cenové dostupnosti [7].

2.4 Interakce atomů plynu

Další neméně důležitou interakcí, ke které při procesu naprašování dochází, jsou srážky mezi atomy plynu. Atom emitovaný z terče musí překonat vzdálenost mezi terčem a substrátem. Na této cestě může dojít (a zpravidla dochází) ke srážkám, a to jak s atomy a ionty pracovního plynu, tak s dalšími rozprášenými částicemi.

Interakce částic je přímým důsledkem jejich silového působení. Na atomární úrovni je toto vzájemné působení vyjádřeno interakčním potenciálem částic.

Příkladem budiž Lennard-Jonesův potenciál popisující závislost potenciální energie V dvou neutrálních částic na vzdálenosti jejich středů r (viz obr. 6). V nízkotlakém plazmatu, kde hustota částic není příliš vysoká, lze využít předpoklad, že v krátkém časovém intervalu dochází vždy jen k interakci dvou částic (binární srážky) [9][10].

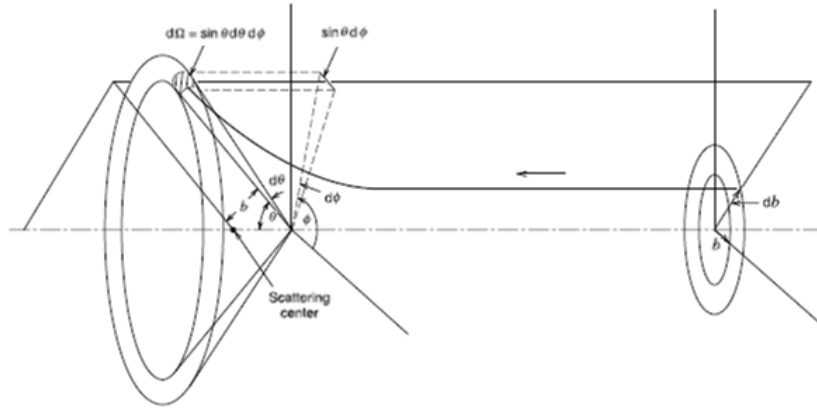


Obrázek 6: Lennard-Jonesův potenciál (závislost interakčního potenciálu V částic na vzdálenosti jejich středů r).

2.4.1 Druhy a parametry binárních srážek

Binární srážky se rozlišují na pružné a nepružné. Pro dokonale pružné srážky platí, že jejich celková kinetická energie interagujících částic zůstává konstantní [10]. Úhel rozptylu Θ (viz obr. 7), jakožto funkce interakčního potenciálu a záměrného parametru b tak lze vypočítat za využití klasické fyziky pro pohyb hmotných bodů v interakčním potenciálu. Ukazuje se, že v případě pružných srážek klasické výpočty dávají dobrý soulad se skutečností [10]. Co se nepružných srážek týče, zde dochází k přeměně části kinetické energie na energii vnitřní a pro popis interakce je třeba vzít v úvahu změny v kvantově-mechanické struktuře částic (např. přeměna kinetické energie na potenciální při excitaci elektronu).

Jedním z nejvýznamnějších parametrů pro popis binárních srážek je účinný průřez interakce σ , který představuje plochu způsobující rozptyl svazku nalétávajících částic. Geometrický význam této veličiny je dobře patrný z obr. 7 a



Obrázek 7: Schematické znázornění rozptylu částice po binární srážce. Převzato z [10].

pro jeho diferenciální tvar platí:

$$\sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta) = \frac{1}{\Gamma} \frac{dN_r}{d^2\Omega dt} \quad (6)$$

kde v_r je velikost rozdílu rychlostí dvou částic, Ω udává prostorový úhel, Γ označuje tok částic, N_r počet částic rozptýlených pod úhlem Ω a t čas [12]. Celkový účinný průřez je pak dán vztahem:

$$\sigma(v_r) = 2\pi \int_0^\pi \sigma_{\text{dif}}(v_r, \Theta) \sin \Theta d\Theta \quad (7)$$

Pro pravděpodobnostní popis srážky je znalost této veličiny žádoucí, obvykle však není znám její diferenciální tvar [10].

2.4.2 Modely pružných srážek

Stejně jako v jiných oblastech, při nichž se simulují reálné děje, je třeba i zde zavést modely, jež dostatečně věrně popisují děje reálné, ale zároveň jsou výpočetně nenáročné. Pro pružné srážky neutrálních částic se v literatuře často zmiňují následující modely: model tvrdých koulí (HS - hard sphere), proměnných tvrdých koulí (VHS - variable hard sphere), proměnných měkkých koulí (VSS - variable soft sphere) a M1 model [11]. Následující přehled

zahrnuje vzorce pro celkový účinný průřez σ a rozptylový úhel Θ v závislosti na záměrné vzdálenosti b .

V případě modelu tvrdých koulí je účinný průřez konstantní nezávisle na hodnotě rychlostí obou částic, což odpovídá rovnoměrnému rozdělení $\cos(\frac{\Theta}{2})$. Jednotlivá vyjádření mají tvar:

$$\sigma(v_r) = \pi d^2, \quad \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) = \frac{b}{d}, \quad b \in (0; d) \quad (8)$$

kde d je efektivní průměr interagujících atomů a pro model tvrdých koulí je roven součtu poloměrů obou částic [9]. Druhým používaným modelem je model proměnných tvrdých koulí. Tento model zachovává vyjádření účinného průřezu (stejně jako úhlu rozptylu). Účinný průřez však již není konstantní, ale s rostoucí rychlostí se zmenšuje, konkrétně pak $d = d_{\text{ref}}\left(\frac{v_{r,\text{ref}}}{v_r}\right)^\nu$, kde indexy „ref“ představují vztažné referenční hodnoty. Model proměnných měkkých koulí se od předchozích modelů liší mocninným parametrem β u výpočtu úhlu rozptylu (přesněji: $\cos(\frac{\Theta}{2}) = (\frac{b}{d})^\beta$), který umožňuje preferenci malých či velkých úhlů rozptylu. Posledním ze zmíněných modelů je M1 model. Ten představuje modifikaci VHS modelu ($d_{\text{ref},\text{M1}} = \sqrt{\frac{4}{3}}d_{\text{ref},\text{VHS}}$) a přináší zpřesnění makroskopických veličin při zachování počtu parametrů oproti modelu VHS (např. odvozený koeficient difuze je pro model M1 až o 20% přesnější než model VHS [11]). Konkrétní vztah pro celkový účinný průřez má podobu:

$$\sigma = \pi d(v_r)^2, \quad d(v_r) = d_{\text{ref}} \left[\left(\frac{k_B T_{\text{ref}}}{\varepsilon(v_r)} \right)^{\omega-1/2} \frac{1}{\Gamma(5/2 - \omega)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (9)$$

kde d_{ref} představuje referenční hodnotu efektivního průměru interagujících atomů, $\varepsilon(v_r)$ je relativní kinetická energie interagujících částic, T_{ref} označuje referenční teplotu, k_B Boltzmannovu konstantu ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$) a ω je index viskozity [12]. Vyjádření pro úhel rozptylu má pro model M1 lineární průběh:

$$\Theta(b, v_r) = \pi \left(1 - \frac{b}{d(v_r)} \right) \quad (10)$$

Uvedené modely představují vztahy pro diferenciální účinný průřez srážky, který aproximuje reálnou interakci částic. Další (o něco složitější možností) je vycházet z interakčního potenciálu, ze kterého lze odvodit vztah pro diferenciální účinný průřez. V takovém případě však výsledkem obvykle není vztah analytický [10][13].

2.5 Simulace transportu částic

Simulace transportu rozprášených atomů v magnetronovém výboji vyžaduje v rámci popisu jednotlivých procesů (kupříkladu interakcí atomů) stochastický přístup. Jednou z nejrozšířenějších skupin metod tohoto typu jsou metody Monte Carlo (MC).

2.5.1 Metoda Monte Carlo

Jedná se o třídu numerických metod pro řešení úloh pomocí modelování náhodných veličin a statistického odhadu jejich charakteristik. Slouží k popisu stochastických jevů, kdy jednotlivé prvky zkoumaného souboru mají náhodný charakter, ale z hlediska většího objemu dat je lze popsat statisticky. Typickým využitím je výpočet složitých určitých integrálů, hledání řešení diferenciálních rovnic nebo simulace experimentů. Historie MC metody sahá až do roku 1777, kdy byl poprvé princip této metody použit francouzským matematikem G. L. L. de Buffonem v rámci řešení takzvané Buffonovy úlohy o jehle. V ní se snaží o nalezení hodnoty čísla π na základě pravděpodobnosti dopadu jehly na některou z narýsovaných rovnoběžek v rovině [14]. MC metoda jako taková pak byla formulována ve 40. letech 20. století a jejími autory jsou S. M. Ulam a J. von Neumann, kteří v rámci výzkumu řešili otázku, jaké procento neutronů v určité dávce pronikne nějakou překážkou.

Samotný algoritmus metody MC je dvoukrokový. V prvním kroku se formuluje nová úloha náhodného charakteru, jejíž řešení je shodné s úlohou původní. V kroku druhém se pak pomocí statistických experimentů hledá řešení této nové úlohy. To může být založené buďto na geometrické pravděpodobnosti (např. Buffonova úloha) nebo na odhadu střední hodnoty náhodné veličiny (např. výpočty integrálů). Geometrická pravděpodobnost uvažuje realizaci náhodných pokusů s výstupní hodnotou 1 (úspěch) nebo 0 (neúspěch). Výstupní hodnoty z realizace pokusů se sumarizují a stanoví se hodnota pravděpodobnosti úspěchu. Obecně pak platí, že pro zvýšení přesnosti o jeden řád je nutné zvýšit počet simulací alespoň o řády dva [15].

2.5.2 Metoda Direct Simulation Monte Carlo

Při popisu proudění plynu za velmi nízkých tlaků nelze použít tzv. kontinuální přístup, ale musíme pracovat s rozdělovací funkcí částic ve fázovém prostoru. Při numerickém řešení těchto úloh je rozdělovací funkce aproximována souborem N simulačních částic s danou polohou \mathbf{r}_i a rychlostí \mathbf{v}_i

i -té simulační částice. Jedná se tedy o diskrétní popis hmoty s konkrétním vyjádřením:

$$f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}) \approx \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) \delta(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}) \quad (11)$$

kde $f(t, \mathbf{r}, \mathbf{v})$ je rozdělovací funkci částic, \mathbf{r} označuje polohový vektor, \mathbf{v} vektor rychlost [9]. Pro zajištění dostatečné přesnosti výsledků simulace je potřeba dostatečný počet simulačních částic k přesnému vzorkování rozdělovací funkce.

Jednou z nejvýznamnějších metod používanou pro výpočet proudění plynu za velmi nízkých tlaků je metoda Direct simulation Monte Carlo (DSMC). Ta byla navržena roku 1981 G. A. Birdem a na rozdíl od jiných postupů již bere v potaz vzájemné interakce všech simulovaných částic [16]. Oproti metodám nezohledňujícím tyto interakce s sebou nese nevýhodu v podobě vyšší výpočetní složitosti, ta je však vyvážena vyšší přesností výsledků. Primárním účelem při návrhu metody DSMC byl popis a simulace proudění zředěného plynu, např. při vstupu kosmických sond do horních vrstev atmosféry [17].

