

Západočeská univerzita v Plzni
Fakulta aplikovaných věd

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE



Vít Teřl

Počítačové modelování pulzního vysokovýkonového magnetronového výboje pro depozici vrstev

Katedra fyziky

Vedoucí práce: Mgr. Andrea Dagmar Pajdarová, Ph.D.
Studijní program: Aplikované vědy a informatika, B3918
Studijní obor: Aplikovaná a inženýrská fyzika, 3901R030

Plzeň 2018

Poděkování

Během zpracování práce mi byla velkou oporou má vedoucí práce, Mgr. Andrea Dagmar Pajdarová, Ph.D., které tímto děkuji za odborné vedení, cenné rady a kontrolu. Také děkuji svým rodičům a přátelům za velkou podporu během celého studia.

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů.

V dne

Podpis autora

Abstrakt:

Předložená bakalářská práce se zaměřuje na studium ionizace atomů sekundárními elektrony v objemu plazmatu pulzního vysokovýkonového magnetronového výboje pro depozici vrstev. Na tento úkol byl vytvořen počítačový model. V první části je stručně popsán princip a vývoj pulzního vysokovýkonového magnetronového naprašování a způsoby počítačového modelování plazmatu. Ve druhé části je vytvořen počítačový program implementující metodu Leapfrog a Borisovu metodu na výpočet pohybu elektronů ve výboji a Monte Carlo kolizní metodu na výpočet ionizačních srážek. Pomocí tohoto modelu jsou provedeny simulace na sledování objemové hustoty ionizace atomů pracovního plynu a rozprášeného kovu sekundárními elektrony pro různé výbojové proudy. Výsledné objemové hustoty ionizace atomů dané simulacemi jsou řádně prodiskutovány.

Klíčová slova: magnetronové naprašování, Monte Carlo kolizní metoda, transport sekundárních elektronů, modelování, ionizace

Abstract:

The presented thesis is focused on the ionization of different atoms by secondary electrons in high power impulse magnetron sputtering used for thin film deposition. A computer model was developed for this task. In the first part, the principles and development of high power impulse magnetron sputtering and plasma computer simulations techniques are presented. In the second part there are described methods implemented by the developed computer program, mainly Leapfrog method and Boris method for movement of electrons in discharge and Monte Carlo collision method for collision calculations. Simulations are performed to obtain ionization volume density of working gas atoms and sputtered metal atoms. Simulations are obtained by the computer program and are differentiated by different discharge current. Resulting ionization volume density given by simulations are discussed.

Keywords: magnetron sputtering, Monte Carlo collision method, transport of secondary electrons, modeling, ionization

Obsah

1	Úvod	2
2	Současný stav problematiky a přehled literatury	3
2.1	Magnetronové naprašování	3
2.1.1	Konvenční magnetronové naprašování	3
2.1.2	Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování	4
2.2	Modelování a simulace magnetronových výbojů	5
2.2.1	Modelování magnetronových výbojů	7
2.2.2	Simulace magnetronových výbojů	9
3	Cíle bakalářské práce	11
4	Metody zpracování	12
4.1	Užité simulační metody	12
4.1.1	Pohyb elektronů ve výboji	12
4.1.2	Ionizační srážky	15
4.2	Struktura simulačního programu	17
4.2.1	Simulační oblast	17
4.2.2	Magnetické pole	18
4.2.3	Elektrické pole	18
4.2.4	Rozložení objemové hustoty atomů	23
4.2.5	Simulační cyklus	23
5	Výsledky a diskuse	25
5.1	Surová data vypočtená programem	25
5.2	Rozložení normované objemové hustoty ionizace atomů	25
5.2.1	Nízký výbojový proud ($I_d = 5$ A)	27
5.2.2	Střední výbojový proud ($I_d = 20$ A)	27
5.2.3	Vysoký výbojový proud ($I_d = 50$ A)	27
5.3	Trendy v rozložení hustoty ionizace v závislosti na hodnotě výbojového proudu	28
6	Závěr	35
	Literatura	36
	Seznam obrázků	38

Kapitola 1

Úvod

V dnešní době jeden z nejpoužívanějších procesů na vyrábění tenkých vrstev je magnetronové naprašování. Tenké vrstvy nacházejí využití v různých průmyslových odvětvích na úpravu a zlepšení povrchových vlastností materiálů. Mezi materiálové vrstvy patří například vrstvy tvrdé, proti opotřebení, na zmenšení tření, proti korozi a se specifickými optickými nebo elektrickými vlastnostmi.

Základní naprašovací proces je znám již dlouhý počet let, a to s příchodem konvenčního nebo také vyváženého magnetronu na počátku 70. let, nicméně největší průlom přišel až v 80. letech s rozvojem nevyvážených magnetronů. O deset let později magnetronové naprašování začalo být hlavním způsobem depozice tenkých vrstev využívané v různých průmyslových oblastech.

Nicméně konvenční magnetronové naprašování stále má své fundamentální problémy, jako například malé využití terče, nestability a pomalá depoziční rychlost. Na zmírnění některých z těchto problémů byly vymyšleny různé techniky. Zde se budeme věnovat jedné z nich. Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování (HiPIMS) se začalo využívat v poslední době a je stále zkoumáno jeho využití. Magnetron operuje na malém průměrném výkonu a pulzuje k velice vysokému napětí na krátkou chvíli v každém cyklu, což způsobuje zvýšené generování elektronů, a tedy i ionizaci. HiPIMS se využívá k naprašování metalických i sloučeninových vrstev. Důležité je chování neutrálních atomů v HiPIMS, kde pracovní plyn je během pulzu zředěn v hlavní oblasti před terčem. Hustota naprašovaného materiálu předčí několikrát hustotu pracovního plynu. Pohyb plynu směrem k substrátu vede k dočasnému zvýšení hustoty u substrátu. To ovlivňuje jak rychlost depozice, tak chování plazmatu.

V této práci se zabývám počítačovým modelováním plazmatu. Počítačové modelování přináší výhody oproti experimentálnímu v podobě menší finanční a časové náročnosti. V práci je popsán počítačový model pomoci, kterého lze sledovat ionizaci v objemu plazmatu pulzního vysokovýkonového magnetronového výboje.

Kapitola 2

Současný stav problematiky a přehled literatury

2.1 Magnetronové naprašování

2.1.1 Konvenční magnetronové naprašování

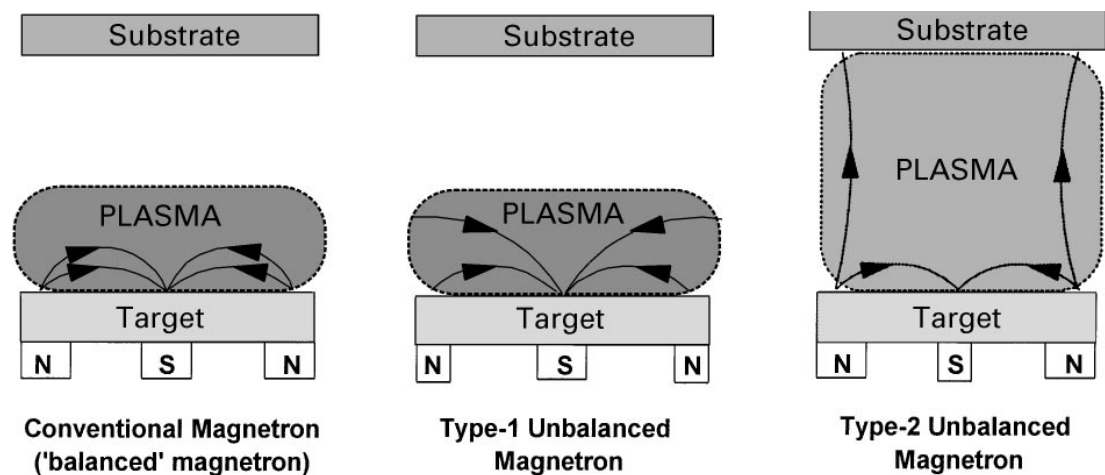
Magnetronové naprašování patří mezi PVD (Physical vapor deposition) deponiční metody, kdy jednotlivé atomy materiálu jsou uvolňovány z terče a následně dopadají na substrát, kde tvoří tenkou vrstvu [10].

Samotný naprašovací proces probíhá následovně: substrát je vložen do vakuové komory, do které je přidán pracovní plyn a na terč (složen z materiálu, který bude nanesen na substrát) je aplikován záporný potenciál, tímto se v komoře vytvoří plazma. Elektrony se uvolňují z terče do prostoru komory, kde kolidují s atomy pracovního plynu, které jsou následně těmito elektrony ionizovány. Ionizované atomy mají kladný náboj a jsou tedy přitahovány k záporně nabitému terči, jenž je potom bombardován urychlenými ionty. Tato událost má za následek rozprašování atomů terče, které mohou později kondenzovat na substrátu. Tento proces je známý už řadu let a byl úspěšně využit na naprašování různých tenkých vrstev. Nicméně, tato technika není dostatečně efektivní, neboť se potýká s problémy jako například přehřívání substrátu, malá ionizační efektivita a pomalá rychlost nanášení. Uvedené problémy se snaží vyřešit magnetronové naprašování.

Při bombardování terče ionty pracovního plynu dochází k uvolnění sekundárních elektronů z terče, které jsou důležité k udržování plazmatu v komoře, tedy k ionizování atomů plynu. Magnetronové naprašování využívá magnetické pole paralelní s povrchem terče, které omezuje pohyb sekundárních elektronů od terče. Magnety jsou uloženy takovým způsobem, aby jeden magnetický pól byl ve středu a druhý pól je okolo vnější strany terče. Uvěznění elektronů tímto způsobem zásadně zvyšuje pravděpodobnost kolize elektronu s plynem, který je ionizován a může následně bombardovat terč. Výhody magnetronového naprašování jsou zvýšená efektivita ionizace, vysoká deponiční rychlost a nízký pracovní tlak [10].

Dále magnetrony rozdělujeme na vyvážené a nevyvážené. Jejich konstrukční rozdíl je malý, ale rozdíl ve výkonnosti je značný. O vyváženém magnetronu mluvíme, když vnitřní i vnější magnet mají stejně silné pole. To zapříčiňuje, že je husté plazma omezeno na oblast u terče. Tato oblast bývá ve vzdálenosti do

60 mm od terče. Pokud je substrát položen v této oblasti, potom jeho vrstva je vystavena neustálému bombardování ionty, které může ovlivnit strukturu a vlastnosti vrstvy. Když je substrát mimo oblast, potom vliv iontových výbojů na substrát je nedostatečný pro ovlivnění struktury naprašované vrstvy. Tento problém se dá řešit přidáním napětí na substrát, ale to může též způsobit vady vrstvy. Nevyvážený magnetron je charakterizován tím, že jeden magnet je silnější než druhý. Rozlišujeme dva různé typy, častější Typ-2, a to je pokud vnější magnet je silnější než vnitřní. U tohoto typu nejsou všechny magnetické siločáry uzavřené mezi vnějším a vnitřním magnetem, ale některé dosahují až k substrátu. Elektronů mohou následovat tyto siločáry, tedy plazma už není pouze v okolí terče a způsobí zvýšení iontového toku na substrát. Schématické znázornění těchto typů magnetronů je zobrazeno na Obrázku 2.1.



Obrázek 2.1: Schématické zobrazení vyváženého a nevyváženého magnetronu. Převzato z [10].

2.1.2 Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování

Vysokovýkonové pulzní magnetronové naprašování (HiPIMS) je nová PVD technika. HiPIMS využívá vysokého okamžitého výkonu dosahující několika MW a jsou pro něj typické vysokovýkonové pulzy o relativně malé střídě (od 10^{-3} do 10^{-1}), o malé frekvenci (10 Hz až 1 kHz) a délce pulzu napětí v rozmezí 5 – 500 μs [9]. Pulzy jsou aplikovány na terč (katodu), a to má za následek vysokou elektronovou hustotu v blízkosti terče (dosahující až $6 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$). Takováto hustota je o tři řády větší než u konvenčního magnetronu a způsobuje vysoký poměr iontů k neutrálním atomům. K získání správného energetického toku iontů na rostoucí vrstvu můžeme využít záporného napětí přivedeného na substrát. Výhody této techniky jsou v depozici vysoce hustých a hladkých vrstev, dále vylepšení vodivosti a adheze vrstvy, ale nevýhodou je poměrně nízká rychlost depozice [1].

Nyní se budu věnovat využití vysokovýkonového pulzního magnetronového naprašování především pro tvorbu metalických a sloučeninových vrstev. Využívá se k přizpůsobení a zdokonalení vlastností naprašovaných vrstev oproti vrstvám naprašovaných konvenčním magnetronem. Ukazuje se, že vrstvy naprašované pomocí HiPIMS vykazují extrémně hustou mikrostrukturu a velmi hladký povrch. Podobné vlastnosti byli pozorovány nejenom pro metalické, ale i pro sloučeninové

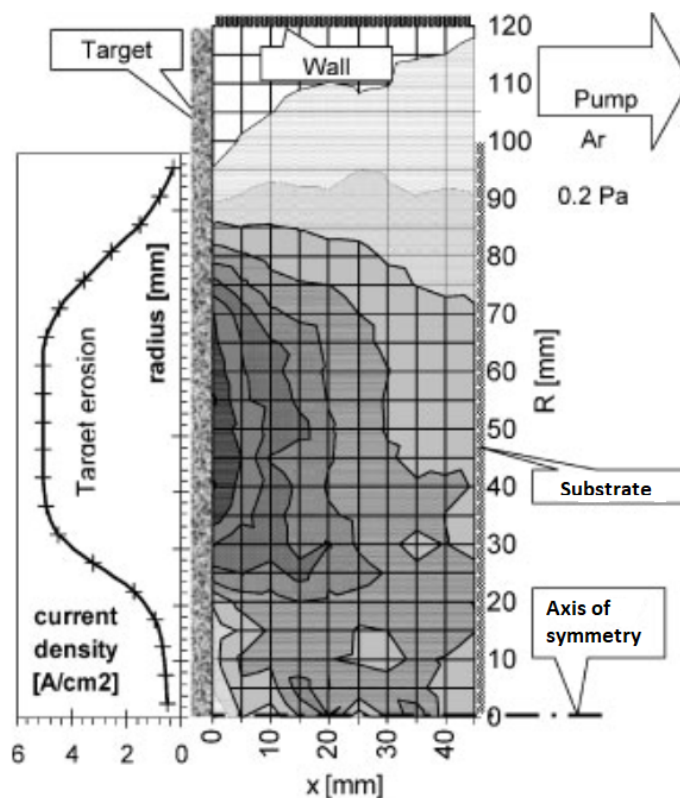
vrstvy. Velký úspěch má HiPIMS v depozici na složitě tvarované substráty, jako například řezné nástroje a vrtáky. Kromě zvýšené hustoty a hladkosti povrchu je další z důležitých využití HiPIMS pro složitě tvarované substráty, a to s mnohem vyšší rychlostí nanášení, a také na povrchy, které nejsou rovnoběžné s povrchem terče. Elektrické vlastnosti byly zkoumány pro Ag vrstvu naprášenou pomocí HiPIMS [1]. Rezistivita vrstev deponovaných HiPIMS byla menší než u vrstev deponovaných konvenčním magnetronovým naprašováním, pokud tloušťka vrstvy byla nižší než 15 nm. Optické vlastnosti vrstvy naprášené pomocí HiPIMS vykazují též vyšší index lomu. V neposlední řadě vrstvy deponované HiPIMS vykazují zlepšení adheze, která je mimořádně důležitá pro úspěch nebo selhání dané vrstvy. Za účelem optimalizace podmínek pro dobrou adhezi je běžná praxe čištění povrchu substrátu iontovým leptáním před depozicí. K tomuto se často využívá inertní plyn, především argon. Ale vysoká koncentrace Ar v pracovním prostoru může být v mnoha případech nevýhodná. HiPIMS byla využita k předpřípravě povrchu nerezových a ocelových substrátů různými energiemi iontů a trváním přípravy, což vede k zlepšení výsledné vrstvy. Tento efekt je způsoben vysokou energií iontů během čištění povrchu [1].