Dnes představuje krom jiného velmi užitečný nástroj k modelování plazmatu v magnetronových výbojích. Jedná se o poměrně mladou disciplínu a metoda DSMC v rámci simulací dovolila, oproti dříve převažujícím metodám (např. Test Particle Monte Carlo), zachytit zředění pracovního plynu před terčem, jež má zásadní vliv jak na rychlost, tak na charakter depozice tenkých vrstev. To ukazují kupříkladu výsledky Tsukasa Kobayashiho et al. [18], jež se zabýval simulací rozprašování atomů titanu v argonové atmosféře. Srovnáním s dříve užívanými metodami zjistil, že zředění pracovního plynu vede k vyšší rychlosti depozice i lepšímu pokrytí substrátu. Stejně problematické se později věnoval např. S. Kadlec [19], jež roku 2007 publikoval výsledky simulací neutrálních atomů titanu a argonu v pulzních magnetronových výbojích, kde se plyn vlivem impulzů pohybuje ve formě rázových vln a vede k dočasným změnám hustoty a tlaku v komoře. Metoda DSMC byla využívána taktéž pro simulace v průmyslovém měřítku [16].

2.5.2.1 Algoritmus simulace

Na začátku simulace dojde k načtení vstupních dat, tj. geometrie simulační oblasti, druh a parametry částic a jejich interakcí a počáteční stav (poloha \mathbf{r} a rychlost \mathbf{v}) souboru částic.

Poté je spuštěn cyklus časového vývoje systému během krátkého časového kroku Δt . Tento cyklus sestává ze tří kroků. V prvním kroku dochází k časové

integraci přes všechny částice, a to na základě předem definovaných pohybových rovnic a bez vlivu interakce částic s povrchy či dalšími částicemi. Tyto pohybové rovnice pro částice ve vnějším poli jsou výsledkem Lorentzovy síly dosazené do druhého Newtonova zákona. Pro neutrální částice je jejich řešením rovnoměrný pohyb po přímce, jejíž rychlost je mezi dvěma srážkami konstantní. Klíčovým parametrem při realizaci integrace je délka časového kroku Δt , která je z důvodu zvýšení efektivity algoritmu v jednotlivých iteracích proměnná. Délka tohoto kroku je dána pravděpodobností srážek částic, kdy se vychází z definice srážkového členu v Boltzmannově rovnici a definice účinného průřezu. Její vyjádření nese tvar:

$$P = \nu \Delta t \quad (12)$$

kde $\nu = n\sigma(v_r)v_r$ je frekvence srážek a pro časový krok iterace Δt platí logická podmínka $\Delta t\nu \ll 1$ [10].

V dalším kroku se, v závislosti na nové poloze částic, vyhodnocuje interakce s povrchy geometrie. Obecně mohou nastat dva případy, kdy se částice buďto absorbuje a její simulace tím končí nebo dojde k jejímu odrazu, což má za následek příslušnou změnu vektoru rychlosti \mathbf{v} částice.

Třetí krok cyklu představuje realizace objemových srážek mezi částicemi. Ty se vyhodnocují pomocí generátoru náhodných čísel tak, aby statistické charakteristiky interakcí odpovídaly zadanému fyzikálnímu popisu interakcí danému celkovými účinnými průřezy σ (viz kap. 2.4.2). Při samotné interakci částic se nejdříve určí náhodný úhel rozptylu $\Theta_s(k_1)$, kde parametr k_i je náhodně generované číslo rovnoměrného rozdělení mezi nulou a jedničkou ($k_i = U(0, 1)$). Dále se určí vektor roviny srážky $\mathbf{k}_\perp(\mathbf{v}_r, \Theta_s, \phi)$, přičemž klíčovou roli pro odvození závislostí na těchto parametrech představuje statisticky popsaná veličina záměrného parametru: $b = \sqrt{U(0, b_{\max})}$.

Konkrétně pro model tvrdých koulí má vyjádření rozptylového úhlu Θ_s tvar:

$$\cos(\Theta_s) = 2k_1 - 1 \quad (13)$$

Pro model M1 pak platí vztah:

$$\Theta_s = \pi \left(1 - \sqrt{k_2}\right) \quad (14)$$

Úhel natočení roviny určující pohyb částic během srážky je v případě obou srážkových modelů rozdělen rovnoměrně ($\phi = 2\pi k_3$) [11]. S využitím zákona

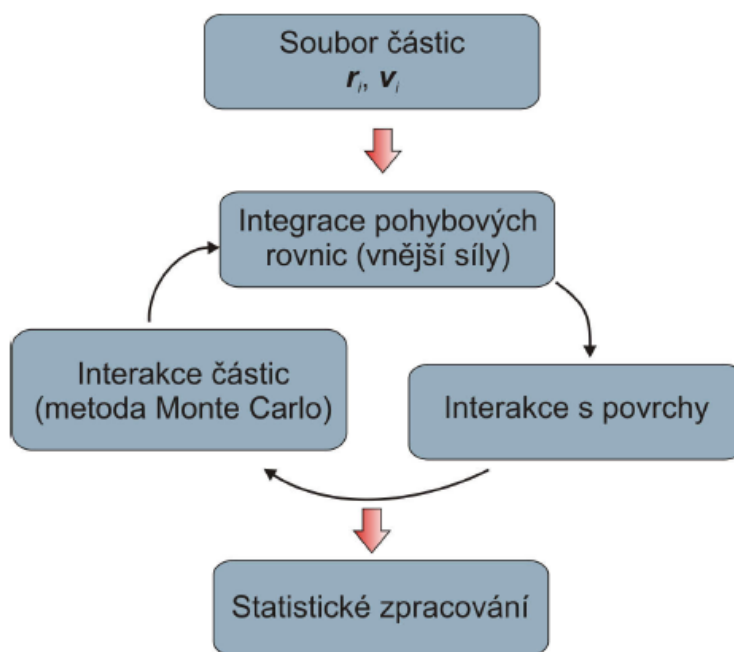
zachování energie a zákona zachování hybnosti se poté vyjádří vektory rychlosti po srážce:

$$\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_1 - \frac{m_2}{m_1 + m_2}(\mathbf{v}_r(1 - \cos \Theta) + \mathbf{k}_\perp) \quad (15)$$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2 + \frac{m_2}{m_1 + m_2}(\mathbf{v}_r(1 - \cos \Theta) + \mathbf{k}_\perp) \quad (16)$$

kde \mathbf{v}_r je rozdíl rychlostí interagujících částic ($\mathbf{v}_r = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$) [10].

Celý proces se následně iteruje v čase až do splnění zastavovací podmínky, kterou zpravidla představuje celková doba simulace (resp. konečný počet jejich iterací). V průběhu cyklu dochází ke statistickému zpracování dat, které představuje hlavní výstup simulace [9]. Celý algoritmus numerické metody je pak viditelný na obr. 8.



Obrázek 8: Schematické znázornění algoritmu metody DSMC. Převzato z [9].

3 Cíle bakalářské práce

1. Prostudovat literaturu týkající se magnetronového naprašování a numerické metody Direct Simulation Monte Carlo pro simulaci transportu částic za nízkých tlaků.
2. Seznámit se s programem pro simulaci transportu částic v magnetronových výbojích vyvíjeném na KFY. Navrhnout simulaci rozprašování terče a transportu terčového materiálu na substrát v argonové atmosféře.
3. Vypočítat podíl rozprášených atomů dopadajících na substrát a jejich rozdělovací funkci. Vyšetřit vliv tlaku, výbojového proudu a modelu interakcí mezi atomy na výsledky simulací. Diskutovat dosažené výsledky s ohledem na limity použitého fyzikálního modelu.

4 Návrh modelu

Tato práce se zabývá simulací transportu neutrálních částic v magnetronových výbojích za nízkých tlaků. Zkoumá procesy v prostoru zadané geometrie s cílem popsat chování pracovního plynu během rozprašování kovového terče. K implementaci slouží program *dsmc* vyvíjený na katedře fyziky založený na principech metody Direct Simulation Monte Carlo (viz kap. 2.5.2). Pracovním plynem je argon a jako terčový materiál byl zvolen titan. Použité parametry těchto atomů jsou uvedeny v tab. 1. V rámci simulací je zanedbávána interakce atomů argonu a titanu s plazmatem, tedy zejména ionizace těchto atomů elektrony, které jsou soustředěny převážně před rozprašovaným terčem, kde jsou drženy magnetickým polem magnetronu. Započtení pohybu nabitých částic a jejich interakcí jde svou složitostí nad rámec této práce.

Cílem práce je prozkoumat závislost celkového toku atomů titanu na substrát a jeho energiové rozdělovací funkce, míru zředění v oblasti před terčem a prostorové rozložení obou prvků v simulační oblasti (vakuové komoře). To vše v závislosti na proměnných hodnotách tlaku a výbojového proudu. Kromě vlivu fyzikálních veličin je zařazeno i porovnání pro odlišné srážkové modely a závislost na počtu simulačních částic.

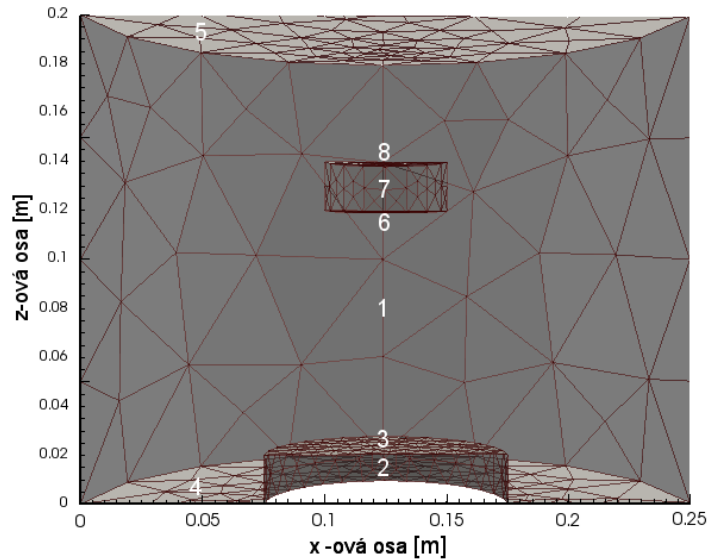
prvek	fyz. veličina	nastavená hodnota
Ar	m_{Ar}	39,948
Ti	m_{Ti}	47,867

Tabulka 1: Použité parametry atomů pracovního plynu a terčového materiálu. Uvedené hodnoty odpovídají všem provedeným simulacím.