Vysokovýkonové pulzy také mají dopad na kompozici plazmatu v blízkosti terče. Tímto se především myslí zředování pracovního plynu v oblasti u terče. Ukazuje se, že část kinetické energie rozprašovaného materiálu je přenášena na pracovní plyn, což vede k úbytku pracovního plynu a přebytku naprašovaného materiálu v blízkosti terče [1]. Tento efekt byl simulován za účelem určení pohybu, hustoty a energie neutrálních atomů během pulzu. Taková simulace byla provedena Kadlecem [9], kde využíval direct simulation Monte Carlo metodu k simulování pohybu plynu během pulzu. Simulační prostor sestával z cylindrické komory, kde byl uložen na jedné straně kruhový terč a na druhé straně substrát, viz Obrázek 2.2. Materiál terče byl titan a pracovní plyn byl argon o počátečním tlaku 0,2 Pa a teplotě 300 K. Tvar napěťového pulzu byl zvolen obdélníkový s proudem 1 kA, napětím 1000 V a délkou 200 μ s. Samostatná simulace probíhala sledováním emise atomů titanu z terče a počítáním elastických kolizí mezi všemi neutrálními atomy, což je jedna z limitací této simulace. Nepočítalo se s kolizemi mezi ionty a ostatními částicemi. Mezi další omezení patří absence samorozprašování a předpoklad homogenního rozdělení Ar před napěťovým pulzem.

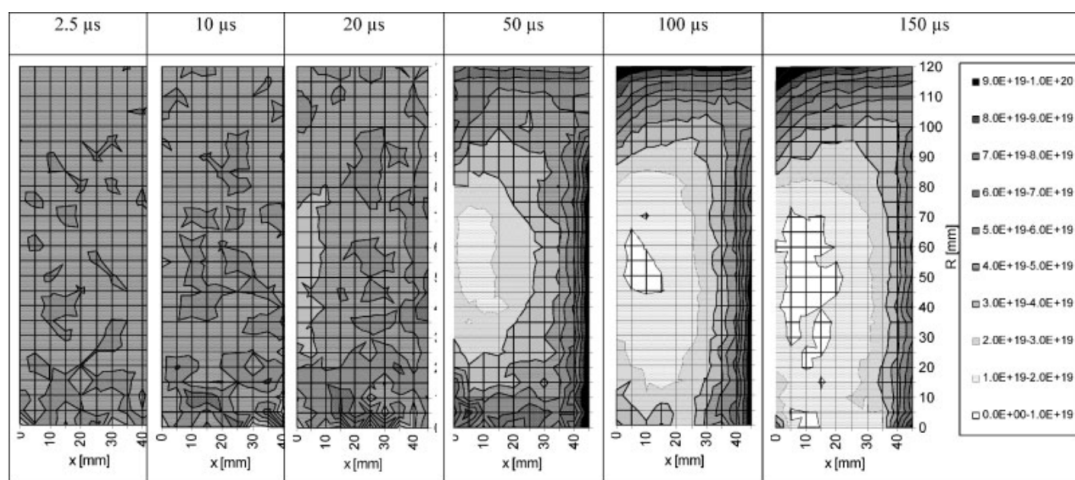
Simulace hustoty Ti v době 50 μ s je zobrazena na Obrázku 2.2. Rychlost proudění naprašovaného Ti vykazuje jasný směr od terče, odpovídající energie je přibližně 5 eV. Nicméně přenos hybnosti z rozprašovaných atomů Ti na Ar je velký pro Ar plyn a má na svědomí výrazné zahřátí neutrálního plynu. Takové zahřátí nakonec vede k toku plynu k prostoru čerpadla. Časový vývoj zředění Ar plynu je znázorněno na Obrázku 2.3. Výsledky této simulace ukazují vliv zředění a rozložení hustoty během pulzu [9].

2.2 Modelování a simulace magnetronových výbojů

S příchodem výpočetní techniky začaly pokusy o modelování plazmatu. Vytvoření obecného modelu je však stále velmi komplikovaný problém. Řešení by zahrnovalo kinetiku neutrálních i nabitých částic, výpočet Maxwellových rovnic a velký počet objemových a povrchových reakcí. Časové a prostorové výpočty by měli být prováděny současně a bez samo-ovlivnění. Proto by takovýto mo-



Obrázek 2.2: Schéma komory s terčem a substrátem použité při simulaci zředování Ar plynu. Znázorněna hustota Ti po uběhnutí 50 μ s po pulzu. Převzato z [9].



Obrázek 2.3: Časový vývoj hustoty argonového plynu. Převzato z [9].

del byl zbytečně složitý a nepoužitelný. Navzdory těmto obtížím je modelování plazmatu velice cenný nástroj pro pochopení fyziky plazmatu a přispívá k rozvoji vylepšení výkonu plazmových zařízení. To umožnil vývoj zjednodušených modelů a simulačních technik a volba vhodných metod ke zkoumání konkrétních problémů.

Vývoj počítačových modelů plazmatu je stále probíhající proces starý více

než padesát let. Největší pokrok proběhl v posledních letech. Počáteční práce s modely tekutin pracovaly s nulovou dimenzí (čistě chemický model). Počítačové zdroje byly tehdy omezené a důraz byl kladen na validaci a vylepšení modelovacích technik a prohloubení studia fyziky plazmatu. Díky úspěchu této rané práce a zlepšení ve výkonnosti počítačů mohli přijít dvou a tří rozměrné modely již v devadesátých letech. Ačkoli přes vylepšení výpočetní rychlosti je stále třeba věnovat pozornost schopnostem a omezením využitých simulačních technik [11].

2.2.1 Modelování magnetronových výbojů

Fluidní modely

Fluidní (tekutinové) modely popisují plazma pomocí hustoty, střední rychlosti a střední energie jednotlivých částic, z nichž se plazma skládá. Hodnoty těchto makroskopických veličin jsou získány řešením rovnice kontinua, toku a bilance energie pro každý druh částic. Tyto rovnice jsou např. ve tvaru [11] pro

- elektrony:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_e = S_e, \quad (2.1)$$

$$-\mu_e \mathbf{E} - \nabla(n_e D_e) = \mathbf{\Gamma}_e, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial(n_e \varepsilon_e)}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\frac{5}{3} \varepsilon_e \mathbf{\Gamma}_e - \frac{2}{3} \kappa \nabla \varepsilon_e \right) = -e \mathbf{\Gamma}_e \cdot \mathbf{E} - n_e \varepsilon_e v_{iz}, \quad (2.3)$$

- ionty:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{\Gamma}_i = S_i, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{\Gamma}_i \mathbf{u}_i) = \frac{Z_i e n_i}{M_i} \mathbf{E} - \frac{\nabla(n_i T_i)}{M_i} - v_{iN} \mathbf{\Gamma}_i, \quad (2.5)$$

- elektrostatické pole:

$$\nabla \cdot (\varepsilon \nabla \phi) = -e(Z_i n_i - n_e). \quad (2.6)$$

Zde rovnice 2.1 a 2.4 jsou rovnice kontinuity, 2.2 a 2.5 rovnice toku, 2.3 bilance energie a 2.6 je Poissonova rovnice. U iontů se obvykle předpokládá, že mají stejnou teplotu jako pracovní plyn, proto rovnici energetické bilance pro ně neřešíme. Veličiny v předešlých rovnicích mají význam: e je elementární náboj, $Z_i e$ je náboj daného typu iontu, \mathbf{u}_e je střední rychlost elektronu, \mathbf{u}_i je střední rychlost iontu, n_e a n_i jsou elektronová, respektive iontová hustota, $\mathbf{\Gamma}_e = n_e \mathbf{u}_e$ je tok elektronů, $\mathbf{\Gamma}_i = n_i \mathbf{u}_i$ je tok iontů, S_e a S_i jsou zdrojové složky pro elektrony, respektive ionty z kolizních a radioaktivních procesů, m_e a M_i je hmotnost elektronu, respektive iontu, v_{iz} a v_{eN} je kolizní frekvence elektronové ionizace, respektive přenosu hybnosti, v_{iN} je kolizní frekvence přenosu iontové hybnosti, T_e a T_i je teplota elektronů, respektive iontů, $\mu_e = \frac{e}{m_e v_{iN}}$ je elektronová pohyblivost, $D_e = \frac{k T_e}{m_e v_{eN}}$ je difúzní konstanta elektronů, $\varepsilon_c = \varepsilon_c(T_e)$ je ztráta energie elektronu při tvorbě

páru elektron-iont, $\varepsilon_e = \frac{3}{2}kT_e$ se nazývá střední energie elektronu, $\kappa = \frac{5}{2}n_eD_e$ je koeficient tepelné vodivosti, ϕ je elektrický potenciál, $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ je intenzita elektrického pole a ϵ je permitivita vakua.

Limitací této techniky je předpoklad určité distribuce rychlostí založené na lokální hodnotě elektrického pole. Proto fluidní modely jsou schopné pozorovat pouze lokální kinetiku částic, a najdou tak využití pro vysoké tlaky, kde ne-lokální efekty nejsou silné. Největší výhodou tohoto modelu je výpočetní rychlost a schopnost rozumně simulovat více druhů částic [11].

Parametrické modely

Parametrické modely používají sadu vstupních parametrů, které jsou v něm měněny v jistém intervalu hodnot. Tímto testujeme odezvu modelu na jejich změnu. Parametrické modely se také nazývají modely fenomenologické rovnováhy.

Základy parametrického modelu HiPIMS výboje byly postaveny před několika lety Christiem [8]. Vylepšen byl Vlčkem a Burcalovou [17] pomocí rozšíření o rovnici rovnováhy pro sekundární elektrony, což umožňuje vyhodnotit podíl množství rozprášených iontů, které míří zpět k terči.

Parametrický model popsáný Vlčkem a Burcalovou [17] vycházel z předpokladu stacionárního stavu. Ve stacionárním stavu je možné celkový tok rozprašovaného materiálu z terče, M_{tot} zapsat jako

$$M_{tot} = S_{mg}G_t^+ + S_{mm}M_t^+, \quad (2.7)$$

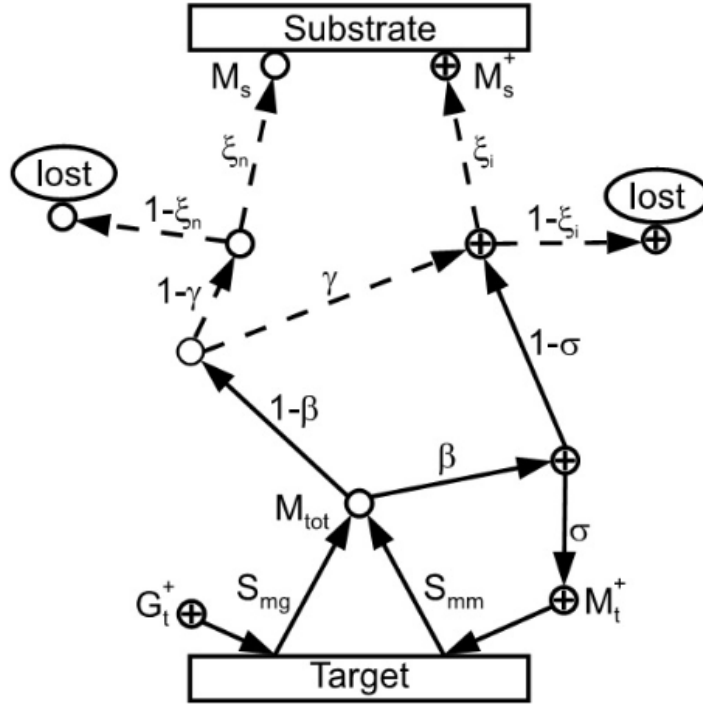
kde G_t^+ a M_t^+ jsou totální toky iontů pracovního plynu na terč a iontů rozprášeného materiálu zpět na terč, S_{mg} a S_{mm} jsou výtěžky rozprašování z procesu plyn-iont a samo-rozprášení. Podílu toku iontů materiálu terče v celkovém toku částic zpět na terč m_t je daný vztahem

$$m_t = \frac{M_t^+}{G_t^+ + M_t^+}. \quad (2.8)$$

Pro parametr m_t musí platit $0 \leq m_t \leq 1$. Dosazením se dostane

$$M_{tot} = [S_{mg}(1 - m_t) + S_{mm}m_t](G_t^+ + M_t^+). \quad (2.9)$$

Hodnoty těchto parametrů závisí na výkonové hustotě, výtěžcích rozprašování terče a ionizační energii rozprášených atomů. Tento model je zobrazen na Obrázku 2.4 a potřebuje znalost výtěžků rozprašování S_{mg} a S_{mm} , koeficientů sekundární elektronové emise γ_{mg} a γ_{mg} , ionizačních energií pracovního plynu a atomů terče, parametry ztráty energie sekundárních elektronů d_e a r . Parametr d_e je podíl sekundárních elektronů ztracených při difúzním přenosu na substrát a na stěny vakuové komory před vytvořením elektron-iontového páru. Parametr r představuje pravděpodobnost zpětného zachycení elektronu na terči. Dále se zde vyskytují relativní ztráty iontů a neutrálních částic materiálu terče při přenosu na substrát (ξ_i, ξ_n) .



Obrázek 2.4: Schéma parametrického modelu. G_t^+ a M_t^+ jsou celkové toky iontů materiálu terče a pracovního plynu na terč. S_{mg} a S_{mm} jsou výtěžky rozprašování terče při dopadu iontů pracovního plynu a materiálu terče. M_{tot} je celkový tok atomů z terče, parametr β je podíl atomů terče, které jsou ionizovány, σ je podíl ionizovaných atomů proudících zpět na terč, γ je podíl atomů terče, které jsou dodatečně ionizovány v objemu plazmatu, ξ_n a ξ_i jsou transportní parametry neutrálů, respektive iontů. Převzato z [17].

Parametrický model umožňuje vypočítat podíl ionizovaných rozprášených atomů vracejících se zpět na terč σ , podíl atomů terče, které jsou ionizovány β a normalizovaný rychlostní koeficient α definovaný jako podíl depoziční rychlosti ku depoziční rychlosti ideálního konvenčního magnetronu [17].

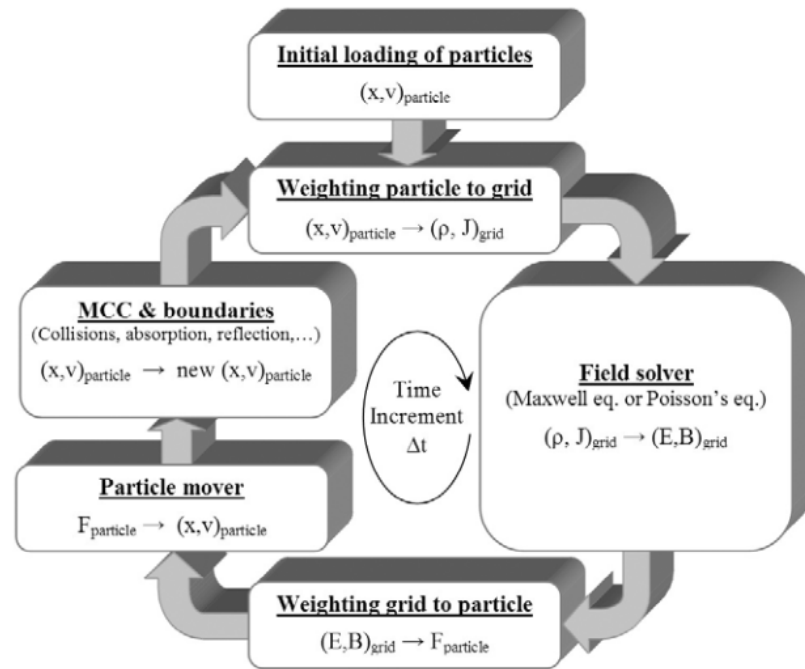
2.2.2 Simulace magnetronových výbojů

Particle-in-cell metoda

Particle-in-cell (PIC) metoda využívá pouze základní rovnice pro pohyb částic bez nutnosti předpokladu rozdělení jejich rychlostí. PIC je dnes jedna z nej-používanějších metod na modelování plazmatu, ale jeden z jejích problémů je časová náročnost. Toto je především znatelné pokud chceme modelovat delší časovou délku, kdy při malém časovém kroku bude potřeba hodně iterací. To samé platí pro prostorovou velikost. PIC metoda je proto náročná na počítačovou paměť a procesor [16].