4.1 Geometrie

Depozici tenkých vrstev je možné provádět na rozměrově různorodé úrovni, tedy jak v experimentálním, tak i průmyslovém měřítku. Z pohledu počítačových simulací s sebou větší rozměry nesou negativní důsledky v podobě vysoké výpočetní náročnosti, kdy se i při řádově malých tlacích pracuje s velkým objemem dat. Z tohoto důvodu je vhodná geometrie menších rozměrů (řádově do desítek centimetrů). Pro experimentální ověření výsledků simulace je

taktěž žádoucí vycházet z reálné (a dostupné) depoziční komory. Tomuto požadavku odpovídá i navržená geometrie vycházející z aparatury používané na katedře fyziky. Geometrie má tvar válce o průměru 25 cm a výšce 20 cm. Na spodní straně komory je centrálně umístěn válcový magnetron s terčem na povrchu o průměru 10 cm zasahující 2 cm do válcové simulační oblasti. Uvnitř geometrie (přesně 10 cm nad terčem) se nachází válec reprezentující držák substrátů o průměru 5 cm a výšce 1 cm. Celý povrch geometrie je tvořen trojúhelníkovými elementy, jejichž hustota je úměrná předpokládanému výskytu simulovaných částic, tj. čím častější reakce dané části povrchu se simulovanými částicemi, tím větší hustota elementů. Určité soubory elementů pak tvoří větší segmenty geometrie, které jsou (např. z pohledu okrajových podmínek simulace) vzájemně odlišitelné. Těchto segmentů je celkem osm (viz obr. 9): (1) stěna komory, (2) vrchní strana rozprašovaného terče, (3) bok rozprašovaného terče, (4)(5) dolní a horní vstup, (6)(8) spodní a vrchní strana držáku substrátu, (7) bok držáku substrátu. Kromě dělení povrchu je diskretizován i vnitřní objem komory, a to na buňky o rozměrech $1 \times 1 \times 1 \text{ cm}^3$.



Obrázek 9: Schéma simulační geometrie s jednotlivými segmenty: 1 - stěna komory, 2 - vrchní strana rozprašovaného terče, 3 - bok rozprašovaného terče, 4 - dolní vstup (přívod pracovního plynu), 5 - horní vstup (odtah vývěvy), 6 - spodní strana držáku substrátu/substrát samotný, 7 - bok držáku substrátu, 8 - vrchní strana držáku substrátu.

4.2 Interakce částic

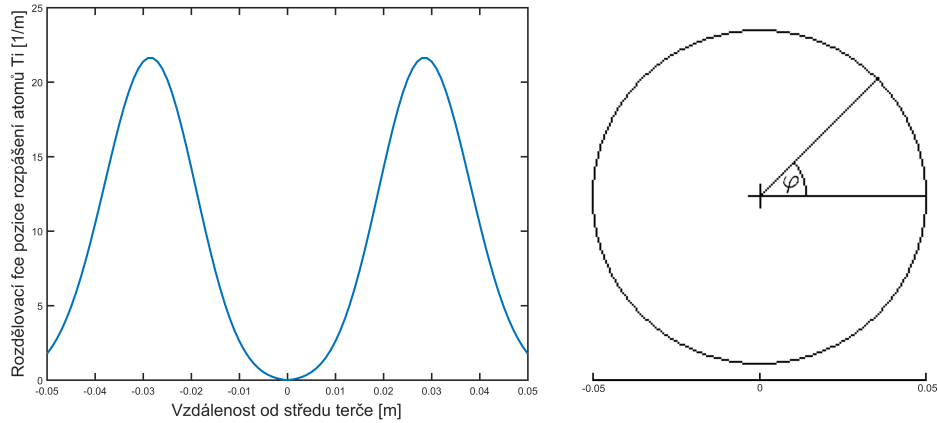
Klíčový faktor simulací prováděných metodou DSMC představuje vyhodnocování interakcí částic v simulované oblasti. Simulované částice reprezentují jednotlivé atomy terčového materiálu a pracovního plynu, v daném případě atomy rozprašovaného titanu a argonové atmosféry. U těchto částic mohou obecně nastat interakce dvojího druhu: reakce atomů s povrchy geometrie a reakce mezi atomy navzájem. Ty jsou vyhodnocovány na základě fyzikálních parametrů atomů a jednotlivých interakcí.

4.2.1 Interakce s povrchy

Argon jakožto inertní plyn interaguje s povrchy geometrie pouze ve formě termalizovaných odrazů, kdy se od povrchů odráží s teplotou rovnou zvolené teplotě povrchu (300 K). Výjimku v tomto směru tvoří jen části geometrie definované jako vstupy, kde je argon generován (resp. absorbován). Tyto povrchy slouží k regulaci množství pracovního plynu uvnitř komory. Terčový materiál simulací představuje titan. Ten je generován na vrchní straně terče (oblast (2) geometrie) a při interakci s libovolnou hranicí geometrie dochází k jeho ulpívání na povrchu, tedy k absorpci. V důsledku magnetického pole přítomného před terčem není titan rozprašován rovnoměrně (viz kap. 2.2). Vzhledem ke kruhové symetrii terče i magnetronu lze rozdělovací funkci toku rozprášených atomů f_r určit nezávisle na úhlu natočení (ten je díky symetrii rovnoměrně rozložen po celém obvodu terče: $\varphi = 2\pi k_4$). Rozdělovací funkci f_r je možné určit experimentálně měřením eroze terče nebo počítačovou simulací na základě známého tvaru magnetického pole. Pro potřeby této simulace byl pro jednoduchost uvažován tvar rozdělovací funkce vycházející z normálního rozdělení s parametry r_0 (vzdálenost ohniska rozprašování od středu terče) a σ_0 (rozptyl rozdělovací funkce), přičemž zvolené hodnoty těchto parametrů byly: $r_0 = 2,5$ cm a $\sigma_0 = 1$ cm. Rozdělovací funkci pak můžeme vyjádřit jako:

$$f_r = r_t e^{-\frac{(r_t - r_0)^2}{2\sigma_0^2}} \quad (17)$$

kde r_t je vzdálenost od středu terče. Rozdělovací funkce pro konkrétní hodnoty parametrů r_0 a σ_0 a geometrické vyjádření úhlu natočení φ je viditelné na obr. 10.



Obrázek 10: Rozdělení počátečních pozic atomů titanu na terči. Na levé straně rozdělovací funkce vzdáleností r počátečních pozic od středu terče. Vpravo horní pohled na terč s vyznačeným úhlem natočení φ .

Kromě počáteční pozice na terči je pro atomy titanu třeba určit též počáteční kinetickou energii ε a úhel Θ , který svírá jejich počáteční rychlost s normálou terče. Pro funkci energiového rozdělení f_ε byl použit vztah (5):

$$f_\varepsilon = a(a-1)U^{a-1} \frac{\varepsilon}{(U+\varepsilon)^{a+1}} \quad (18)$$

kde a a U jsou fitovací parametry. Při splnění předpokladu: $a > 1 \wedge U > 0$ platí, že funkce f_ε je nenulová pro libovolnou hodnotu kinetické energie ε . Proto se nastavuje horní hranice energie, které je možné dosáhnout:

$$\varepsilon_{\max} = E_{\text{ion}} \frac{4m_{\text{Ar}}m_{\text{Ti}}}{(m_{\text{Ar}} + m_{\text{Ti}})^2} \quad (19)$$

kde m_{Ar} a m_{Ti} jsou relativní atomové hmotnosti příslušných prvků a E_{ion} energie dopadajícího iontu argonu, pro níž byla zvolena hodnota 400 eV. Posledním parametrem potřebným k určení počátečních podmínek terčového materiálu je úhel rozptylu Θ vůči normále povrchu terče. Rozdělení rozptylových úhlů f_Θ bylo zadáno ve tvaru:

$$f_\Theta = (c+1) \cos^c \Theta \quad (20)$$

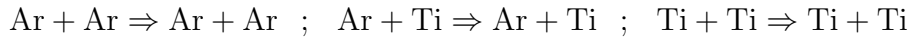
kde c je fitovací parametr. Hodnoty fitovacích parametrů a , c a U jsou pro všechny simulace pevně dané a vychází z výsledků simulací rozprašování realizovaných pomocí programu *SDTrimSP* [20]. Hodnota rozprašovacího výtěžku Y byla nastavena na 1, a to speciálně pro účely převodu výbojového proudu na tok rozprašených atomů (viz kap. 4.3). Nastavení všech hodnot parametrů rozprašování je uvedené v tab. 2.

fyž. veličina	nastavená hodnota
U	$6,83 \cdot 10^{-10}$
a	3,28
c	1,09
ε_{\max}	397 eV
poloměr terče	5 cm
r_0	2,5 cm
σ_0	1 cm
Y	1

Tabulka 2: Nastavitelné parametry rozprašování terčového materiálu. Uvedené hodnoty odpovídají všem provedeným simulacím. Rozprašovaným materiálem je titan.

4.2.2 Interakce mezi atomy

Oproti dalším Monte Carlo metodám jsou při simulaci transportu částic metodou DSMC započteny vzájemné interakce všech částic. Uvažované jsou pouze pružné srážky mezi atomy, kdy nedochází ke ztrátě kinetické energie. Veškeré srážky se taktéž odehrávají pouze na atomární úrovni, jsou vždy binární a všechny částice jsou elektricky neutrální (tzn. absence hromadných srážek více částic, vzniku molekul, iontů či samostatných elektronů). Obecně tak mohou nastat tři druhy interakcí:



S výjimkou simulace, jež srovnává vliv srážkového modelu na celkový tok atomů titanu na substrát a jeho energiové rozdělení, je vždy použit srážkový model M1. Pro každou z interakcí jsou zadány parametry d_{ref} , T_{ref} a ω , přičemž hodnoty těchto parametrů jsou uvedeny v tab. 3. Příslušné vztahy jsou v souladu s teorií popsanou v kap. 2.4.2 a 2.5.2.

typ interakce	veličina	nastavená hodnota
Ar + Ar	d_{ref}	$4,50 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
	T_{ref}	273 K
	ω	0,713
Ar + Ti	d_{ref}	$4,57 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
	T_{ref}	273 K
	ω	0,710
Ti + Ti	d_{ref}	$4,63 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
	T_{ref}	273 K
	ω	0,706

Tabulka 3: Nastavitelné parametry interakcí mezi atomy. Uvedené hodnoty odpovídají srážkovému modelu M1 ve všech případech jeho použití. Hodnoty d_{ref} modelu VHS pro jednu realizovanou simulaci se od modelu M1 liší pouze o hodnotu koeficientu (konkrétně $d_{\text{ref},\text{M1}} = \sqrt{\frac{4}{3}}d_{\text{ref},\text{VHS}}$).

4.3 Parametry simulace

Kromě popisu interakcí částic je třeba definovat i další parametry simulace, k čemuž slouží vstupní textový soubor. Ten obsahuje parametry týkající se vstupů, průběhu a výstupů simulace. Program dovoluje práci s libovolnou geometrií a umožňuje načítání dat z předchozích simulací. Data výstupů mohou představovat toky částic přes jednotlivé hranice geometrie, hodnoty fyzikálních veličin průměrovaných přes každou objemovou buňku či přímo data o jednotlivých částicích (typ, pozice, rychlost). V této práci byly zaznamenávány zejména dopady atomů titanu na povrch substrátu (segment (6) na obr. 9), ze kterých byla následně sestavena rozdělovací funkce energií dopadajících atomů. Na určené hranici geometrie též program umožňuje zaznamenávat hodnoty tlaku průměrované v každém časovém kroku či parametry částic dopadajících na tuto hranici. Zaznamenáván je typ, pozice, rychlost a počet absolvovaných srážek v průběhu pohybu částice. Výpočetní náročnost simulace je dána primárně celkovým počtem simulačních částic. Těm je přisouzena určitá váha, jež reprezentuje počet reálných částic připadajících na každou simulační částici. S nižší hodnotou váhy tak roste přesnost simulací, ale společně s ní i její časová a výpočetní náročnost.