Historie PIC metody sahá až do pozdních padesátých let. V prvotních jednoduchých modelech se síla náboje brala z přímého výpočtu Coulombova zákona a trajektorie nabitých částic byly vypočítány pomocí periodického systému. Tyto modely ukázaly využitelnost simulace plazmatu. S postupným zlepšováním výpočetního

výkonu přišly modely, které počítaly Coulombův zákon pro každou částici, tedy N^2 pro N částic, ale to bylo neúnosné na výpočetní výkon, proto byly navrženy metody s výpočetní mřížkou, kde se vypočítává Poissonova rovnice. Takovéto modely byly nazývány cloud-in-cell nebo také particle-in-cell a byly schopny simulovat $\sim 10^3 - 10^4$ částic nejčastěji v jedné dimenzi [16]. Základní schéma PIC kódu bylo formalizováno během sedmdesátých let, ale nejlepší texty na toto téma vyšly až v příští dekádě [4]. Tyto texty mají své využití do dnešního dne, protože je zde popsána veškerá základní teorie.



Obrázek 2.5: Diagram PIC schématu. Převzato z [11].

Diagram PIC metody můžeme vidět na Obrázku 2.5. Simulační prostor je diskretizován v čase i prostoru, tím je vytvořena mřížka. Hodnoty pole jsou řešeny na uzlech mřížky, zatímco částice jsou rozmístěny spojitě v prostoru simulace.

Simulační cyklus probíhá následovně: pozice a rychlost částic jsou změněny v čase výpočtem Newton-Lorentzových rovnic. K uvedenému je zapotřebí odhadnout hodnotu pole pro pozici částice, která se získá přes vážení známé hodnoty pole uzlu mřížky. Po posunutí částic je možno připojit Monte Carlo srážkovou metodu na výpočet kolizí částic, využitím statistické pravděpodobnosti srážky částice, a výpočet jejich následných rychlostí po kolizi. Následně proudová hustota a hustota náboje je určena vážením rozložení částic v prostoru pro uzly mřížky. Poté jsou vypočteny Maxwellovy rovnice nebo vypočtena Poissonova rovnice (pro elektrostatické simulace) na uzlech mřížky. Tím simulační cyklus končí, poté je čas posunut o časový krok simulace, a tak může začít další iterace.

Pro zjednodušení a zrychlení výpočtu se často v PIC metodě využívá simulování menšího počtu částic (super-částic). Na jednu super-částici připadá přibližně 10^5 skutečných částic, takové zjednodušení je možné díky kolektivnímu chování nabytých částic v plazmatu [11].

Kapitola 3

Cíle bakalářské práce

1. Prostudovat literaturu o pulzním vysokovýkonovém magnetronovém naprašování a počítačové simulaci plazmatu.
2. Vytvořit počítačový program umožňující sledovat ionizaci v objemu plazmatu pulzního vysokovýkonového magnetronového výboje ve vícesložkové směsi plynů.
3. Pomocí takto vytvořeného počítačového programu provést simulace ve směsi pracovního plynu (argonu) a rozprášeného kovu (titan) a získat prostorová rozložení ionizace atomů sekundárními elektrony v pulzním vysokovýkonovém magnetronovém výboji.
4. Provést kvalitativní diskusi výsledků simulací získaných vytvořeným programem.

Kapitola 4

Metody zpracování

4.1 Užité simulační metody

V této bakalářské práci se věnuji rozložení ionizace atomů sekundárními elektrony v pulzním vysokovýkonovém magnetronovém výboji. Pro tento úkol jsem vytvořil program v programovacím jazyce Fortran, kde vycházím z particle-in-cell metody. Pohyb elektronů ve výboji popisují Borisovou metodou, která integruje diskretizované Newton-Lorentzovy rovnice. V programu je interpolováno externě zadané statické magnetické pole. Hodnoty tohoto magnetického pole byly vypočteny v programu FEMM. Elektrické pole je aproximováno pomocí Child-Langmuirovy rovnice v oblasti blízko terče a dopočítané pomocí lineární interpolace do potenciálu plazmatu, který byl zvolen 0V. Ionizační srážky jsem simuloval pomocí Monte Carlo srážkové metody, kde je náhodně rozhodnuto, zda proběhla srážka. Důležité bylo sledovat rozdělení srážek dle druhu srážky. Použil jsem ionizační srážky s pracovním plynem, argonem, a rozprašovaným kovem, titanem.

4.1.1 Pohyb elektronů ve výboji

Pro popis pohybu částic ve výboji se vychází z Newton-Lorentzových pohybových rovnic [16]:

$$\frac{d}{dt}m\mathbf{v} = \mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (4.1)$$

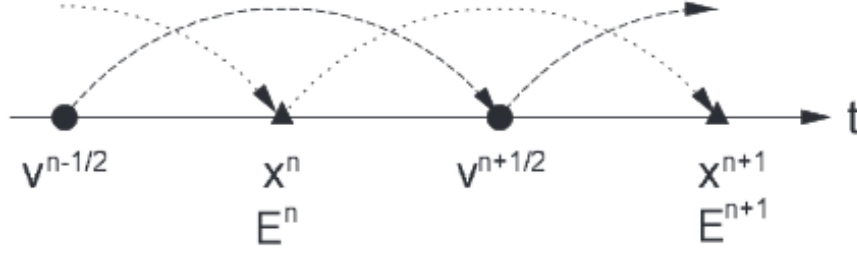
$$\frac{d}{dt}\mathbf{x} = \mathbf{v}. \quad (4.2)$$

K diskretizaci Newton-Lorentzových rovnic se využije průměrná diference druhého řádu, nebo-li leapfrog metoda [5]. Pozice částic jsou vyhodnocovány v časovém kroku Δt , kdežto rychlosti jsou vyhodnocovány v mezikrocích $t + \Delta t$ a $t - \Delta t$. V této nové diskretizované podobě Newton-Lorentzovy rovnice mají tvar

$$\frac{\mathbf{v}^{t+\Delta t/2} - \mathbf{v}^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} = \frac{q}{m}(\mathbf{E}^t + \frac{\mathbf{v}^{t+\Delta t/2} + \mathbf{v}^{t-\Delta t/2}}{2} \times \mathbf{B}^t), \quad (4.3)$$

$$\frac{\mathbf{x}^{t+\Delta t} - \mathbf{x}^t}{\Delta t} = \mathbf{v}^{t+\Delta t/2}. \quad (4.4)$$

Leapfrog metoda minimalizuje numerické ohřívání oproti jiným způsobům diskretizace těchto rovnic.



Obrázek 4.1: Schéma leapfrog metody. Převzato z [16].

Borisova metoda

Efektivní způsob, jak integrovat tyto rovnice, který obchází úplné počítání vektorového součinu, přináší Borisova metoda. Pro Borisovu metodu se vychází z rovnice 4.3 s oddělením výpočtu elektrické a magnetické síly. Provedením substituce [6]

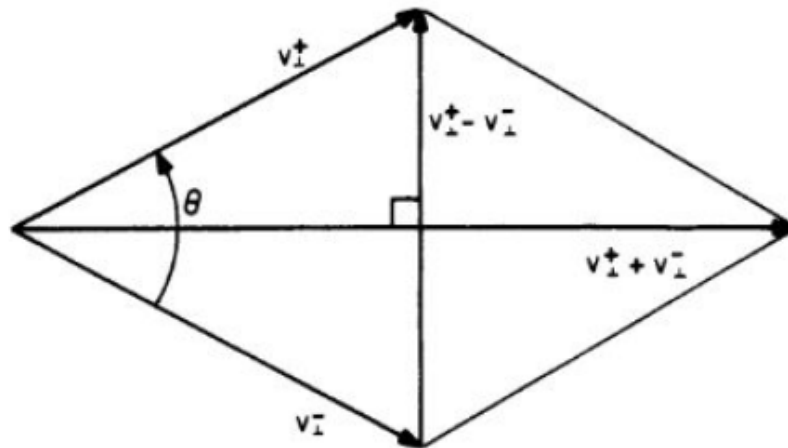
$$\mathbf{v}^{t-\Delta t/2} = \mathbf{v}^- - \frac{q\mathbf{E}^t \Delta t}{m} \frac{1}{2}, \quad (4.5)$$

$$\mathbf{v}^{t+\Delta t/2} = \mathbf{v}^+ + \frac{q\mathbf{E}^t \Delta t}{m} \frac{1}{2} \quad (4.6)$$

$$(4.7)$$

se vektor \mathbf{E} zcela vynuluje dosazením do rovnice 4.3, a tím se získá pouze rotace magnetického pole, která je znázorněna na Obrázku 4.2 a je vyjádřena ve tvaru

$$\frac{\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}^-}{\Delta t} = \frac{q}{2m} (\mathbf{v}^+ + \mathbf{v}^-) \times \mathbf{B}. \quad (4.8)$$



Obrázek 4.2: Reprezentace rotace z rovnice 4.8. Převzato z [4].

Z Obrázku 4.2 dává geometrická úvaha

$$\left| \tan \frac{\theta}{2} \right| = \frac{|\mathbf{v}_+^+ - \mathbf{v}_-^-|}{|\mathbf{v}_+^+ + \mathbf{v}_-^-|} = \frac{qB \Delta t}{m} \frac{1}{2}. \quad (4.9)$$

Dále pokračuje řešení rotace. Nejdříve se nastolí případ, kde vektor \mathbf{B} je rovnoběžný s osou z a velikost rotace v rovině xy je dána vztahem

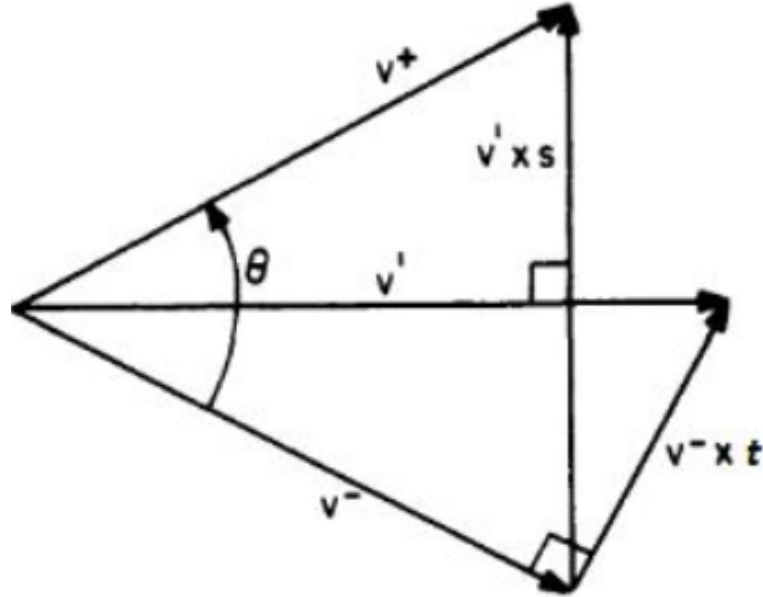
$$\tan \frac{\theta}{2} = -\frac{qB \Delta t}{m \frac{\Delta t}{2}}. \quad (4.10)$$

Nyní lze vypočítat \mathbf{v}^- , a to přičtením poloviny elektrického impulzu k $\mathbf{v}^{t-\Delta t/2}$ dle 4.5. Následně se vytvoří vektor \mathbf{v}' , který je kolmý na $(\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}^-)$ a \mathbf{B} , odtud užitím rovnosti

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}^+ \times \mathbf{t}. \quad (4.11)$$

Na Obrázku 4.3 je zobrazeno, že úhel mezi \mathbf{v}^- a \mathbf{v}' je $\frac{\theta}{2}$, tedy \mathbf{t} je dán

$$\mathbf{t} \equiv -\mathbf{b} \tan \frac{\theta}{2} = \frac{q\mathbf{B} \Delta t}{m \frac{\Delta t}{2}}. \quad (4.12)$$



Obrázek 4.3: Repräsentace rotace od \mathbf{v}^- k \mathbf{v}^+ . Převzato z [4].

Vektor $(\mathbf{v}^+ - \mathbf{v}^-)$ je rovnoběžný s $\mathbf{v}' \times \mathbf{B}$, odkud

$$\mathbf{v}^+ = \mathbf{v}^- + \mathbf{v}' \times \mathbf{s}, \quad (4.13)$$

kde \mathbf{s} je rovnoběžný s \mathbf{B} a jeho velikost je stanovena podmínkou $|\mathbf{v}^-|^2 = |\mathbf{v}^+|^2$, tj.

$$\mathbf{s} = \frac{2\mathbf{t}}{1 + t^2}. \quad (4.14)$$

Tímto způsobem po přidání poloviny elektrického impulzu k \mathbf{v}^+ dostáváme $\mathbf{v}^{t+\Delta t/2}$, což představuje vektor rychlosti pro tuto iteraci [4].

Implementace pohybu elektronů v programu

Pro implementaci v programu je při vytváření sekundárních elektronů posunuta jejich rychlost o $\frac{\Delta t}{2}$ dozadu, aby byla dodržena leapfrog metoda a možnost

programu postupovat po jednom časovém kroku. O popis pohybu elektronů v prostoru se stará jediný modul, který obsahuje metodu na výpočet vektorového součinu a dvě zásadní metody:

- **particlePush**(\mathbf{x} , \mathbf{v} , dt);

Metoda posune pozici elektronu \mathbf{x} ve směru rychlosti elektronu \mathbf{v} o vzdálenost odpovídající časovému kroku dt .

- **updateVelocity**(\mathbf{x} , \mathbf{v} , \mathbf{E} , \mathbf{B} , qm , dt);

Metoda přepočítává rychlost \mathbf{v} pro další časový krok dt na základě elektrického pole \mathbf{E} , magnetického pole \mathbf{B} a podílu elementárního náboje a hmotnosti elektronu daná parametrem qm , a to pomocí Borisovy metody, která je popsána výše.

4.1.2 Ionizační srážky

Existence sekundárního elektronu ve výboji se dá popsat následovně. Nejdříve je sekundární elektron vytvořen na terči dopadem iontů, poté je urychlován elektrickým polem do prostoru, kde pomalu ztrácí energii díky srážkám s neutrálními atomy. Sekundární elektron je zároveň ovlivňován magnetickým polem, které neustále zakřivuje jeho trajektorii. U bezkolizního modelu je magnetickým polem elektron uvězněn navždy, pro kolizní model může a nemusí elektron takto být uvězněn. Rozdíl mezi bezkolizní trajektorií a kolizní je uveden na Obrázku 4.4. Pokaždé, kdy proběhne srážka, se může elektron odrazit mimo svoji trajektorii, na které byl uvězněn. Tedy některé elektrony jsou uvězněny v oblasti hustého plazmatu natolik dlouho, že provedou velké množství srážek. Některé elektrony mohou být z této oblasti odraženy ihned.

Existují tři základní typy kolizí s neutrálními atomy: elastické srážky, ionizační a excitační. Pro všechny platí, že změní směr rychlosti elektronu a nejčastěji sníží jeho energii. Ztráta energie při srážce se mění podle typu srážky, největší ztrátu má ionizační srážka (pro Argon 15,8 eV + kinetická energie vzniklého elektronu), následovaná excitační srážkou ze základní stavu (pro argon 11,6 – 15,8 eV) [14].