Kromě hlavního vstupního souboru jsou pro výstup simulací důležité taktéž soubory definující tok částic pracovního plynu do komory a výbojového proudu. Tok částic pracovního plynu je funkcí času a je udáván v jednotce sccm (standardní kubický centimetr za minutu). Hodnota této veličiny je nastavována pro každou simulaci s cílem dosažení požadovaného tlaku argonu v komoře, v rámci každé simulace je však hodnota toku konstantní. Jako funkce času je zadávána rovněž hodnota výbojového proudu I (v ampérech). Za předpokladu, že výbojový proud je tvořen pouze ionty a rozprašovací výtěžek Y je roven jedné, můžeme tok rozprašených atomů z terče F vyjádřit jako:

$$F = \frac{I}{e} \quad (21)$$

kde e je elementární náboj. Tento zjednodušený vztah používáme k vyjádření toku rozprašených atomů titanu ve srozumitelnějších hodnotách pomocí proudu v ampérech.

Hodnoty těchto dvou veličin jsou uváděny diskrétně (tj. jen pro konkrétní časy) a mezi dvěma po sobě jdoucími časy jsou vždy lineárně interpolovány. Parametry vstupů jsou pro jednotlivé simulace odlišné a nastavení jejich hodnot je uváděno vždy u příslušné simulace. Celkový přehled a rozsah hodnot je viditelný v tab. 4

parametr	rozsah hodnot
váha částic	$0,2 \cdot 10^{12} - 2 \cdot 10^{12}$
průtok Ar	0 – 142 sccm
výbojový proud	5 – 50 A
doba simulace	$3,5 \cdot 10^{-3} - 0,4$ s
maximální časový krok	$1 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-5}$ s

Tabulka 4: Použité rozsahy parametrů simulace. Hodnoty jsou odlišné pro každou jednotlivou simulaci.

5 Výsledky a diskuze

Postup u jednotlivých simulací byl tříkrokový a totožný pro všechny¹ prováděné simulace. V prvním kroku bylo třeba napustit komoru pracovním plynem a vyčkat do stacionárního stavu. Tyto počáteční simulace byly provedeny pro dva cílové tlaky argonové atmosféry, konkrétně 0,5 Pa a 1 Pa. V obou případech činila váha simulačních částic $1 \cdot 10^{12}$, délka simulace byla 0,4 s a maximální časový krok omezen na $1 \cdot 10^{-5}$ s.

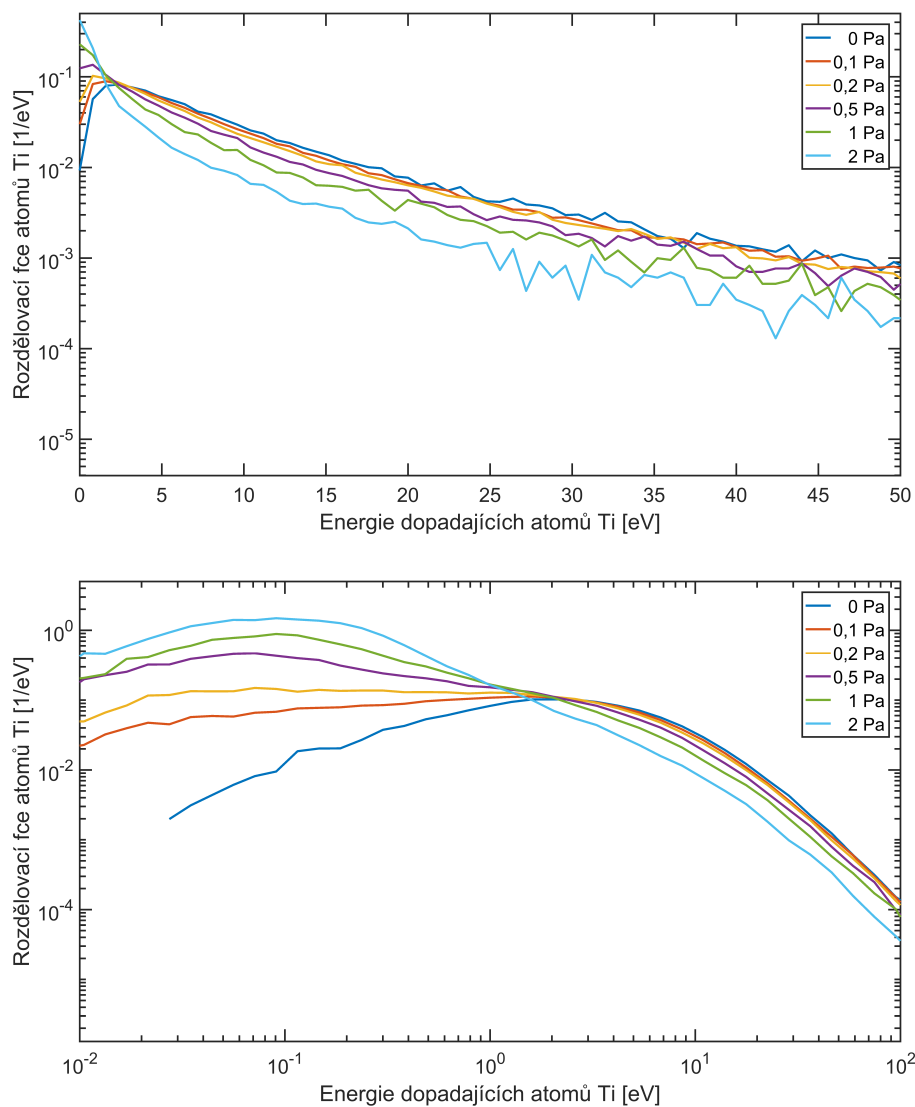
Po napuštění komory argonem následovala kratší simulace (konkrétně $5 \cdot 10^{-3}$ s), nyní již s konstantním tokem rozprášených atomů, při které bylo dosaženo ustáleného stavu v rozložení atomů argonu a titanu v simulační oblasti tak, aby data výsledné simulace nebyla zkreslena dobou náběhu. Poslední krok představovala simulace, během níž byl udržován dosažený stacionární stav a která poskytla výstupní data k dalšímu zpracování. Délka této simulace činila $8 \cdot 10^{-3}$ s, omezení na maximální časový krok představovalo (stejně jako pro předcházející simulaci) $1 \cdot 10^{-6}$ s. Počet simulovaných částic se povětšinou pohyboval kolem jednoho milionu.

5.1 Vliv tlaku pracovního plynu

Tlak pracovního plynu v komoře představuje jednu z klíčových veličin při procesu depozice tenkých vrstev magnetronovým naprašováním. Při předpokladu konstantní váhy částic je v rámci simulací tlak úměrný počtu částic, které se nachází v příslušném objemu. Vzhledem k faktu, že data napouštění komory byla vygenerována pouze pro hodnoty tlaků 0,5 Pa a 1 Pa, bylo odlišných tlaků dosaženo příslušnou úpravou váhy částic. Pro nulový tlak žádných počátečních dat nebylo třeba.

Ač mohou počáteční energie rozprášených atomů titanu nabývat libovolných kladných hodnot až do 397 eV, vzhledem ke tvaru funkce rozdělení počátečních energií (viz kap. 4.2.1) jsou preferovány hodnoty do řádově jednotek eV. Hodnoty energií titanu se v důsledku srážek v komoře navíc dále snižují. S tím koresponduje i graf na obr. 11 (horní panel), kde je již od hodnoty 25 eV znatelný statistický šum způsobený malým zastoupením zameraných částic. Tato charakteristika je typická pro všechny simulace, proto je ve zbylých případech uváděn jen tvar s logaritmickým dělením obou os.

¹Výjimku tvoří simulace pro nulový počáteční tlak (viz kap. 5.1.1).



Obrázek 11: Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmičným dělením obou os y (horní panel) a logaritmičným dělením obou os (dolní panel). Hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je nastavena v rozsahu od 0 do 2 Pa. Konstantní velikost výbojového proudu $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$.

Rozdělovací funkce udává poměrné zastoupení atomů titanu dopadlých na substrát s danou energií a platí pro ni normovací podmínka, kdy je plocha pod křivkou rovna jedné. Z charakteru křivek na obr. 11 je jasně zřetelné, že s rostoucím tlakem pracovního plynu v komoře klesá zastoupení částic s vyšší energií. Pozorovaný trend je přímým důsledkem počtu meziatomárních interakcí rostoucího společně s tlakem, kdy rychle se pohybující atomy titanu předávají při srážce část své kinetické energie atomům argonu.

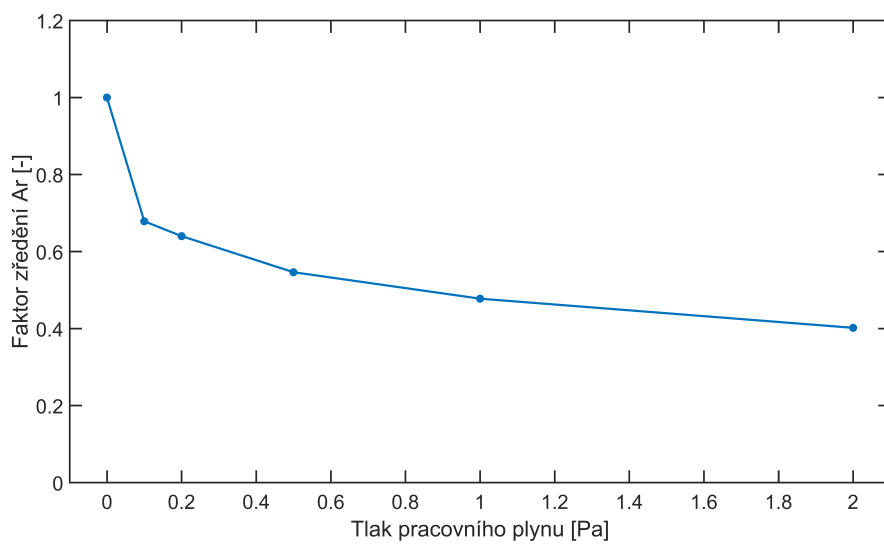
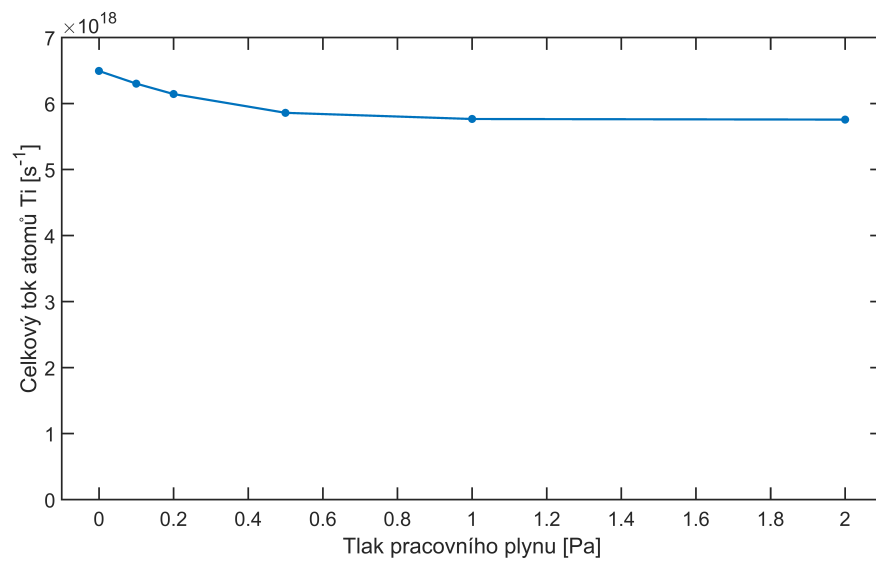
Kromě poměrného zastoupení energií dopadajících atomů titanu na terč má hodnota tlaku pracovního plynu vliv i na celkový počet atomů dopadlých na substrát. Veličina celkového toku atomů C je definována jako počet dopadlých atomů na substrát za 1 s a byla spočtena vztahem:

$$C = N_s \frac{w}{t_{\text{sim}}}$$

kde N_s je počet simulačních částic dopadlých na substrát, w udává váhu částic a t_{sim} je délka simulace.