Monte Carlo srážková metoda

Monte Carlo srážková metoda (z angl. Monte Carlo collision method, MCC method) spočívá v procházení přes všechny částice v systému pro každý časový krok a testování, zda proběhla srážka. Nejdříve se vypočítá kinetická energie pro každou i -tou částici [15]

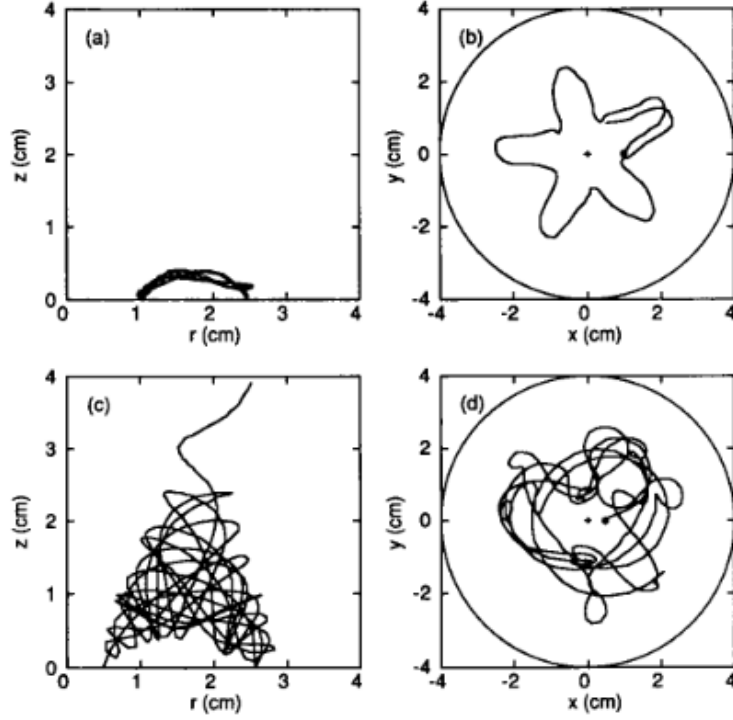
$$\epsilon_i = \frac{1}{2}m_i v_i^2 = \frac{1}{2}m_i(v_{ix}^2 + v_{iy}^2 + v_{iz}^2). \quad (4.15)$$

Pomocí kinetické energie můžeme vypočítat pro danou částici její totální účinný průřez

$$\sigma_T(\epsilon_i) = \sigma_1(\epsilon_i) + \dots + \sigma_N(\epsilon_i). \quad (4.16)$$

Potom pravděpodobnost kolize i -té částice je vypočítána na základě uražené dráhy $\Delta s_i = v_i \Delta t$, ve tvaru

$$P_i = 1 - \exp(-\Delta s_i \sigma_T(\epsilon_i) n_t(\mathbf{x}_i)) = 1 - \exp(-v_i \Delta t \sigma_T(\epsilon_i) n_t(\mathbf{x}_i)) \quad (4.17)$$



Obrázek 4.4: Trajektorie sekundárního elektronu. Zde (a) a (b) je bezkolizní model, kde je elektron uvězněn na vždy. Kolizní model je zobrazen na (c) a (d). Převzato z [14].

kde Δt je časový krok integrace modelu, $n_t(\mathbf{x}_i)$ je lokální hustota atomů daného typu, se kterým se daná částice sráží. Kolize proběhne pokud rovnoměrně rozdělené náhodné číslo na intervalu $< 0, 1 >$ je menší než P_i , poté je rozhodnuto náhodně, který typ kolize proběhl a je vypočítána následně nový směr rychlosti a energie částice [15].

Rozhodnutí, který typ kolize proběhl, je dáno náhodně pomocí

$$\begin{aligned}
 R &\leq \nu_1(\varepsilon_i)/\nu' && (1. \text{ typ kolize}), \\
 \nu_1(\varepsilon_i)/\nu' < R &\leq (\nu_1(\varepsilon_i) + \nu_2(\varepsilon_i))/\nu' && (2. \text{ typ kolize}), \\
 &\vdots && \\
 \sum_{j=1}^{N-1} \nu_j(\varepsilon_i)/\nu' < R &&& (N. \text{ typ kolize}),
 \end{aligned}$$

kde R je rovnoměrně rozdělené náhodné číslo na intervalu $[0, 1]$, $\nu_j = v_i \sigma_j(\varepsilon_i) n_j(\mathbf{x}_i)$ je kolizní frekvence pro j -tý typ kolize, kde $1 \leq j \leq N$ a N je počet typů kolizí, $\nu' = v_i \sigma_T(\varepsilon_i) n_t(\mathbf{x}_i)$ je celková kolizní frekvence.

Monte Carlo metoda kontroluje, jestli proběhla srážka pro každý časový krok a každý elektron, ale v časovém úseku $< t, t + \Delta t >$ počítá, že elektron může uskutečnit pouze jednu srážku. Ve skutečnosti ale může proběhnout v úseku $< t, t + \Delta t >$ více srážek a pravděpodobnost vzniku chyby nám určuje velikost Δt . Odhadnutí této chyby a volba Δt se provede za předpokladu, že po srážce zůstává energie sraženého elektronu konstantní, potom pravděpodobnost n srážek během

jednoho časového kroku je přibližně P_i^n . Poté lze konstatovat, že chyba pro počet srážek během jednoho časového kroku je

$$r = \sum_{k=2}^{\infty} P_i^k = \frac{P_i^2}{1 - P_i}. \quad (4.18)$$

Pro chybu $r < 0,01$ je potřeba $P_i < 0,095$, tedy kolizní frekvence ν_i daného elektronu vynásobena Δt musí být menší než 0,1 [15].

Implementace Monte Carlo srážkové metody v programu

Implementace v programu je v podobě modulu, který obsahuje dvě zásadní metody:

- **collisionMCC(collisionTypes, electron, dt);**

Metoda na základě *collisionTypes* nechá vypočítat celkový účinný průřez, z rychlosti elektronu nechá vypočítat jeho kinetickou energii a z jeho pozice zavolá výpočet hustoty daného plynu. Poté vypočítá pravděpodobnost srážky dle rovnice 4.17, kde časový krok je dt . Srovnáním pravděpodobnosti srážky s náhodným číslem rozhodne o zavolání metody **performCollision**.

- **performCollision(collisionTypes, electron);**

Metoda provede srážku ve smyslu změny rychlosti daného elektronu. Problém se převede do sférických souřadnic (r, ϕ, χ) , aby byly vygenerovány dva náhodné úhly ϕ, χ a r je velikost rychlosti po snížení energie o ionizační energii daného plynu. Zpětným převedením do kartézských souřadnic se získá výsledná rychlost.

Účinný průřez byl externě tabulován a equidistantně interpolován pro rychlejší a přesnější výpočty. Pro argon jsem čerpal z veřejné databáze LXCat [3] a pro titan jsem využil Bartlettových výsledků [2]. Použil jsem dva různé zdroje účinných průřezů, neboť v databázi LXCat byly sice přesnější data, ale neobsahovaly titan. Oba účinné průřezy jsou uvedeny na Obrázku 4.5.

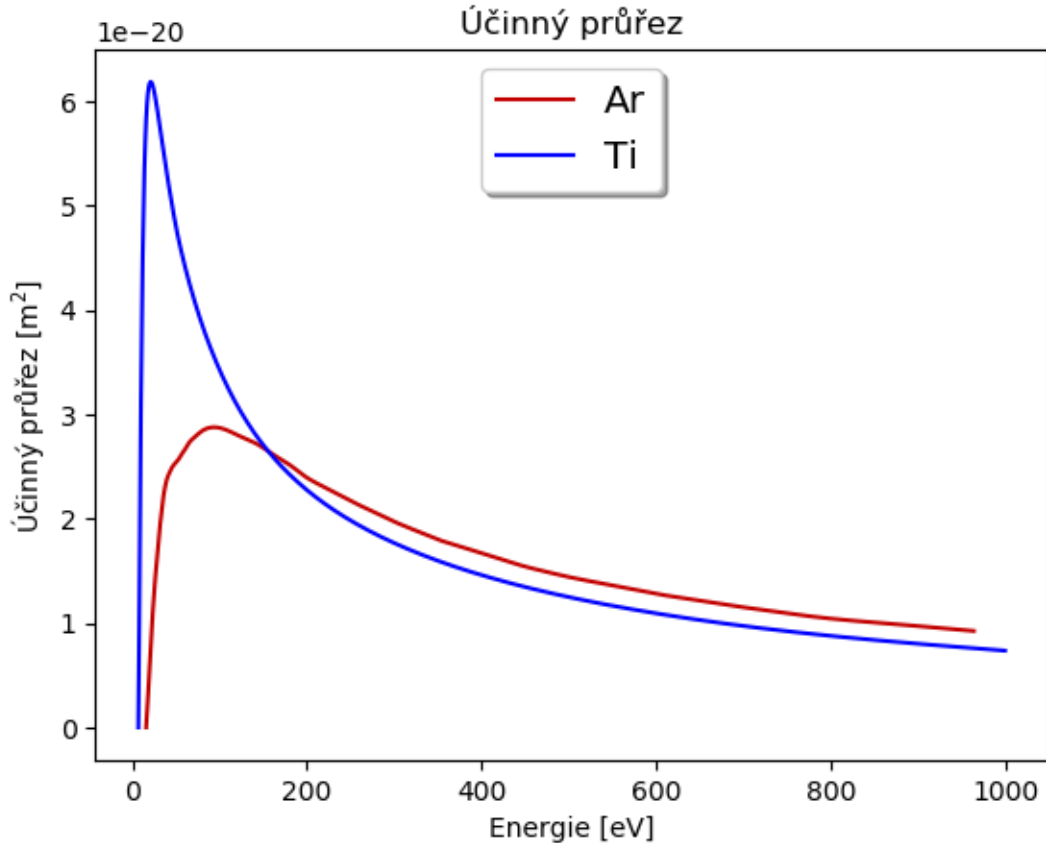
4.2 Struktura simulačního programu

4.2.1 Simulační oblast

Simulační oblast má tvar cylindru o poloměru 0,125 m a výšce 0,2 m, ve kterém je umístěn terč o poloměru 0,05 m a výšce 0,02 m. Substrát je též cylindr o poloměru 0,025 m, výšce 0,02 m a je umístěn ve vzdálenosti 0,1 m od terče. Oblast, terč i substrát jsou soustředně uloženy v rovině xy , jak znázorňuje Obrázek 4.6.

V programu jsou využity globální kartézské souřadnice, kde střed terče je umístěn v bodě $T = (0,125; 0,125; 0,02)$. Pro výpočet magnetického i elektrického pole je vhodné využití lokálních kartézských souřadnic, kde je střed terče položen v bodě $(0;0;0)$. Z uvedeného důvodu bylo nutné zavést transformaci souřadnic. V mém případě pouze translaci zapsanou následovně:

$$x' = x - a \qquad y' = y - b \qquad z' = z - c, \quad (4.19)$$



Obrázek 4.5: Účinný průřez pro ionizaci argonu (červeně) a titanu (modře) v závislosti na energii dopadajícího elektronu.

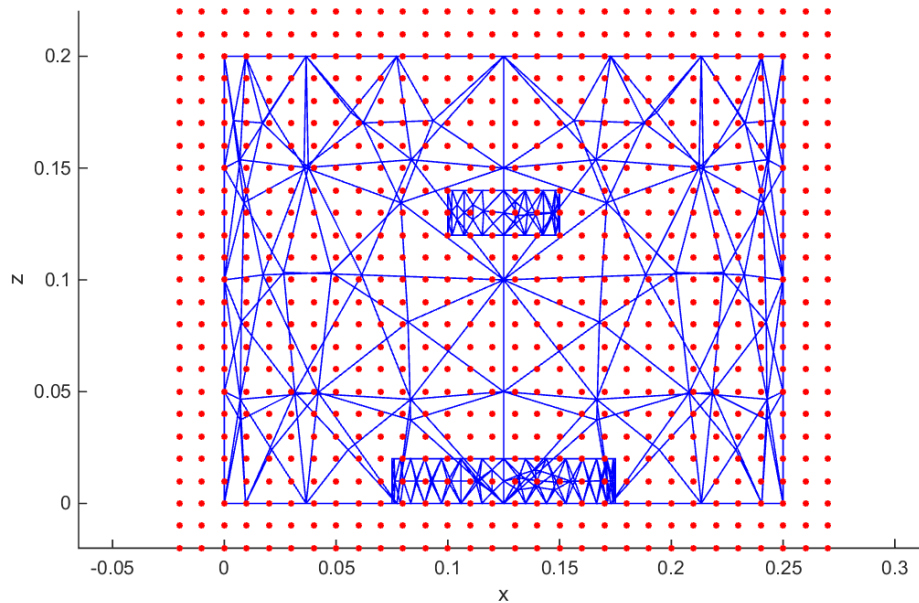
kde x, y, z jsou globální souřadnice, x', y', z' jsou lokální souřadnice a a, b, c jsou konstanty určené bodem T , který odpovídá středu terče na jeho horní ploše v globálních souřadnicích.

4.2.2 Magnetické pole

Magnetické pole je vygenerováno pomocí programu FEMM (z angl. Finite Element Method Magnetics) [13], který využívá metody konečných prvků a řeší 2D či osově symetrické problémy. To je výhodné pro cylindrickou simulační oblast, jako v mém případě. Pomocí nástrojů v programu FEMM byl vytvořen následný model odpovídající nevyváženému magnetronu 2. druhu a řešením byla získána 2D tabulka hodnot magnetického pole, která je graficky zobrazena na Obrázku 4.7. Následně tyto hodnoty interpoluji pomocí bilineární interpolace a cylindrickou transformací souřadnic dostávám magnetickou indukci \mathbf{B} v bodě s globálními souřadnicemi.

4.2.3 Elektrické pole

Elektrické pole je aproximováno pomocí Child-Langmuirovy rovnice nad terčem v přielektrondové oblasti (sheathu) a dále je popsáno lineární interpolací k hodnotám plazmového potenciálu, který byl zvolen 0V. Jedná se pouze o hrubý model



Obrázek 4.6: Tvar a rozměry simulační oblasti v rovině xz .

elektrického pole, který však odráží základní charakteristiky reálných polí v magnetronových výbojích. Přesné řešení elektrického pole magnetronových výbojů přesahuje cíle této práce.