Jak je patrné z obr. 12 (horní panel), vliv tlaku na celkový tok atomů titanu s rostoucí hodnotou klesá, pro 1 a 2 Pa je pak celkový tok prakticky stejný. Jedním z důvodů, který daný fenomén může způsobovat, je i zředění pracovního plynu v oblasti mezi terčem a substrátem. To je vypočteno jako poměr hustoty argonu v oblasti mezi terčem a substrátem vůči hustotě rovnoměrně rozloženého argonu na počátku simulace². Z obr. 12 (dolní panel) je patrné, že zředění je s rostoucím tlakem významnější. Výsledné rozdíly tlaků pracovního plynu jednotlivých simulací v oblasti mezi terčem a substrátem jsou tak menší než rozdíly tlaků počátečních, tj. mezi 0 a 0,8 Pa ($0,4 \cdot 2$ Pa, viz poslední bod spodního grafu). Proto není překvapivé, že v tomto úzkém rozmezí tlaků je změna počtu Ti dopadlých na substrát velmi malá, jak ukazuje graf horní.

²Hodnota pro nulový tlak vychází z úvahy, kdy pro myšlený jeden atom argonu nacházející se v analyzované oblasti je limitně malá šance srážky s rozprášenými atomy titanu. Ke zředění tedy nedochází.



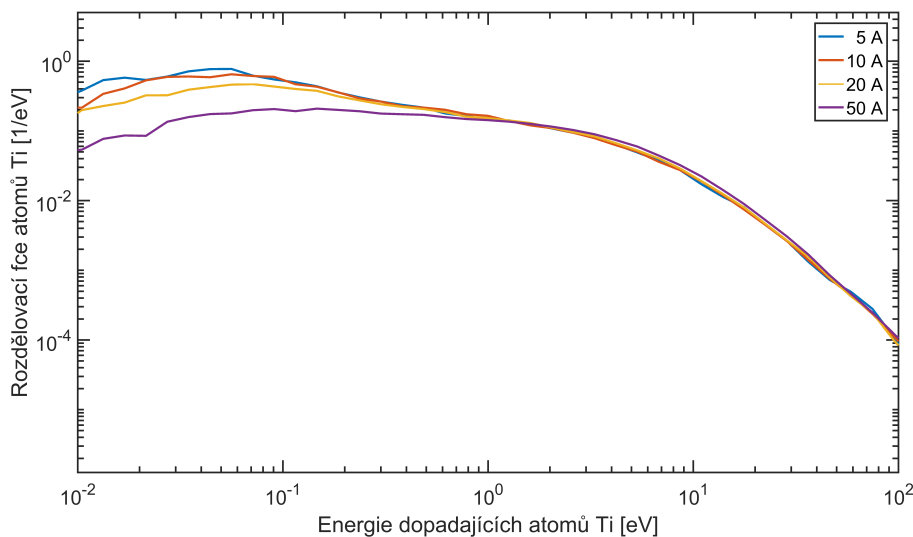
Obrázek 12: Celkový tok atomu titanu na substrát (horní panel) a faktor zředění argonu v oblasti před terčem (dolní panel) v závislosti na počátečním tlaku argonu v komoře. Konstantní velikost výbojového proudu $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$.

5.2 Vliv výbojového proudu

Neméně významnou veličinou pro charakter deponované vrstvy představuje vedle tlaku pracovního plynu také velikost výbojového proudu. S rostoucím proudem roste i míra rozprašování terčového materiálu.

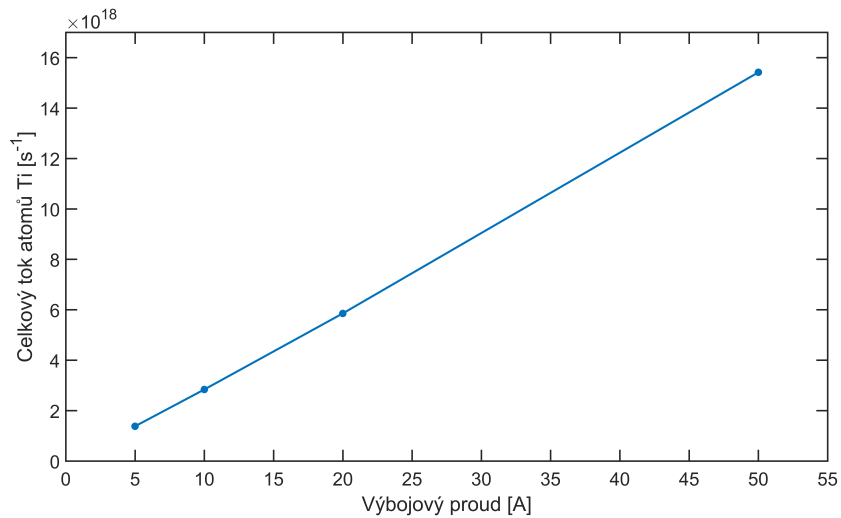
5.2.1 Tlak pracovního plynu 0,5 Pa

Přímým následkem vyšší míry rozprašování je větší zředění pracovního plynu v oblasti mezi terčem a substrátem, tj. pokles hustoty argonu v dané oblasti. Ten vede i k poklesu počtu srážek atomů titanu při jeho transportu mezi terčem a substrátem a tedy nižšímu zastoupení částic dopadajících na substrát s malou energií, což dokládá i graf na obr. 13. Vyšší zastoupení částic dopadajících s větší energií tak představuje až druhotný jev zvyšování hodnot výbojového proudu a je dán zvyšující se mírou zředění argonu v oblasti mezi terčem a substrátem. To dokládá i srovnání s grafickým výstupem na obr. 11 ukazujícím daleko větší rozdíly pro různé hodnoty tlaku pracovního plynu v komoře.



Obrázek 13: Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu se mění v rozsahu $I = 10 - 50$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře činí 0,5 Pa.

Co se celkového toku dopadajících atomů titanu na substrát týče, je trend zcela opačný. Zatímco vliv tlaku na tok atomů titanu není příliš velký (viz obr. 12 (horní panel)), závislost na výbojovém proudu (obr. 14) ukazuje přímou úměrnost těchto dvou veličin, kdy s rostoucím výbojovým proudem roste též celkový tok atomů titanu na substrát. Tato úměra má navíc takřka lineární charakter, kdy směrnice přímk mezi dvěma následnými hodnotami toků nabývají hodnot v rozmezí 0,28 – 0,31.

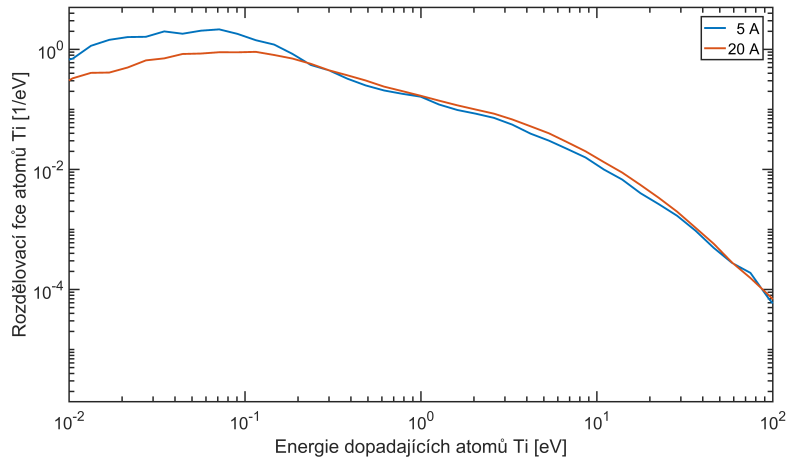


Obrázek 14: Závislost celkového toku atomů titanu na substrát na výbojovém proudu I , tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je konstantní a činí 0,5 Pa.

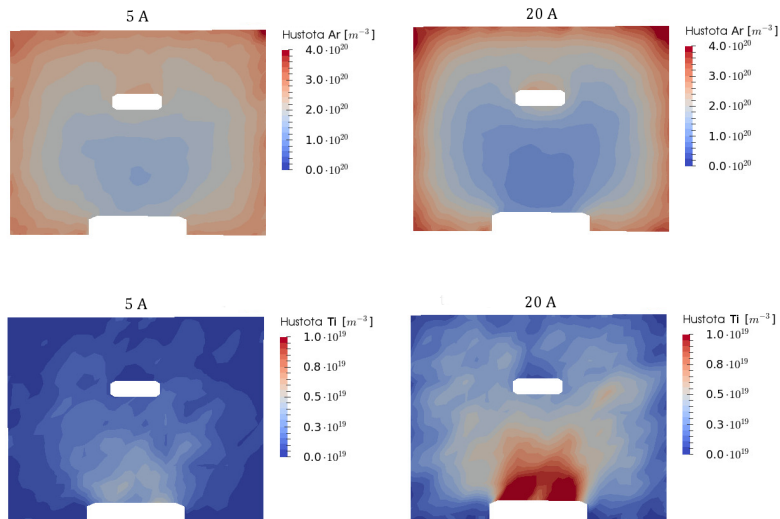
5.2.2 Tlak pracovního plynu 1 Pa

Stejně jako v případě předcházejícího odstavce (kde činila hodnota tlaku 0,5 Pa), i v případě dvojnásobného tlaku zůstává charakter rozdělovací funkce v závislosti na různých hodnotách výbojového proudu totožný. Větší výbojový proud tak s sebou nese i větší zastoupení vyšších energií dopadajících částic a naopak, jak ukazuje graf na obr. 15.