Elektrický potenciál

Pro výpočet elektrického pole je nutné nejdříve stanovit elektrický potenciál v daném bodě. Za předpokladu cylindricky symetrického potenciálu je stanoven dle rovnice

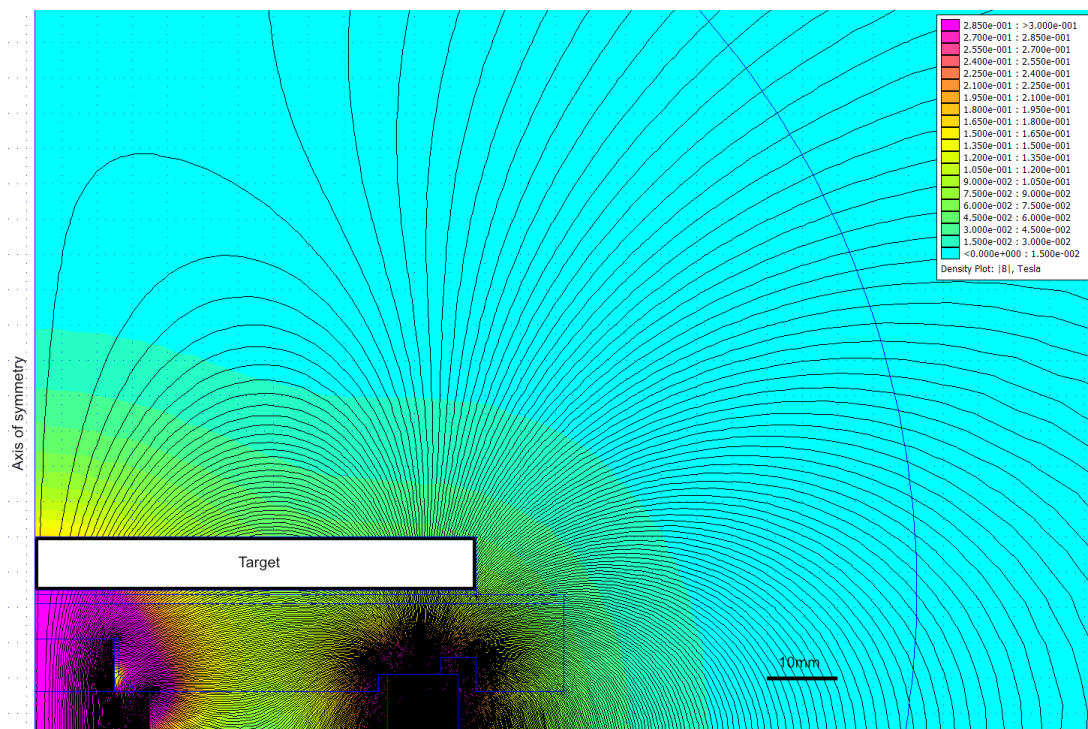
$$\mathbf{E} = -\text{grad}V = - \left(\frac{\partial V}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial \phi}, \frac{\partial V}{\partial z} \right)_{cyl.}, \quad (4.20)$$

kde V je potenciál elektrického pole v daném místě pole. V se značí kvůli cylindrickým souřadnicím (r, ϕ, z) . Pro cylindricky symetrický potenciál platí $V(r, \phi, z) = \text{konst.}$ pro $r = \text{konst.}$ a $z = \text{konst.}$, odtud tedy $\frac{\partial V}{\partial \phi} = 0$.

Hustota elektrického proudu

Hodnota elektrického potenciálu je závislá na plošné hustotě elektrického proudu tekoucího povrchem terče. Výpočet plošné hustoty elektrického proudu j , je dán počtem iontů n dopadlých na danou plochu terče. Poloměr terče je rozdělen na N stejně širokých intervalů, kde se určuje hodnota j_i v intervalu poloměru i , tj. v intervalu (r_i, r_{i+1}) a je pak vypočtena pomocí rovnice

$$j_i = \frac{1}{S_i} I_t \frac{n_i}{n_{tot}}, \quad (4.21)$$



Obrázek 4.7: Zobrazení výsledné velikosti magnetického pole a tvaru jeho siločar tak, jak byly vypočteny a zobrazeny programem FEMM. Pro simulaci pohybu elektronů bylo využito pouze hodnot radiální a axiální magnetické indukce B_r a B_z nad terčem magnetronu, a to v rozsahu $r \in \langle 0, 100 \text{ mm} \rangle$ a $z \in \langle 0, 100 \text{ mm} \rangle$, přičemž bod o souřadnicích $(0, 0)$ odpovídá průsečíku horní plochy terče a osy symetrie. V ostatních místech simulačního prostoru byla velikost složek magnetického pole pokládána za nulovou. Na obrázku je vyznačena pozice terče.

kde S_i je plocha mezikruží terče mezi poloměry r_i a r_{i+1} , I_t je výbojový proud procházející celým povrchem terče, n_i je počet iontů dopadajících do intervalu poloměrů r_i a r_{i+1} a n_{tot} je celkový počet iontů dopadajících na celou plochu terče, tj. $n_{tot} = \sum_i^n n_i$.

Pro zlepšení rozdělení hodnot hustoty elektrického proudu $j(r)$ na povrchu terče je hodnota v r určena pomocí lineární interpolace ze sousedních intervalů poloměrů.

Stanovení průběhu potenciálu elektrického pole

Byla provedena jednoduchá aproximace, tak aby zajistila tvar potenciálu u terče odpovídající charakteru reálných potenciálů. Důraz je však kladen na jednoduchost a rychlost výpočtu. Výpočet je rozdělen následovně:

- Nad terčem, tj. $0 \leq r \leq r_t$, kde r_t je poloměr terče a r je lokální souřadnice nad povrchem terče:

Nejdříve je stanovena délka sheathu $s(r)$ dle rovnice [12, str. 176]

$$s(r) = \frac{2}{3} \left(\frac{2e\varepsilon_0^2}{M} \right)^{\frac{1}{4}} \frac{U_t^{\frac{3}{4}}}{j(r)^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.22)$$

kde e je elementární náboj, ε_0 je permitivita vakua, M je hmotnost iontů dopadajících na terč (zde Ar^+), U_t je napětí na terči a $j(r)$ je hustota elektrického proudu pro polohu r na terči.

Potom dle výšky z nad povrchem terče a hranice sheathu se dělí výpočet takto:

- Pokud je $z \leq s(r)$, potom je hodnota V vypočtena pomocí Child-Langmuirovy rovnice ve tvaru [12, str. 176]

$$V = -U_t f_{up} \left(\frac{s(r) - z}{s(r)} \right)^{\frac{4}{3}}, \quad (4.23)$$

kde f_{up} je faktor udávající část napětí na terči připadající na potenciálový spád v sheathu.

- Pokud $s(r) < z \leq z_{max}(r)$, potom je hodnota V vypočítána jako lineární interpolace podle z mezi hodnotou $-U_t f_{up}$ na okraji sheathu ($z = s(r)$) a 0V pro $z = z_{max}(r)$.

Hodnota $z_{max}(r)$ je vypočtena z rovnice

$$z_{max}(r) = f_z s_{min} \frac{s_{min}^{s_{exp}}}{s(r)^{s_{exp}}}, \quad (4.24)$$

kde f_z je faktor udávající kolikrát delší bude celková oblast poklesu potenciálu než samotný sheath o minimální tloušťce s_{min} , která je dána rovnicí pro $s(r)$ v místě s poloměrem r_0 , kde je největší hustota elektrického proudu, a s_{exp} je škálovací faktor udávající umístění hranice presheathu, aby tvar poklesu potenciálu odpovídal reálným magnetronovým výbojům.

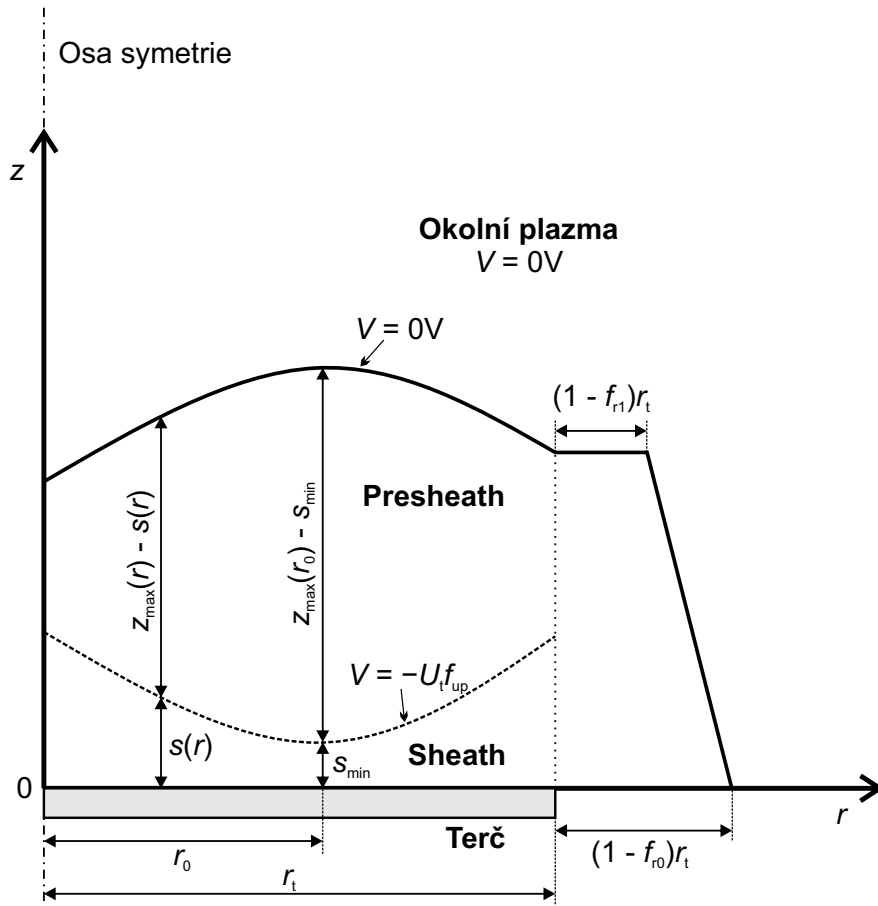
– V ostatních případech je $V = 0V$.

- Mimo terč, tj. $r > r_t$:

- Hodnota V je určena lineární interpolací podle poloměru r mezi hodnotou $V(r_t, z)$ a $0V$ na hranici oblasti ohraničenou úsečkami o krajních bodech $(f_{r0}r_t, 0)$, $(f_{r1}r_t, z_{max}(r_t))$ a $(r_t, z_{max}(r_t))$, $(f_{r1}r_t, z_{max}(r_t))$, přičemž f_{r0} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = 0$ a f_{r1} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = z_{max}(r_t)$, viz ilustrativní Obrázek 4.8.

- V ostatních případech je $V = 0V$.

V této práci byli zvoleny následující hodnoty parametrů: $f_z = 0,05$, $f_{up} = 0,9$, $f_{r0} = 1,2$, $f_{r1} = 1,1$ a $s_{exp} = 2,5$.



Obrázek 4.8: Schéma rozdělení elektrického potenciálu v programu. Zde $s(r)$ určuje prostor sheathu, kde je potenciál aproximován Child-Langmuirovou rovnicí, s_{min} je minimální tloušťka sheathu, $z_{max}(r) - s(r)$ určuje prostor presheathu, kde je potenciál lineárně interpolován mezi hodnotami potenciálu na hranici sheathu a $0V$, f_{r0} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = 0$ a f_{r1} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = z_{max}(r_t)$ a r_t je poloměr terče.

4.2.4 Rozložení objemové hustoty atomů

V práci bylo nutné znát rozložení hustoty atomů v simulačním prostoru. Rozložení hustoty byla získána z Bělohoubkových výsledků [7] jako tabulka hodnot pro každý cm^3 simulačního prostoru. Hustoty byly vypočteny pro různé výbojové proudy (konkrétně 5 A, 20 A a 50 A) a pro zadaný tlak plynu (argonu) v komoře 0,5 Pa.

V práci [7] je k výpočtům rozložení hustot atomů využito simulační metody Direct Simulation Monte Carlo (DSMC). DSMC je založena na pravděpodobnostním řešení Boltzmannovy rovnice simulováním velkého počtu částic a prováděním pravděpodobnostních srážek daných účinným průřezem. Simulace probíhá následovně. Nejdříve dojde k načtení vstupních dat, tj. geometrie a parametrů částic. Poté probíhá hlavní simulační cyklus rozdělený do tří fází. V první fázi dochází k integraci přes všechny částice na základě pohybových rovnic. Ve druhé fázi se na základě nové pozice částice vyhodnocuje interakce s povrchy geometrie, tj. absorpce nebo odraz částice od stěny. Ve třetí fázi dochází k náhodným srážkám daných náhodným číslem a účinným průřezem částic. Pokud proběhla srážka je vypočítán úhel odrazu a tedy i její nová rychlost. Celý simulační cyklus probíhá až do určitého počtu kroků a tím se ukončí. Během cyklu jsou sbírána statistická data (např. hustota částic, jejich střední rychlosti apod.), která jsou výsledkem simulace.

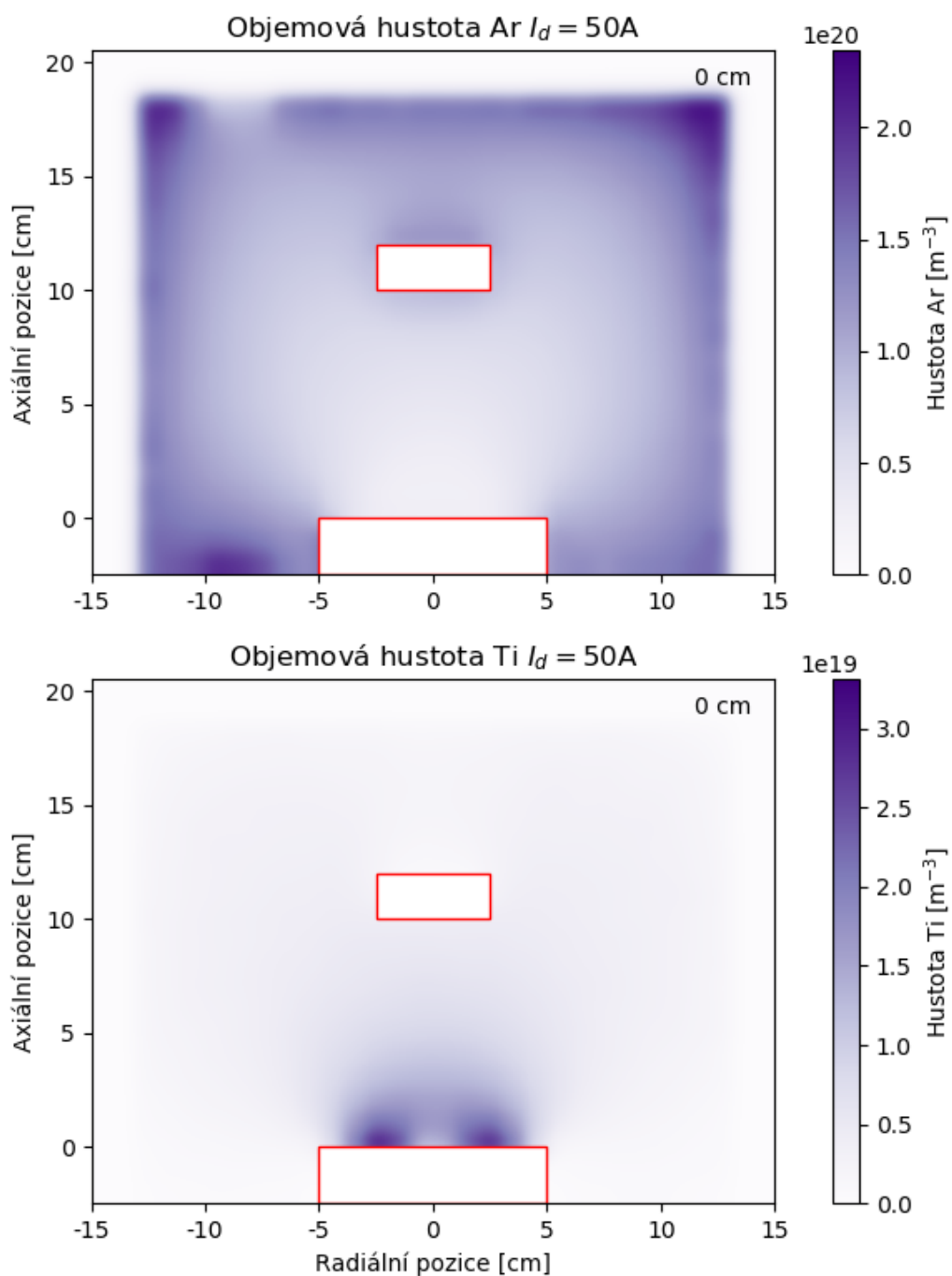
4.2.5 Simulační cyklus

Simulační cyklus je tvořen dvěma *for* cykly, první od jedné ku určenému počtu časových kroků a druhý prochází přes všechny elektrony, jejichž počet je určen předem a jsou na sobě navzájem nezávislé.