Zastoupení jednotlivých atomů a zředění pracovního plynu v oblasti před terčem je viditelné na obr. 16, z něhož je mimo jiné dobře patrné rozdělení počátečních pozic atomů titanu na terči (popsané v kap. 4.2.1). Velikost oblasti zředění a její míra roste společně s rostoucí hodnotou výbojového proudu.



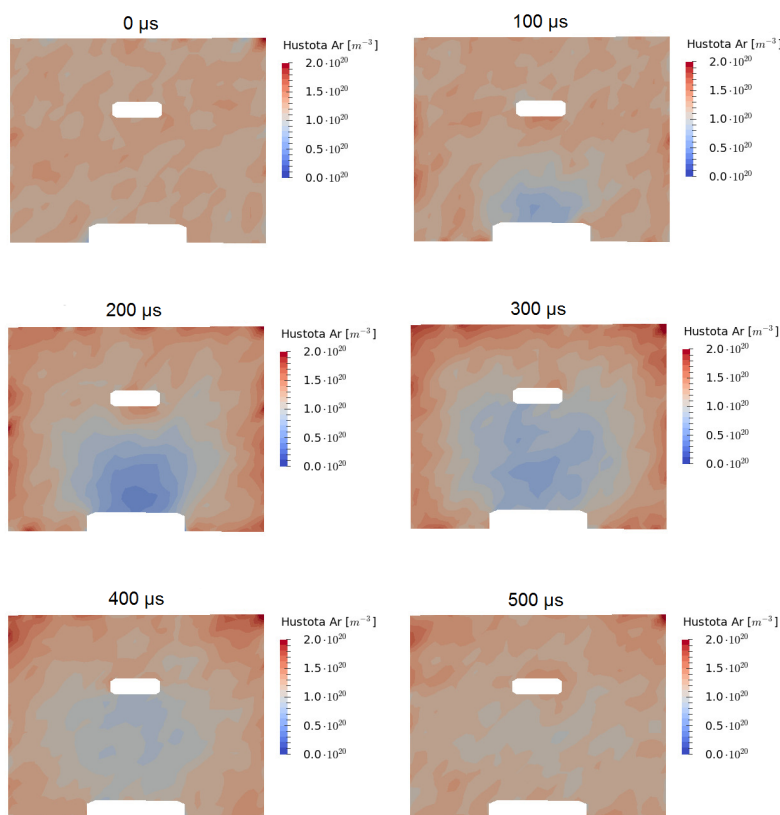
Obrázek 15: Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa .



Obrázek 16: Srovnání hustoty atomů argonu a titanu v průřezu komorou v závislosti na velikosti výbojového proudu. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa .

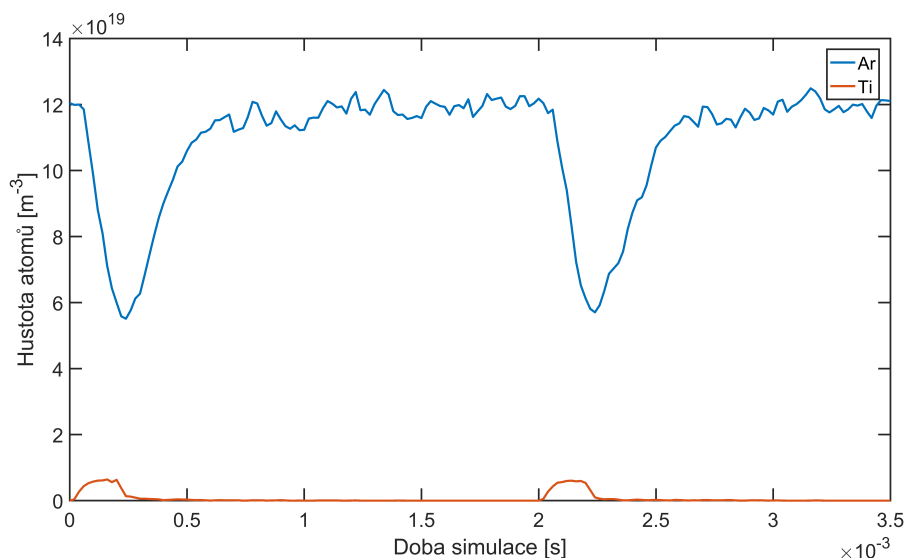
5.2.3 Pulzní výbojový proud

Jeden z fenoménů posledních desetiletí v oblasti depozice tenkých vrstev představuje pulzní magnetronové naprašování (HiPIMS). Hustota pracovního plynu v komoře v takovýchto případech není stacionární. To dokládá i vizualizace na obr. 17, jež ukazuje zředování argonu před terčem v průběhu jednoho pulzu o délce 200 μs . Oblast zředění představuje prakticky celou oblast mezi terčem a substrátem (výška 10 cm). Vzhledem k nastavené délce výbojového pulzu je zřejmé, že k opětovnému ustálení rozložení hustoty argonu v komoře dochází až se značným zpožděním po konci výboje.



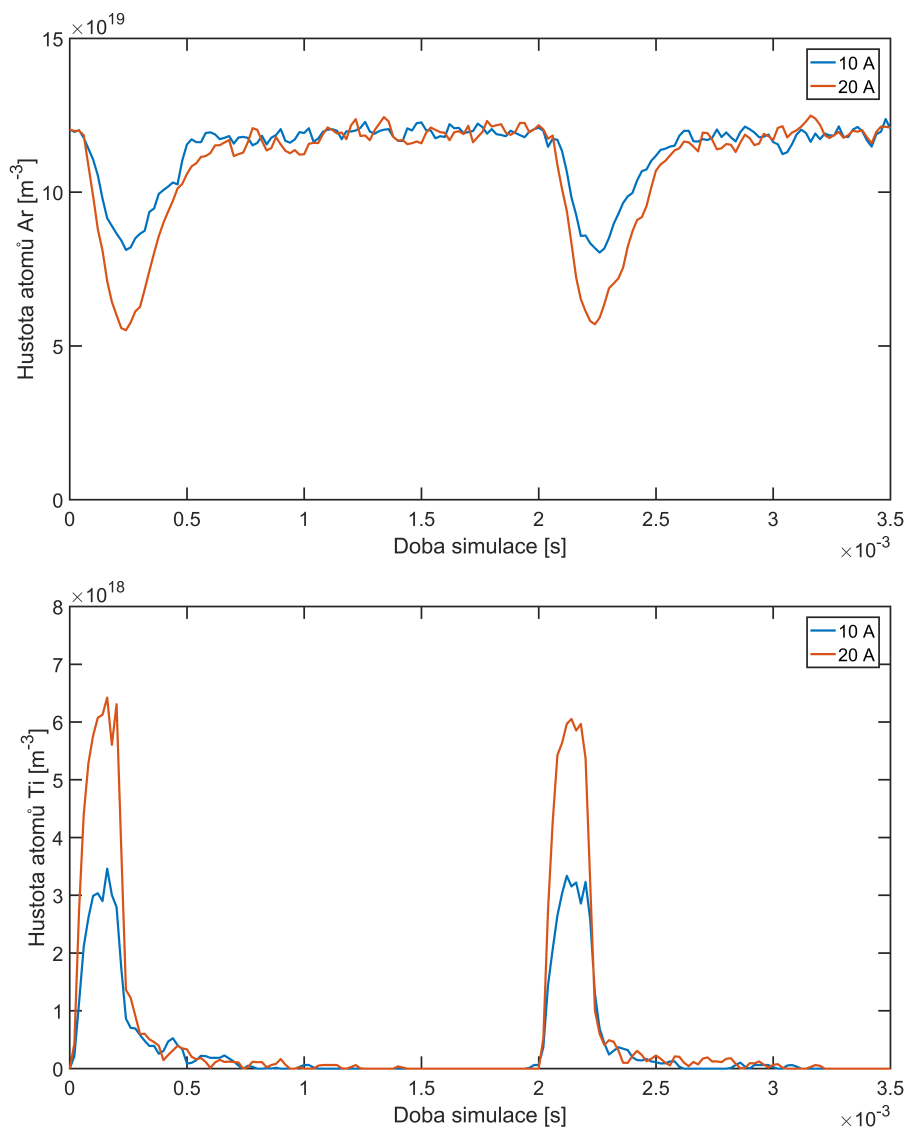
Obrázek 17: Časový průběh hustoty atomů argonu v průřezu komorou při pulzním magnetronovém naprašování. Délka proudového pulzu činí (prvních) 200 μs . Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 20 \text{ A}$ (jinde nulová), tok rozprašených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa.

Zkoumaná oblast se nyní omezí pouze na prostor před terčem, konkrétně na oblast zahrnující buňky do vzdálenosti 1 cm od osy terč – substrát vzdálené 2 až 6 cm od terče, z níž jsou hodnoty hustot průměrovány přes všechny objemové buňky. Výsledky z této oblasti ukazují, že rychle se pohybující atomy titanu s velkou kinetickou energií způsobují při zvýšení své hustoty v oblasti řádově větší pokles hustoty argonu (viz obr. 18). Statistický šum viditelný v grafu je způsoben konečným počtem částic ve zkoumané oblasti a jeho potlačení by bylo možné docílit (za cenu zvýšených výpočetních nároků) zvýšením jejich počtu.



Obrázek 18: Závislost hustoty atomů argonu a titanu na čase v oblasti před terčem při pulzním magnetronovém naprašování. Délka proudového pulzu je 200 μs , délka periody 2000 μs . Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 20 \text{ A}$ (jinde nulová), tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa.

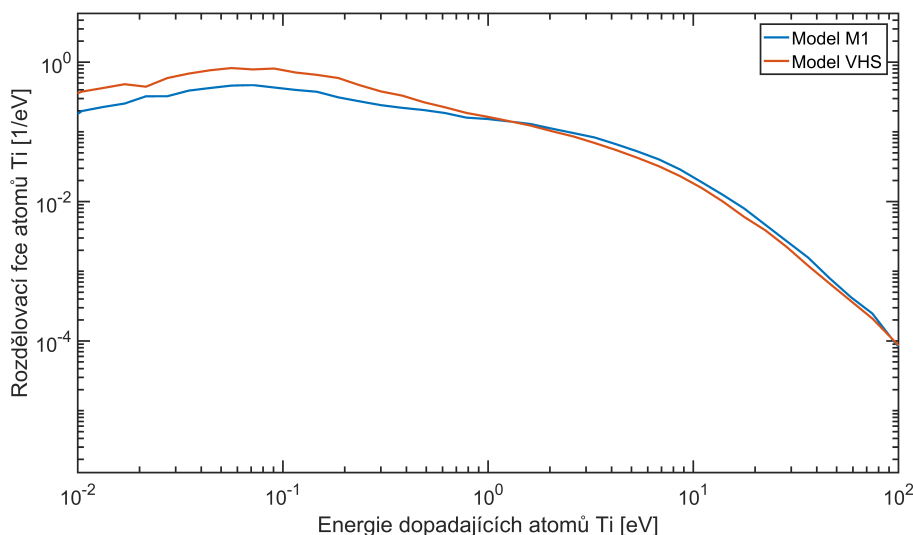
Zajímavé srovnání nabízí taktéž závislost hustoty atomů titanu a argonu (obr. 19) na hodnotě výbojového proudu v pulzu. Zatímco zastoupení titanu v oblasti před terčem roste přímo úměrně s velikostí výbojového proudu, křivka zředování argonu má pozvolnější (než lineární) charakter. Zkoumaná oblast je pak totožná s předchozím grafickým výstupem.



Obrázek 19: Závislost hustoty atomů argonu (horní panel) a titanu (dolní panel) na čase v oblasti před terčem při pulzním magnetronovém naprašování pro různé hodnoty pulzního výbojového proudu. Délka proudového pulzu je $200 \mu\text{s}$, délka periody $2000 \mu\text{s}$. Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 10 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$ (jinde nulová), tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je $0,5 \text{ Pa}$.

5.3 Vliv srážkového modelu

Vyjma vlivu fyzikálních veličin je žádoucí prozkoumat citlivost výstupních dat na parametrech numerického modelu. Jedním z významných parametrů simulace je použitý srážkový model (viz kap. 2.4.2). Z porovnání na obr. 20 je patrné, že při použití modelu proměnných tvrdých koulí VHS jsou oproti modelu M1 zvýhodněny nižší hodnoty energií dopadajících částic, což je dáno především odlišnou definicí účinného průřezu σ a vztahu pro rozptylový úhel Θ . Hodnoty celkových toků atomů titanu na substrát nabývají hodnot $5,86 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$ pro model M1 a $5,89 \cdot 10^{18} \text{ s}^{-1}$ pro model VHS. Výsledky se tak pro oba srážkové modely liší jen velmi málo.

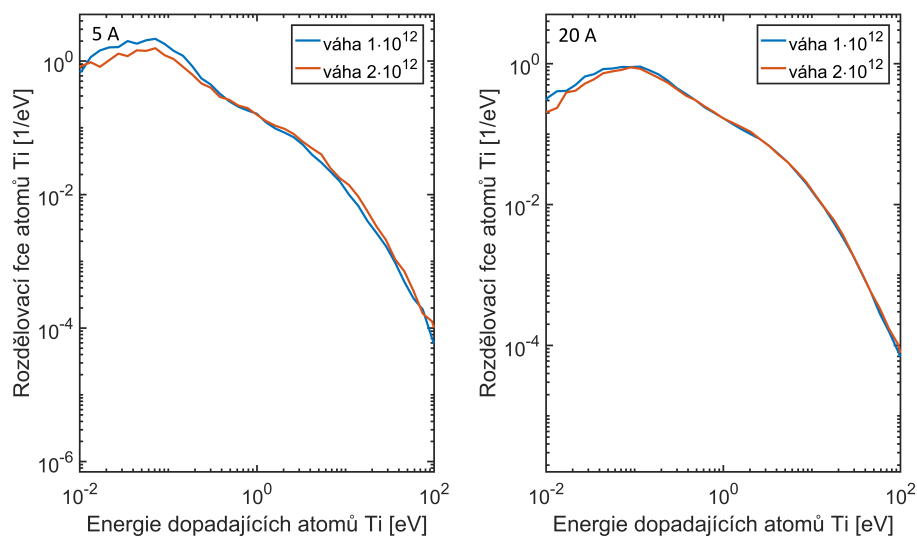


Obrázek 20: Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je $0,5 \text{ Pa}$. Použité srážkové modely jsou M1 a VHS, viz kap. 2.4.2.

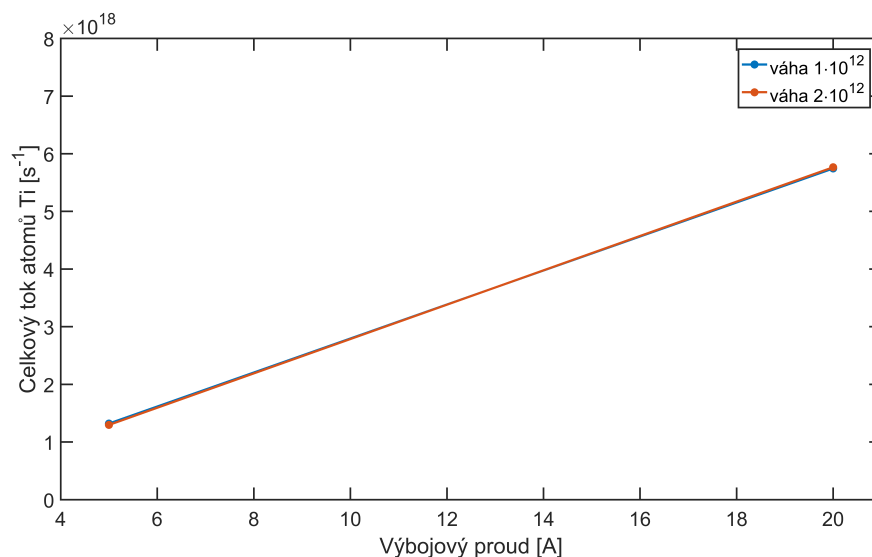
5.4 Vliv váhy simulačních částic

Poslední srovnání ukazuje citlivost modelu na zvolenou váhu simulačních částic ($1 \cdot 10^{12}$ a $2 \cdot 10^{12}$), kterému odpovídá i počet částic v simulaci: přibližně 2 a 1 milion. Vliv váhy simulačních částic se pro zvolené parametry simulace ukazuje jako velmi malý. V případě rozdělovací funkce je vidět drobné

zvýhodnění nižších energií pro menší hodnotu váhy částic (viz obr. 21). Menší počet simulovaných částic spojený s nižším počtem srážek při transportu atomů tak může vést k numerickým chybám při výpočtu energií dopadajících částic na substrát (pro tento váhový rozdíl však nepříliš velkým). Pro hodnotu celkového toku atomů titanu dopadlých na substrát je pak rozdíl pro různé váhy zanedbatelný a pohybuje se do jednoho procenta (obr. 22).



Obrázek 21: Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa . Váha simulačních částic je $1 \cdot 10^{12}$ a $2 \cdot 10^{12}$.



Obrázek 22: Závislost celkového toku atomů titanu na substrát na výbojovém proudu. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa . Váha simulačních částic je $1 \cdot 10^{12}$ a $2 \cdot 10^{12}$.

5.5 Celkový tok atomů titanu na terč

Závěrečná tabulka (tab. 5) nabízí srovnání celkového toku atomů titanu na substrát pro všechny stacionární simulace³. Je řazena vzestupně od nejnižší po nejvyšší hodnotu a potvrzuje trendy z předcházejících odstavců. Největší vliv na celkový tok má výbojový proud následovaný vlivem tlaku pracovního plynu, význam váhy simulačních částic a srážkového modelu je velmi malý.

³Absence simulací pulzně magnetronového naprašování.

výbojový proud [A]	tlak argonu [Pa]	srážkový model	váha částic [10^{12}]	celkový tok atomů Ti [10^{18} s^{-1}]
5	1	M1	2	1,30
5	1	M1	1	1,32
5	0,5	M1	1	1,38
10	0,5	M1	1	2,84
20	1	M1	1	5,75
20	2	M1	2	5,76
20	1	M1	2	5,77
20	0,5	M1	1	5,86
20	0,5	VHS	1	5,89
20	0,2	M1	0,4	6,14
20	0,1	M1	0,2	6,30
20	0	M1	1	6,49
50	0,5	M1	1	15,42

Tabulka 5: Srovnání celkového toku atomů titanu na substrát v závislosti na nastavení fyzikálních veličin či parametrů numerického modelu. Řazení hodnot je vzestupné od nejnižší hodnoty celkového toku atomů titanu po hodnotu nejvyšší.

6 Závěr

Prvním cílem této práce bylo prostudování současné literatury týkající se magnetronového naprašování a numerických metod Monte Carlo, primárně se zaměřením na metodu Direct Simulation Monte Carlo užívanou pro simulace transportu částic v proudění plynu. Poznatky o současném stavu této problematiky jsou uvedeny v kapitole 2.

Seznámení s programem pro simulaci transportu částic v magnetronových výbojích vyvíjeném na KFY probíhalo jak formou odborných konzultací s autory programu, tak pomocí cvičných simulací sloužících k seznámení s ovládním, možnostmi a limity daného softwaru.

Hlavní úkol práce představovalo provedení simulací rozprašování terče a transportu terčového materiálu na substrát v argonové atmosféře za nízkých tlaků. Prozkoumat procesy v prostoru zadané geometrie a popsat chování pracovního plynu při interakci s rozprašovanými atomy terče. V závislosti na výstupních datech simulací poté určit podíl rozprášených atomů dopadajících na substrát a jejich rozdělovací funkce. Vyšetřován byl jak vliv fyzikálních veličin tlaku a výbojového proudu, tak parametrů numerického modelu v podobě váhy simulačních částic a použitého srážkového modelu.

Simulace probíhaly v geometrii tvaru válce rozměrově odpovídající používaným vakuovým komorám experimentálních depozičních aparatur. Terčovým materiálem byl titan, pracovní plyn v komoře pak představoval argon. Interakce mezi atomy byly vždy binární a pružné. Délka výstupních simulací činila $8 \cdot 10^{-3}$ s a počet simulovaných částic se pohyboval kolem jednoho milionu.

Výsledky ukázaly, že tlak pracovního plynu v komoře má výrazný vliv na energiové rozdělení atomů titanu dopadajících na substrát, přičemž vyšší tlak má za následek vyšší zastoupení atomů dopadajících s nízkou energií. Závislost celkového toku atomů titanu na tlaku již není tak významná a pro vyšší simulované hodnoty tlaku ještě nadále klesá (v rozsahu 0 – 0,5 Pa celkový tok klesá, v intervalu 0,5 – 2 Pa si udržuje přibližně konstantní hodnotu). Míra zředění argonu v oblasti mezi terčem a substrátem pak s rostoucím tlakem stoupá.

V případě výbojového proudu byl zjištěn vliv jak na rozložení energií částic dopadajících na substrát, tak na jejich celkový tok. Pro rostoucí hodnoty výbojového proudu roste též zastoupení částic dopadajících na substrát s vyšší energií, i když trend není tak výrazný jako pro různá nastavení tlaku.

Závislost celkového toku atomů titanu na velikosti výbojového proudu je lineárně rostoucí. Hustota argonu v oblasti před terčem s rostoucím výbojovým proudem klesá, u titanu je tomu naopak. K trendu zředování v oblasti před terčem dochází i pro pulzní charakter výbojového proudu. Během pulzu dochází ke zředování argonu před terčem, po pulzu dochází řádově během 1 ms k opětovnému ustavení homogenní hustoty argonu v komoře. Malé změny hustoty titanu přitom vyvolávají o řád větší změny hustoty argonu v oblasti před terčem.

Vliv zkoumaných parametrů numerického modelu obecně není příliš značný. Menší počet simulačních částic v simulaci způsobuje lehce nižší zastoupení atomů dopadajících na substrát s nízkou energií. Obdobný důsledek způsobuje i užití srážkového modelu M1 oproti modelu VHS.