V simulačním cyklu, který je znázorněn na pseudokódu dole, je pro každý časový krok a pro každý elektron pracováno s metodami, které jsou popsány výše. Nejdříve je přepočítána rychlost dle Borisovy metody 4.1.1 metodou **updateVelocity**, poté je posunuta pozice elektronu pomocí metody **particlePush** dle nové rychlosti \mathbf{v} a časového kroku dt , dále je prověřeno, zda-li neproběhla kolize elektronu s pracovním plynem metodou **collisionMCC**, která je implementací Monte Carlo srážkové metody 4.1.2. V poslední řadě se kontroluje, zda elektron má stále ještě dostatečnou energii pro ionizační srážku, či zda nedopadl na stěnu simulačního prostoru, popřípadě na terč nebo substrát. Je-li tomu tak, je elektron odebrán ze simulace.

```
do i = 1, steps
  do j = 1, numberOfElectrons
    call updateVelocity(x, v, E, B, qm, dt)
    call particlePush(x, v, dt)
    call collisionMCC(collT, electron(j), dt)

    if (isOutOfCell(x) .or. isLowEnergy(v)) then
      call destroyEle(electron(j))
    end if
  end do
end do
```



Obrázek 4.9: Rozložení objemové hustoty atomů Ar a Ti pro centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojový proud $I_d = 50$ A. Data jsou brána z [7] a interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazená pozice terče a substrátu.

Kapitola 5

Výsledky a diskuse

Provedl jsem tři různé simulace lišící se výbojovým proudem přivedeným na terč, a to konkrétně $I_d = 5 \text{ A}$, 20 A a 50 A . Pro každou simulaci byl nastaven konstantní počet simulovaných sekundárních elektronů (konkrétně 5×10^5). Výsledkem simulace byla tabulka, která obsahovala objemovou hustotu ionizace pro ionty Ar a Ti pro každou buňku simulačního prostoru. Jedna buňka odpovídá 1 cm^3 simulačního prostoru.

Kvůli složitosti zobrazení rozložení ionizace ve 3D jsou data prezentována v podobě řezů rovin xz pro různá y . Simulační prostor je rozdělen na 30 buněk v osách x a y a na 25 buněk v ose z . Centrální řez, kde se nachází střed terče, odpovídá řezu pro $y = 0 \text{ cm}$. Hlavní pozice v racetracku, kde dochází k největšímu iontovému bombardování terče, jsou vzdáleny 3 cm od středu terče, což odpovídá řezům pro $y = -3 \text{ cm}$ a $y = 3 \text{ cm}$.

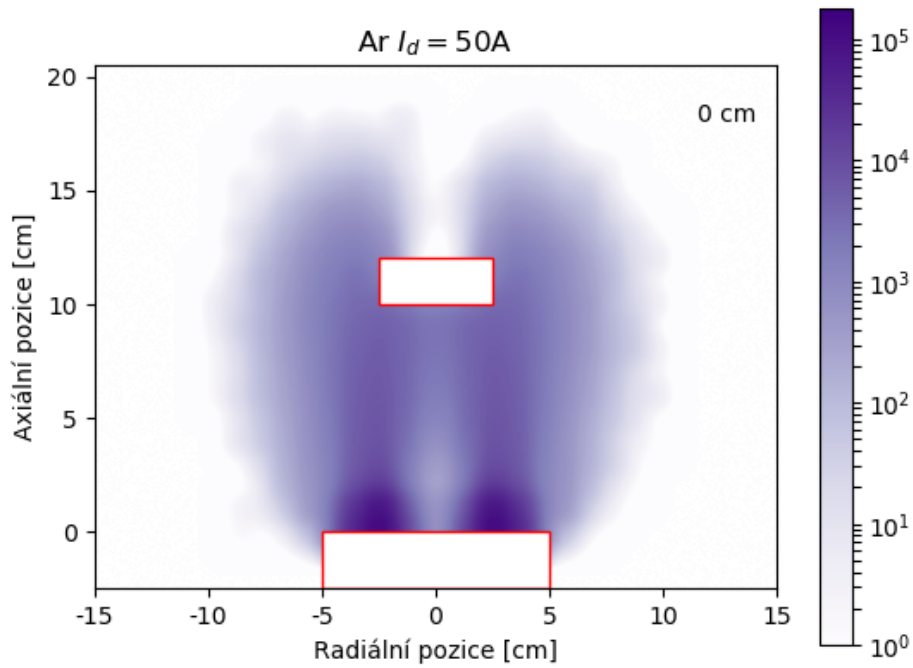
5.1 Surová data vypočtená programem

Surová data získaná simulací zobrazující prostorové rozložení objemové hustoty ionizace jsou pro 50 A zobrazena na Obrázku 5.1 pro Ar^+ a na Obrázku 5.2 pro Ti^+ v centrální pozici roviny řezu, tedy procházející středem terče.

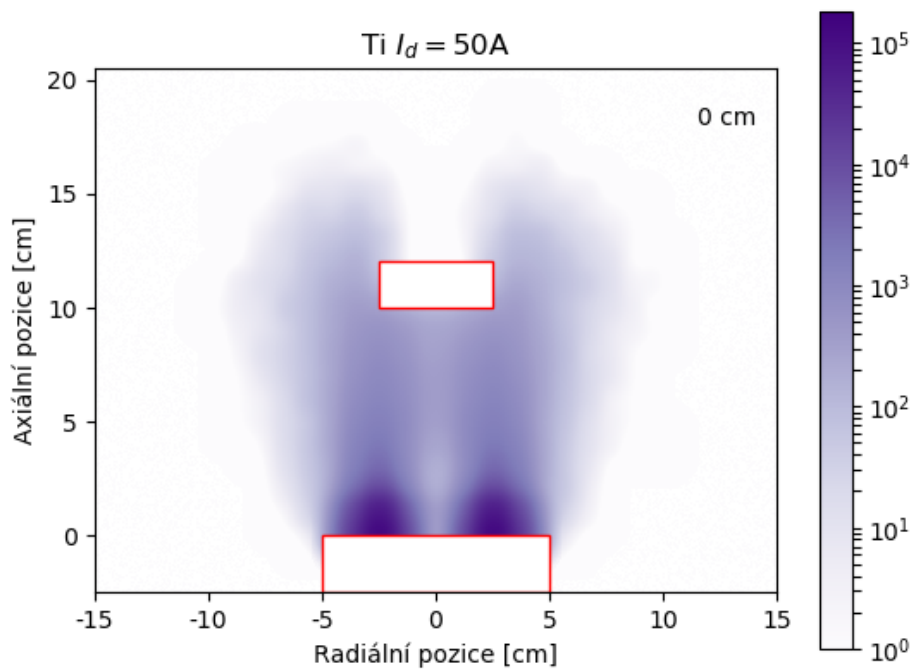
Z těchto surových dat není možné vytvářet plnohodnotné závěry, protože výsledné hodnoty objemové hustoty ionizace neodpovídají skutečným hodnotám při magnetronovém výboji. Je to způsobeno tím, že v simulaci byl použit fixní počet sekundárních elektronů emitovaných z terče magnetronu (konkrétně 5×10^5). Součástí simulačního programu nebylo sledování dopadu vytvořených iontů na terč a nelze tak počet vytvořených iontů přepočítat na skutečnou objemovou hustotu jejich výskytu. Vhodným zpracováním výsledků, např. dělením jejich maximem či vzájemným podílem objemových hustot ionizace mezi sebou, lze však získat informace, které není možné zjistit měřením. Jedná se především o místa, v kterých jsou dané ionty vytvářeny při studovaných výbojových podmínkách.

5.2 Rozložení normované objemové hustoty ionizace atomů

Tato část se věnuje prostorovému rozložení objemové hustoty ionizace normované pomocí maximální hodnoty této hustoty v prostoru a vzájemným podílem



Obrázek 5.1: Prostorové rozložení objemové hustoty ionizace Ar při magnetronovém výboji v centrální pozici roviny řezu a odpovídající $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu. Jednotka objemové hustoty ionizace je zde cm^{-3} .



Obrázek 5.2: Prostorové rozložení objemové hustoty ionizace Ti při magnetronovém výboji v centrální pozici roviny řezu a odpovídající $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu. Jednotka objemové hustoty ionizace je zde cm^{-3} .

hustot ionizace atomů Ti a Ar. Simulace byly provedeny pro tři různé hodnoty výbojového proudu: nízký výbojový proud $I_d = 5$ A, střední výbojový proud $I_d = 20$ A a vysoký výbojový proud $I_d = 50$ A.

5.2.1 Nízký výbojový proud ($I_d = 5$ A)

Na Obrázku 5.3 jsou zobrazeny hodnoty objemové hustoty ionizace atomů Ar, resp. Ti normované pomocí jejich maximálních hodnot ionizace v prostoru.

Rozdíl ve tvaru objemové hustoty ionizace je dán rozložením atomů v komoře. Atomy Ti jsou pro tento proud rozloženy převážně v prostoru u terče, kde dochází k většině ionizace. Atomy Ar jsou rozloženy téměř rovnoměrně v prostoru, a tak dochází k jeho ionizaci i dále od terče. Maximální hodnoty objemové hustoty ionizace pro centrální řez ($y = 0$ cm) jsou umístěny ve vzdálenosti 3 cm od osy výboje a 0,5 cm od povrchu terče pro oba druhy atomů.

Poměr hustot ionizace atomů Ti a Ar je uveden na Obrázku 5.4. Pro $I_d = 5$ A hodnota hustoty ionizace Ti nikde nepřesáhne hodnoty ionizace Ar. Pozice maxima hustoty ionizace pro centrální řez je ve vzdálenosti 3 cm od osy výboje a 1 cm od povrchu terče. Je tudíž stejná jako pro maxima hustot ionizací obou druhů atomů. Maximum poměru hustot ionizace atomů Ti a Ar dosahuje pro tento výbojový proud pouze 0,04.

5.2.2 Střední výbojový proud ($I_d = 20$ A)

Obdobně jako u nízkého výbojového proudu. Máme na Obrázku 5.5 jsou zobrazeny hodnoty objemové hustoty ionizace atomů Ar, resp. Ti normované pomocí jejich maximálních hodnot ionizace v prostoru.

Rozdíl ve tvaru objemové hustoty ionizace je dán rozložením atomů v komoře. Atomy Ti jsou pro tento proud už rozprašovány dále od terče a jsou i více zastoupeny před terčem než v předešlém případě. Atomy Ar je stále rozloženy více rovnoměrně v prostoru a tak dochází k jeho ionizaci i dále od terče.

Jako v předešlém případě poměr hustot ionizace atomů Ti a Ar je uveden na Obrázku 5.4, zde pro $I_d = 20$ A hodnota ionizace Ti nikde nepřesáhne hodnoty hustoty ionizace Ar. Maximální hodnoty objemové hustoty ionizace pro centrální řez ($y = 0$ cm) jsou umístěny ve vzdálenosti 3 cm od osy výboje a 0,5 cm od povrchu terče pro oba druhy atomů. Maximum poměru hustot ionizace atomů Ti a Ar dosahuje pro tento výbojový proud 0,25.

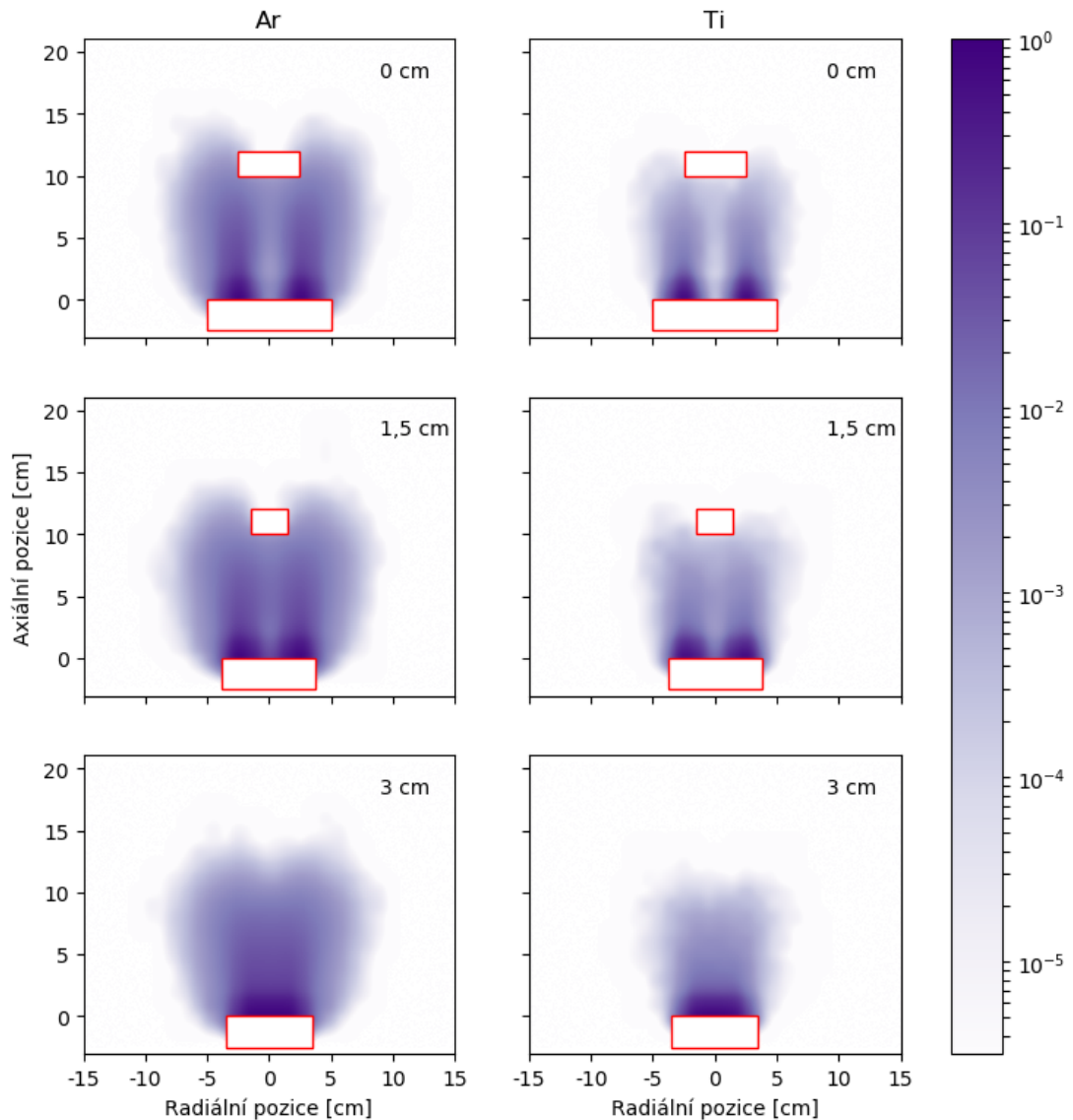
5.2.3 Vysoký výbojový proud ($I_d = 50$ A)

Objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti pro výbojový proud $I_d = 50$ A normované pomocí jejich maximálních hodnot ionizace v prostoru máme zobrazené na Obrázku 5.7.

Rozdíl ve tvaru objemové hustoty ionizace už není tak patrný. Atomy Ti vytlačily atomy Ar dále od terče a dostávají se až za substrát. Maximální hodnoty objemové hustoty ionizace pro centrální řez ($y = 0$ cm) jsou umístěny ve vzdálenosti 3 cm od osy výboje a 0,5 cm od povrchu terče pro oba druhy atomů.

Na rozdíl od předešlých případů hustot ionizace Ti přesáhne hustotu ionizace Ar v hodnotách jejich maxima. Maximum poměru hustot ionizace Ti a Ar dosahuje pro tento výbojový proud 1,09. Viditelné na Obrázku 5.8.