7 Značení

značka	význam
a	fitovací parametr
a_D	rychlost depozice
b	záměrný parametr
c	fitovací parametr
C	celkový tok atomů
d	efektivní průměr interagujících atomů
e	elementární náboj
E	energie rozprášených částic
E_{ion}	energie nalétávajících iontů
I	výbojový proud
k_i	náhodně generovaný parametr
k_B	Boltzmannova konstanta
\mathbf{k}_\perp	vektor roviny srážky
m_j	hmotnost j -té částice
m_i	hmotnost iontu
m_t	hmotnost atomu (dané látky)
m_{Ar}	relativní atomová hmotnost argonu
m_{Ti}	relativní atomová hmotnost titanu
N	atomová hustota vzorku
N_r	počet částic rozptýlených do úhlu Ω
N_s	počet simulačních částic dopadlých na substrát
p_{RG}	tlak reaktivního plynu
P	Pravděpodobnost srážky dvou částic
r	vzdálenost středů dvou částic
\mathbf{r}	polohový vektor
r_0	vzdálenost ohniska rozprašování od středu terče
r_t	vzdálenost od středu terče
R	koeficient odrazu dopadajících iontů (na povrch pevné látky)
t	čas
t_{sim}	délka simulace
Δt	časový krok iterace
T_{ref}	referenční teplota
U_0	povrchová vazebná energie materiálu

značka	význam
\mathbf{v}	vektor rychlosti
v_r	velikost rozdílu rychlostí
\mathbf{v}_r	rozdíl rychlostí interagujících částic
V	potenciální energie
w	váha částic
Y	rozprašovací výtěžek
Z_i	atomové číslo
β	mocninný parametr
Γ	tok částic
ε	kinetická energie
ε_{\max}	maximální hodnota kinetické energie
η	koefficient zachycení iontů na povrchu (pevné látky)
λ	mocninný parametr interakčního potenciálu částic
θ	úhel vylétávající částice z terče
Θ	úhel rozptylu
Θ_s	náhodně generovaný úhel rozptylu
ν	frekvence srážek
σ	celkový účinný průřez
σ_{dif}	diferenciál účinného průřezu
σ_0	rozptyl rozdělovací fce počátečních pozic rozprášených atomů
ϕ	úhel natočení roviny srážky
φ	úhel natočení pro počáteční pozice atomů terče
ω	index viskozity
Ω	prostorový úhel

8 Seznam obrázků a tabulek

Seznam obrázků

1	Schematické znázornění magnetronu. Převzato z [4].	4
2	Schematické znázornění vyváženého a nevyváženého magnetronu (se silnějším a slabším vnitřním magnetem). Převzato z [2].	5
3	Znázornění a) závislosti depoziční rychlost a_D na průtoku reaktivního plynu Φ_{RG} a b) závislosti tlaku reaktivního plynu p_{RG} na průtoku reaktivního plynu Φ_{RG} . Převzato z [5].	6
4	Schematické znázornění kvalitativně odlišných oblastí interakce nalétávajícího iontu s povrchem terče v závislosti na atomovém čísle Z_i a energii dopadajících iontů E_{ion} . Převzato z [6].	8
5	Znázornění závislosti výtěžku rozprašování Y na energii dopadajících iontů E_{ion} . Převzato z [6].	9
6	Lennard-Jonesův potenciál (závislost interakčního potenciálu V částic na vzdálenosti jejich středů r).	11
7	Schematické znázornění rozptylu částice po binární srážce. Převzato z [10].	12
8	Schematické znázornění algoritmu metody DSMC. Převzato z [9].	17
9	Schéma simulační geometrie s jednotlivými segmenty: 1 - stěna komory, 2 - vrchní strana rozprašovaného terče, 3 - bok rozprašovaného terče, 4 - dolní vstup (přívod pracovního plynu), 5 - horní vstup (odtah vývěvy), 6 - spodní strana držáku substrátu/substrát samotný, 7 - bok držáku substrátu, 8 - vrchní strana držáku substrátu.	20
10	Rozdělení počátečních pozic atomů titanu na terči. Na levé straně rozdělovací funkce vzdáleností r počátečních pozic od středu terče. Vpravo horní pohled na terč s vyznačeným úhlem natočení φ	22
11	Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritickým dělením obou osy y (horní panel) a logaritickým dělením obou os (dolní panel). Hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je nastavena v rozsahu od 0 do 2 Pa. Konstantní velikost výbojového proudu $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$	27
12	Celkový tok atomu titanu na substrát (horní panel) a faktor zředění argonu v oblasti před terčem (dolní panel) v závislosti na počátečním tlaku argonu v komoře. Konstantní velikost výbojového proudu $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$	29

13	Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu se mění v rozsahu $I = 10 - 50$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře činí 0,5 Pa.	30
14	Závislost celkového toku atomů titanu na substrát na výbojovém proudu I , tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je konstantní a činí 0,5 Pa.	31
15	Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5$ A a $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa.	32
16	Srovnání hustoty atomů argonu a titanu v průřezu komorou v závislosti na velikosti výbojového proudu. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5$ A a $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa.	32
17	Časový průběh hustoty atomů argonu v průřezu komorou při pulzním magnetronovém naprašování. Délka proudového pulzu činí (prvních) 200 μ s. Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 20$ A (jinde nulová), tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa.	33
18	Závislost hustoty atomů argonu a titanu na čase v oblasti před terčem při pulzním magnetronovém naprašování. Délka proudového pulzu je 200 μ s, délka periody 2000 μ s. Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 20$ A (jinde nulová), tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa.	34
19	Závislost hustoty atomů argonu (horní panel) a titanu (dolní panel) na čase v oblasti před terčem při pulzním magnetronovém naprašování pro různé hodnoty pulzního výbojového proudu. Délka proudového pulzu je 200 μ s, délka periody 2000 μ s. Velikost výbojového proudu je při pulzu $I = 10$ A a $I = 20$ A (jinde nulová), tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Tlak pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa.	35
20	Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 20$ A, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 0,5 Pa. Použité srážkové modely jsou M1 a VHS, viz kap. 2.4.2.	36

21	Rozdělovací funkce atomů titanu dopadajících na substrát v závislosti na jejich energii s logaritmickým dělením obou os. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa . Váha simulačních částic je $1 \cdot 10^{12}$ a $2 \cdot 10^{12}$	37
22	Závislost celkového toku atomů titanu na substrát na výbojovém proudu. Velikost výbojového proudu má hodnotu $I = 5 \text{ A}$ a $I = 20 \text{ A}$, tok rozprášených atomů je dán $\frac{I}{e}$. Počáteční hodnota tlaku pracovního plynu v komoře je 1 Pa . Váha simulačních částic je $1 \cdot 10^{12}$ a $2 \cdot 10^{12}$	38

Seznam tabulek

1	Použité parametry atomů pracovního plynu a terčového materiálu. Uvedené hodnoty odpovídají všem provedeným simulacím.	19
2	Nastavitelné parametry rozprašování terčového materiálu. Uvedené hodnoty odpovídají všem provedeným simulacím. Rozprašovaným materiálem je titan.	23
3	Nastavitelné parametry interakcí mezi atomy. Uvedené hodnoty odpovídají srážkovému modelu M1 ve všech případech jeho použití. Hodnoty d_{ref} modelu VHS pro jednu realizovanou simulaci se od modelu M1 liší pouze o hodnotu koeficientu (konkrétně $d_{\text{ref},\text{M1}} = \sqrt{\frac{4}{3}}d_{\text{ref},\text{VHS}}$).	24
4	Použité rozsahy parametrů simulace. Hodnoty jsou odlišné pro každou jednotlivou simulaci.	25
5	Srovnání celkového toku atomů titanu na substrát v závislosti na nastavení fyzikálních veličin či parametrů numerického modelu. Řazení hodnot je vzestupné od nejnižší hodnoty celkového toku atomů titanu po hodnotu nejvyšší.	39

9 Seznam použité literatury

- [1] A. Kříž, Tenké vrstvy, *Oddělení povrchového inženýrství, ZČU v Plzni*, přednáškový materiál, (2005)
- [2] P. J. Kelly a R. D. Arnell, Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications, *Vacuum 56*, s. 159–172, (2000)
- [3] J. T. Gudmundsson, N. Brenning, D. Lundin a U. Helmerssona, High power impulse magnetron sputtering discharge, *Journal of Vacuum Science & Technology A 30(3)*, s. 1-7, (2012)
- [4] K. Paďourek, Metody vytáření tenkých vrstev, *Katedra materiálů, TU v Liberci*, přednáškový materiál, (2008)
- [5] J. Musil, J. Vlček a P. Baroch, Magnetron Discharges for Thin Films Plasma Processing, *Elsevier Limited 3*, (2006)
- [6] J. Vlček, Fyzikálně chemické základy plazmových technologií, *Katedra fyziky, ZČU v Plzni*, přednáškový materiál, s. 40-51, (2011)
- [7] R. Behrisch a W. Eckstein, Sputtering Yields, *Topics in Applied Physics 110*, s. 33–40, (2007)
- [8] H. Gnaser, R. Behrisch a W. Eckstein, Energy and Angular Distributions of Sputtered Species, *Topics in Applied Physics 110*, s. 231–237, (2007)
- [9] T. Kozák, Modelování plazmatu, *Katedra fyziky, ZČU v Plzni*, přednáškový materiál, (2016)
- [10] M. A. Lieberman a A. J. Lichtenberg, Principles of Plasma Discharges and Materials Processing, *John Wiley and Sons, Inc.*, s. 43-53, s. 723-726, (2005)
- [11] A. Kersch, W. Morokoff a Chr. Werner, Selfconsistent simulation of sputter deposition with the Monte Carlo method, *Journal of Applied Physics 75 (4)*, s. 2278-2281, (1994)
- [12] D. Depla a W.P. Leroy, Magnetron sputter deposition as visualized by Monte Carlo modeling, *Thin Solid Films 520*, s. 6338-6339, (2012)

- [13] G. A. Bird, Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows, *Oxford University Press*, (1994)
- [14] M. Dorda, Metoda Monte Carlo, *Vysoká škola báňská*, přednáškový materiál, (2017)
- [15] A. F. Bielajew, Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport, *Ann Arbor, The University of Michigan*, s. 1-14, (2001)
- [16] A. Pflug, M. Siemers a B. Szyszka, Parallel DSMC Gas flow Simulation of an In-line Coater for Reactive Sputtering, *Euro-PVM/MPI*, (2006)
- [17] Ch. Shen, Rarefied Gas Dynamics, *Springer-Verlag Berlin Heidelberg*, s. 2-19, (2005)
- [18] T. Kobayashi, Computer simulation of gas rarefaction effects and film deposition characteristics in a magnetron sputtering apparatus, *Applied Surface Science 169-170*, s. 405-409, (1999)
- [19] S. Kadlec, Simulation of Neutral Particle Flow During High Power Magnetron Impulse, *Plasma Processes and Polymers 4*, s. 419-423, (2007)
- [20] A. Mutzke, R. Schneider, W. Eckstein a R. Dohmen, SDTrimSP Version 5.00, *Max-Planck-Institut für Plasmaphysik*, (2011)