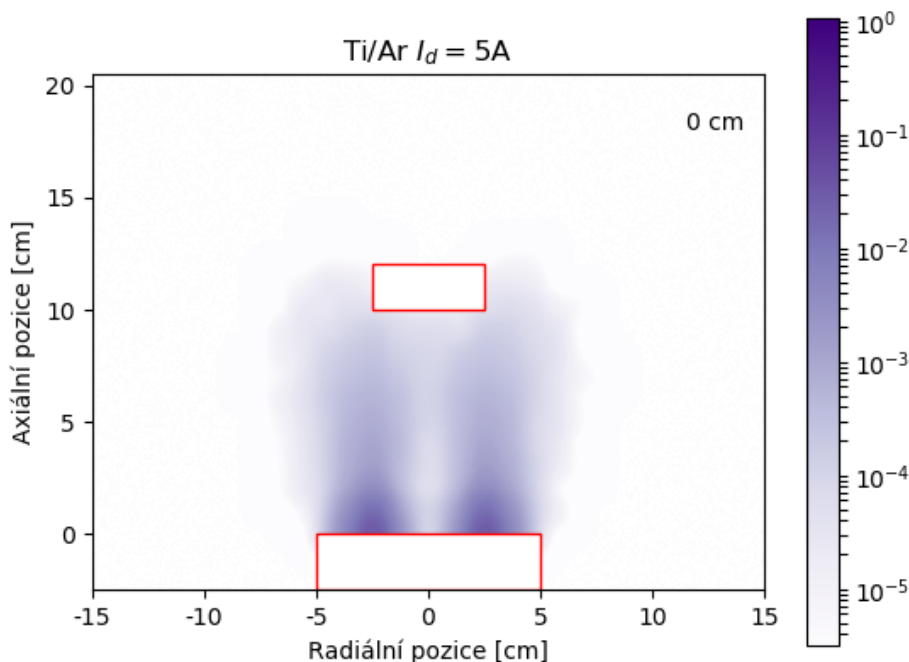
Ar/Ar_{max} a Ti/Ti_{max} $I_d = 5A$



Obrázek 5.3: Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 5$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.

5.3 Trendy v rozložení hustoty ionizace v závislosti na hodnotě výbojového proudu

Grafické znázornění rozdílu mezi objemovou hustotou ionizace atomů Ar a Ti v centrálním řezu ($y = 0$ cm) pro různé výbojové proudy ($I_d = 5$ A, 20 A a 50 A) je uvedeno na Obrázku 5.9. Především je vidět změna tvaru a rozsahu ionizace na základě měnícího se výbojového proudu.



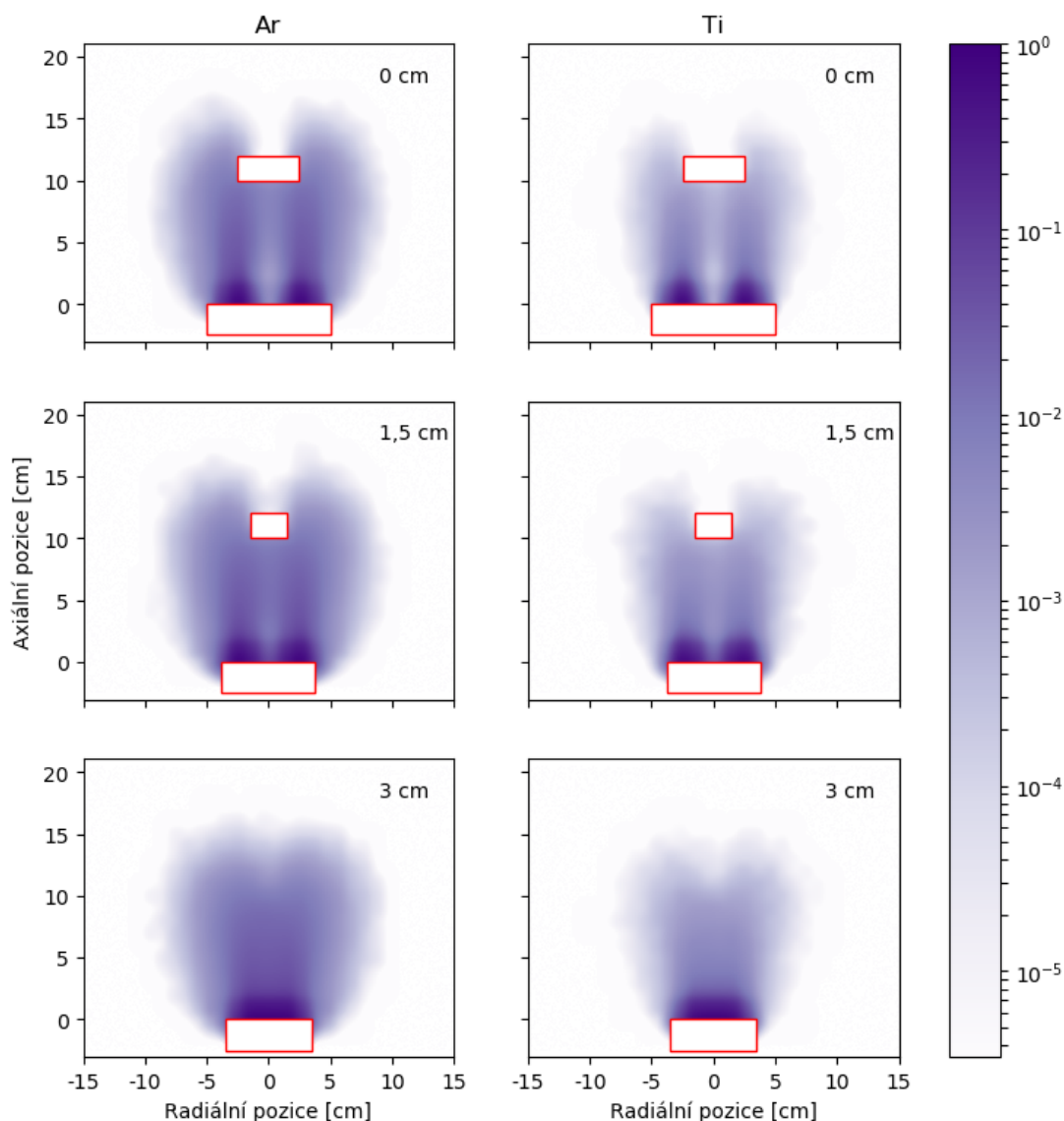
Obrázek 5.4: Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 5$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.

S rostoucím výbojovým proudem dochází k většímu poklesu lokální hustoty atomů Ar v simulační oblasti. Lokální hustota atomů Ti však v simulační oblasti roste, jak se zvětšuje rozprašovací rychlost terče [7]. Tento jev vysvětluje změnu objemové hustoty ionizace atomů Ti, která s rostoucím výbojovým proudem zasahuje do stále větších vzdáleností od terče. Pro výbojový proud $I_d = 50$ A dochází dokonce k ionizaci i za pozicí substrátu ve vzdálenosti 10 cm od terče. Zároveň s rostoucím výbojovým proudem se oblast ionizace atomů Ti rozšiřuje směrem ke stěnám simulačního prostoru. Prodlužování a rozšiřování oblasti ionizace lze pozorovat i u atomů Ar, protože jsou pro větší proudy vytlačovány směrem od terče a do stran simulační oblasti. S rostoucím výbojovým proudem též dochází k postupné homogenizaci oblasti ionizace ve větších vzdálenostech od terče, a to především pro atomy Ti.

Největší hodnoty však objemová hustota ionizace nabývá u terče v oblasti toroidu nad erozní zónou. Z odečtu bylo zjištěno, že maximum objemové hustoty ionizace se pro centrální řez ($y = 0$ cm) nachází na souřadnicích $x = \pm 3$ cm a $z = 0,5$ cm pro oba druhy atomů. V rámci přesnosti dané rozlišením prostorové sítě v simulaci (krychlové buňky o hraně 1 cm) nebyla zjištěna změna této pozice jak mezi druhy atomů, tak ani pro rozdílné výbojové proudy. Na Obrázku 5.9 je též patrná oblast zvýšené difuze sekundárních elektronů směrem od terče vyvolaná postupnými ionizačními srážkami těchto elektronů s atomy Ti a Ar.

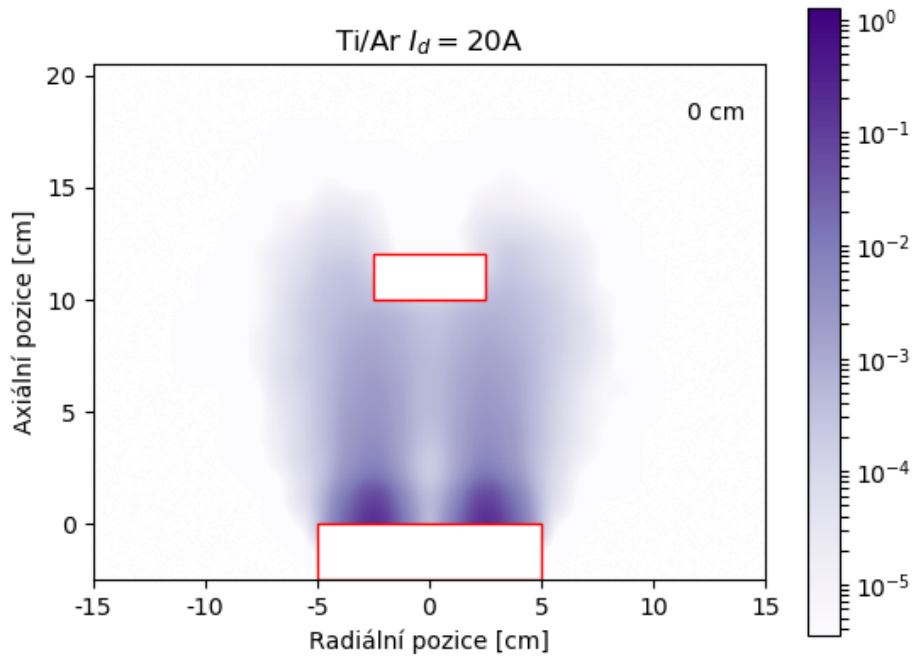
Z předchozích rozborů pro jednotlivé výbojové proudy vyplývá, že s rostoucím výbojovým proudem roste i poměr objemové hustoty ionizace atomů Ti k atomům Ar, a to z 0,04 pro $I_d = 5$ A, přes 0,25 pro $I_d = 20$ A až na 1,09 pro $I_d = 50$ A. V reálném výboji však tento poměr bude výrazně větší v důsledku ionizace

Ar/Ar_{max} a Ti/Ti_{max} $I_d = 20A$



Obrázek 5.5: Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 20$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.

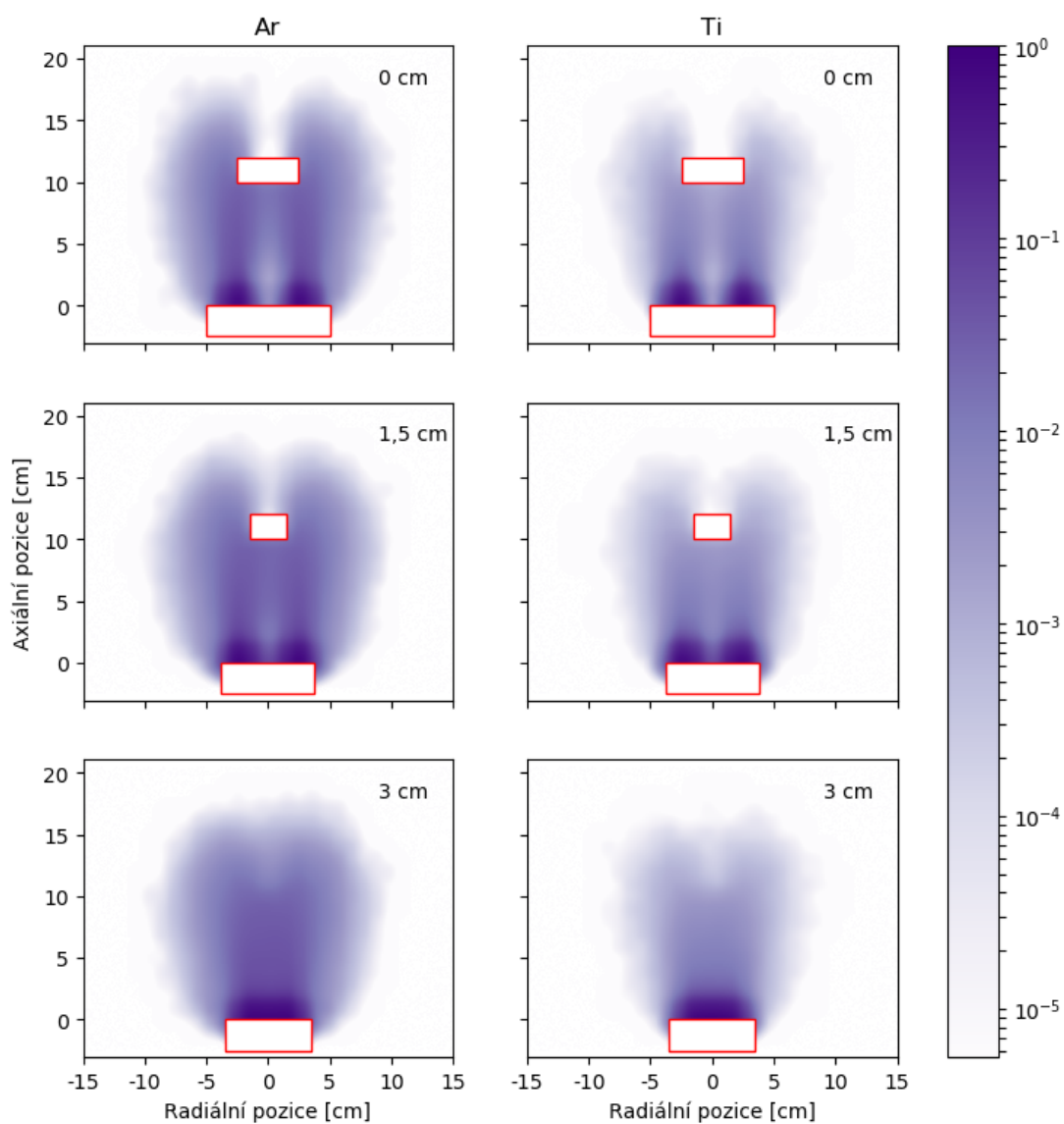
atomů Ti i primárními elektrony vzniklými během předchozích ionizačních srážek a urychlenými elektrickým polem výboje. Účinné průřezy ionizací atomů Ar a Ti (viz Obrázek 4.5) totiž při vysokých energiích, které mají sekundární elektrony po urychlení v přielektrodové oblasti u terče, upřednostňují ionizaci atomů Ar oproti atomům Ti. Primární elektrony však budou mít výrazně nižší energie, tudíž budou spíše ionizovat atomy Ti (viz více než dvojnásobná hodnota účinného průřezu ionizace Ti oproti Ar v oblasti pod energií 200 eV). Simulace vzniku a



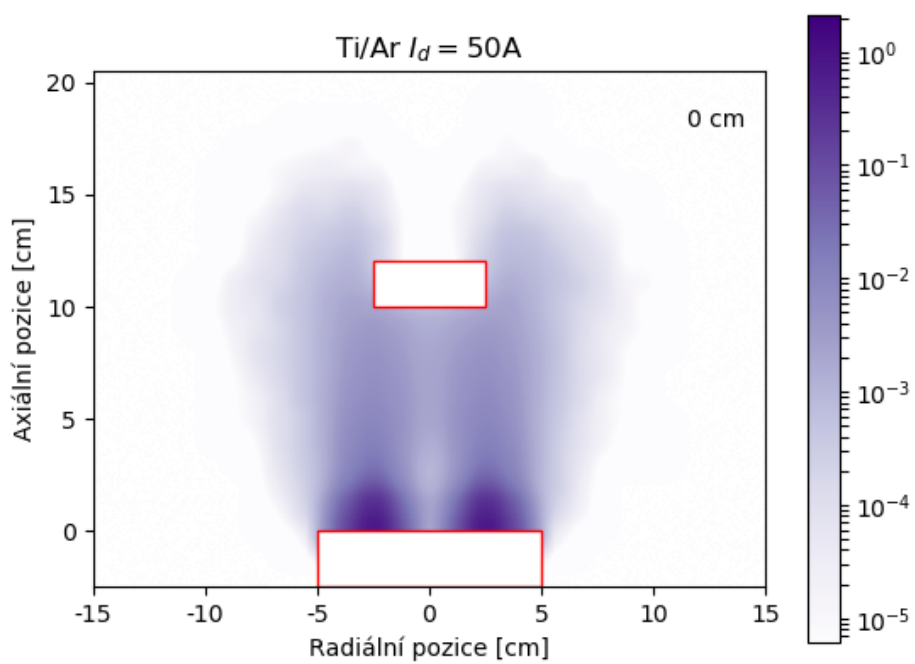
Obrázek 5.6: Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 20$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.

chování primárních elektronů však přesahuje cíle této práce.

Ar/Ar_{max} a Ti/Ti_{max} $I_d = 50A$

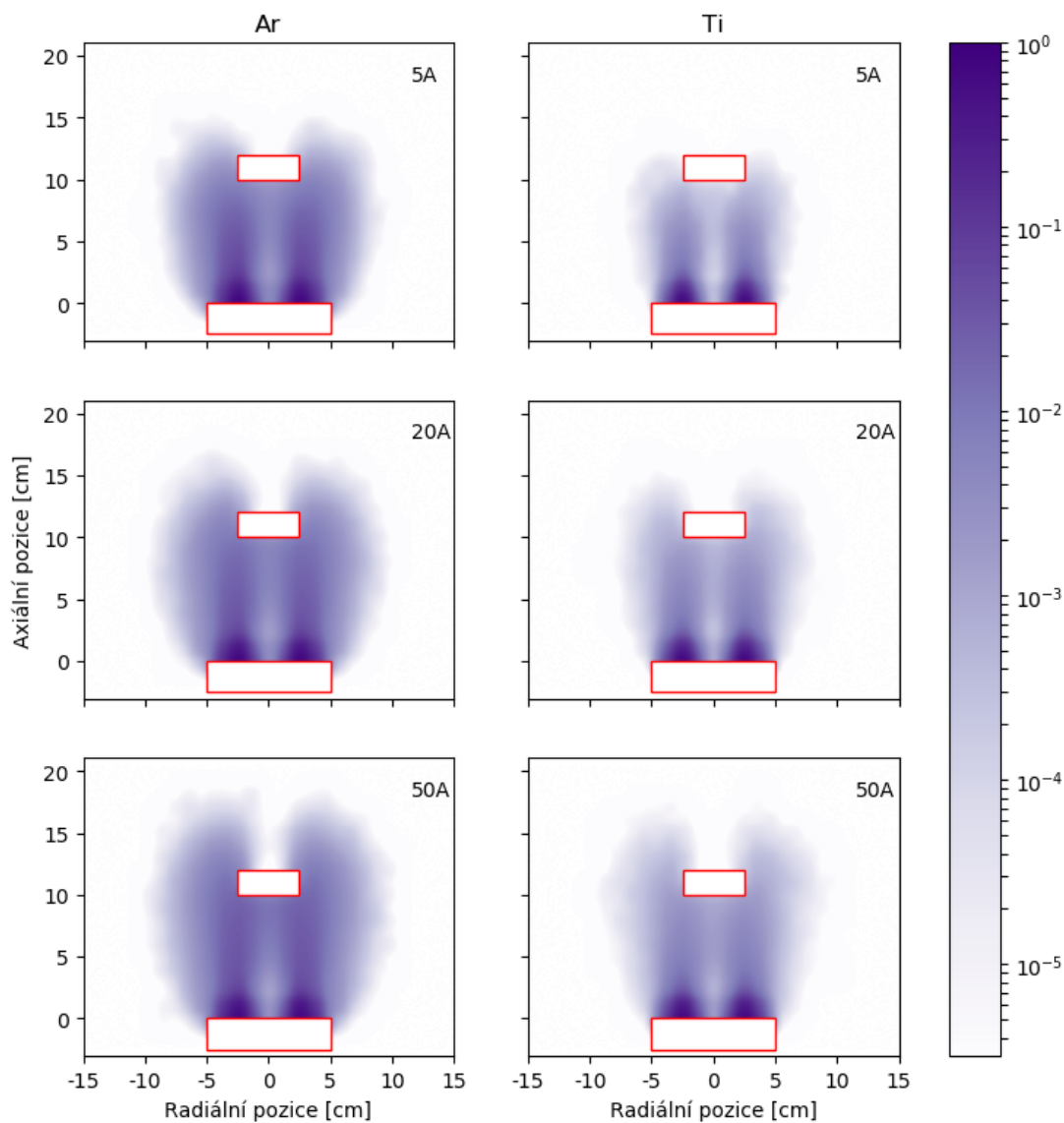


Obrázek 5.7: Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 50$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.



Obrázek 5.8: Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.

Ar/Ar_{max} a Ti/Ar_{max} pro centrální řez



Obrázek 5.9: Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) pro různé hodnoty výbojového proudu ($I_d = 5$ A, 20 A a 50 A). Objemové hustoty ionizace atomů Ti a Ar byly poděleny maximem objemové hustoty ionizace atomů Ar z celého simulačního prostoru. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.

Kapitola 6

Závěr

Prvním úkolem této bakalářské práce bylo prostudovat současnou literaturu o magnetronovém naprašování, a to především o pulzním vysokovýkonovém magnetronovém naprašování, dále nastudovat způsoby počítačové simulace plazmatu s důrazem na metodu particle-in-cell, ze které jsem vycházel pro tvorbu vlastního simulačního programu.

Dalším úkolem bylo vytvořit vlastní simulační počítačový program na sledování ionizací vydaných sekundárními elektrony v objemu plazmatu při pulzním vysokovýkonovém magnetronovém výboji ve vícesložkové směsi plynů. Tento program jsem vytvořil v jazyce Fortran. Program implementuje Leapfrog a Borisovu metodu pro pohyb elektronů ve výboji, který je dán Lorentzovou pohybovou rovnicí, a Monte Carlo kolizní metodu na výpočet ionizačních srážek upravenou pro srážky elektronů s různými druhy atomů.

Hlavním úkolem bylo provést simulaci pomocí takto vytvořeného počítačového programu a sledovat ionizaci atomů pracovního plynu (argonu) a rozprášeného kovu (titanu) sekundárními elektrony. Byly provedeny tři simulace na základě rozdílného výbojového proudu (konkrétně $I_d = 5 \text{ A}$, 20 A a 50 A), při kterých byly zkoumány ionizační srážky s atomy Ar nebo Ti přesným počtem simulovaných sekundárních elektronů (5×10^5). Výpisem programu byla objemová hustota ionizace pro oba plyny v podobě tabulky počtu ionizačních srážek na konkrétní cm^3 simulační oblasti.

Výsledky provedených simulací ukazují, že s rostoucím výbojovým proudem se zvětšuje oblast ionizace atomů Ti sekundárními elektrony jak směrem od terče, tak i směrem do stran. To je způsobeno jednak zvětšující se rozprašovací rychlostí terče, tak i poklesem lokální koncentrace atomů Ar v blízkosti terče a v ose výboje. S výbojovým proudem zároveň prudce vzrůstá poměr objemové hustoty ionizace atomů Ti vůči atomům Ar a pro výbojový proud $I_d = 50 \text{ A}$ je v blízkosti terče více ionizačních srážek sekundárních elektronů s atomy Ti než s atomy Ar. V rámci přesnosti simulační sítě (krychlové buňky o hraně 1 cm) nebylo zjištěno, že by pozice maxima objemové hustoty ionizace sekundárními elektrony (kružnice o poloměru cca. 3 cm paralelní s plochou terče a se středem ve vzdálenosti cca. $0,5 \text{ cm}$ od terče na ose výboje) byla závislá na druhu studovaných atomů (Ar a Ti) či velikosti výbojového proudu.

Literatura

- [1] ALAMI, J., BOLZ, S. a SARAKINOS, K. (2009). High power pulsed magnetron sputtering: Fundamentals and applications. *Journal of Alloys and Compounds*, **483**(1-2), 530–534. doi: 10.1016/j.jallcom.2008.08.104.
- [2] BARTLETT, P. L. a STELBOVICS, A. T. (2004). Electron-impact ionization cross sections for elements $z=1$ to $z=54$. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **86**(2), 235 – 265. ISSN 0092-640X. doi: <https://doi.org/10.1016/j.adt.2003.11.006>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X03000858>.
- [3] BIAGI, S. Fortran program, magboltz, versions 8.9 and after. URL www.lxcat.net/Biagi.
- [4] BIRDSALL, C. K. a LANGDON, A. B. (1985). *Plasma physics via computer simulation*. McGraw Hill.
- [5] BRIEDA, L. (2011). Leapfrog particle push (velocity integration). URL <https://www.particleincell.com/2011/velocity-integration/>.
- [6] BRIEDA, L. (2011). Particle push in magnetic field (boris method). URL <https://www.particleincell.com/2011/vxb-rotation/>.
- [7] BĚLOHOUBEK, M. (2018). Simulace transportu rozprášených atomů v magnetronových výbojích.
- [8] CHRISTIE, D. J. (2005). Target material pathways model for high power pulsed magnetron sputtering. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, **23**(2), 330–335. doi: 10.1116/1.1865133. URL <https://doi.org/10.1116/1.1865133>.
- [9] KADLEC, S. (2007). Simulation of neutral particle flow during high power magnetron impulse. *Plasma Processes and Polymers*, **4**(S1). doi: 10.1002/ppap.200731101.
- [10] KELLY, P. a ARNELL, R. (2000). Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications. *Vacuum*, **56**(3), 159–172. doi: 10.1016/s0042-207x(99)00189-x.
- [11] KIM, H. C., IZA, F., YANG, S. S., RADMILOVIĆ-RADJENović, M. a LEE, J. K. (2005). Particle and fluid simulations of low-temperature plasma discharges: benchmarks and kinetic effects. *Journal of Physics D: Applied Physics*, **38**(19). doi: 10.1088/0022-3727/38/19/r01.

- [12] LIEBERMAN, M. A. a LICHTENBERG, A. J. (2005). *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing, 2nd Edition*. John Wiley Sons.
- [13] MEEKER, D. (2018). Finite element method magnetics. URL <http://www.femm.info/wiki/HomePage>.
- [14] SHERIDAN, T. E., GOECKNER, M. J. a GOREE, J. (1990). Model of energetic electron transport in magnetron discharges. *Journal of Vacuum Science Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, **8**(1), 30–37. doi: 10.1116/1.577093.
- [15] VAHEDI, V. a SURENDRA, M. (1995). A monte carlo collision model for the particle-in-cell method: applications to argon and oxygen discharges. *Computer Physics Communications*, **87**(1-2), 179–198. doi: 10.1016/0010-4655(94)00171-w.
- [16] VERBONCOEUR, J. P. (2005). Particle simulation of plasmas: review and advances. *Plasma Physics and Controlled Fusion*, **47**(5A). doi: 10.1088/0741-3335/47/5a/017.
- [17] VLČEK, J. a BURCALOVÁ, K. (2010). A phenomenological equilibrium model applicable to high-power pulsed magnetron sputtering. *Plasma Sources Science and Technology*, **19**(6), 065010. URL <http://stacks.iop.org/0963-0252/19/i=6/a=065010>.

Seznam obrázků

2.1	Schématické zobrazení vyváženého a nevyváženého magnetronu. Převzato z [10].	4
2.2	Schéma komory s terčem a substrátem použité při simulaci zřed'ování Ar plynu. Znázorněna hustota Ti po uběhnutí 50 μ s po pulzu. Převzato z [9].	6
2.3	Časový vývoj hustoty argonového plynu. Převzato z [9].	6
2.4	Schéma parametrického modelu. G_t^+ a M_t^+ jsou celkové toky iontů materiálu terče a pracovního plynu na terč. S_{mg} a S_{mm} jsou výtěžky rozprašování terče při dopadu iontů pracovního plynu a materiálu terče. M_{tot} je celkový tok atomů z terče, parametr β je podíl atomů terče, které jsou ionizovány, σ je podíl ionizovaných atomů proudících zpět na terč, γ je podíl atomů terče, které jsou do- datečně ionizovány v objemu plazmatu, ξ_n a ξ_i jsou transportní parametry neutrálů, respektive iontů. Převzato z [17].	9
2.5	Diagram PIC schématu. Převzato z [11].	10
4.1	Schéma leapfrog metody. Převzato z [16].	13
4.2	Reprezentace rotace z rovnice 4.8. Převzato z [4].	13
4.3	Reprezentace rotace od \mathbf{v}^- k \mathbf{v}^+ . Převzato z [4].	14
4.4	Trajektorie sekundárního elektronu. Zde (a) a (b) je bezkolizní model, kde je elektron uvězněn na vždy. Kolizní model je zobrazen na (c) a (d). Převzato z [14].	16
4.5	Účinný průřez pro ionizaci argonu (červeně) a titanu (modře) v závislosti na energii dopadajícího elektronu.	18
4.6	Tvar a rozměry simulační oblasti v rovině xz	19
4.7	Zobrazení výsledné velikosti magnetického pole a tvaru jeho siločar tak, jak byly vypočteny a zobrazeny programem FEMM. Pro simulaci pohybu elektronů bylo využito pouze hodnot radiální a axiální magnetické indukce Br a Bz nad terčem magnetronu, a to v rozsahu $r \in \langle 0, 100 \text{ mm} \rangle$ a $z \in \langle 0, 100 \text{ mm} \rangle$, přičemž bod o souřadnicích (0, 0) odpovídá průsečíku horní plochy terče a osy symetrie. V ostatních místech simulačního prostoru byla velikost složek magnetického pole pokládána za nulovou. Na obrázku je vyznačena pozice terče.	20

4.8	Schéma rozdělení elektrického potenciálu v programu. Zde $s(r)$ určuje prostor sheathu, kde je potenciál aproximován Child-Langmuirovou rovnicí, s_{min} je minimální tloušťka sheathu, $z_{max}(r) - s(r)$ určuje prostor presheathu, kde je potenciál lineárně interpolován mezi hodnotami potenciálu na hranici sheathu a 0V, f_{r0} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = 0$ a f_{r1} je faktor násobení poloměru terče udávající první nulový bod potenciálu pro $z = z_{max}(r_t)$ a r_t je poloměr terče.	22
4.9	Rozložení objemové hustoty atomů Ar a Ti pro centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojový proud $I_d = 50$ A. Data jsou brána z [7] a interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazená pozice terče a substrátu.	24
5.1	Prostorové rozložení objemové hustoty ionizace Ar při magnetronovém výboji v centrální pozici roviny řezu a odpovídající $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu. Jednotka objemové hustoty ionizace je zde cm^{-3}	26
5.2	Prostorové rozložení objemové hustoty ionizace Ti při magnetronovém výboji v centrální pozici roviny řezu a odpovídající $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu. Jednotka objemové hustoty ionizace je zde cm^{-3}	26
5.3	Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 5$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.	28
5.4	Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 5$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.	29
5.5	Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 20$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.	30

5.6	Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 20$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.	31
5.7	Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a v řezech ($y = 1,5$ cm) a ($y = 3$ cm) pro $I_d = 50$ A. Relativní objemová hustota ionizace atomů byla vypočtena jako podíl objemové hustoty ionizace v daném místě a její maximální hodnoty v simulačním prostoru pro stejný druh atomů. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.	32
5.8	Prostorové rozložení poměru objemových hustot ionizace atomů Ti k atomům Ar v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) a výbojovém proudu $I_d = 50$ A. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku je zobrazena pozice terče a substrátu.	33
5.9	Prostorové rozložení relativní objemové hustoty ionizace atomů Ar a Ti v centrální pozici roviny řezu ($y = 0$ cm) pro různé hodnoty výbojového proudu ($I_d = 5$ A, 20 A a 50 A). Objemové hustoty ionizace atomů Ti a Ar byly poděleny maximem objemové hustoty ionizace atomů Ar z celého simulačního prostoru. Data jsou interpolována pomocí Gaussovské interpolace. V obrázku jsou zobrazené pozice terče a substrátu.	34