

## Simulace napouštění reaktivního plynu do vakuové komory

Milada Krejčová<sup>1</sup>, Tomáš Kozák<sup>2</sup>

### 1 Úvod

Reaktivní magnetronové naprašování je jedna z možností přípravy tenkých vrstev, které vznikají na substrátu reakcí atomů kovu rozprášených z terče s reaktivním plynem (např. kyslíkem) ve vakuové komoře (viz schéma na obrázku 1). Pro vysokovýkonové pulzní reaktivní naprašování byla v nedávné době vyvinuta metoda efektivnějšího řízení procesu s využitím napouštění reaktivního plynu do oblasti mezi terčem a substrátem, viz Vlček, et al. (2013). Pro vytvoření stechiometrické sloučeniny na substrátu je potřeba správný poměr toku atomů rozprášených z terče a atomů nebo molekul reaktivního plynu přítomných v oblasti plazmového výboje.

Cílem této práce je vytvořit počítačový model výše zmíněného napouštění reaktivního plynu, který umožní předpovědět rozložení reaktivního plynu v komoře a jeho tok na povrch terče a substrátu v závislosti na zvoleném průtoku.

### 2 Matematický model a metoda řešení

Při reaktivním magnetronovém naprašování se používají tlaky řádově jednotky Pa, tzn. Knudsenovo číslo  $Kn = \lambda/l > 1$ , kde  $\lambda$  je střední volná dráha a  $l$  je charakteristický rozměr systému. Proto je nutno považovat proudění plynu za molekulární.

Pro popis molekulárního proudění se používá Boltzmannova rovnice, která má tvar

$$\frac{\partial(n_S f_S)}{\partial t} + \vec{C} \cdot \nabla_r(n_S f_S) + \frac{\vec{F}}{m} n_S \nabla_C f_S = \left[ \frac{\delta(n_S f_S)}{\delta t} \right]_{sr}, \quad (1)$$

kde  $n_S$  je částicová hustota,  $f_S$  je rozdělovací funkce rychlosti částic. Člen na pravé straně vyjadřuje změnu rozdělovací funkce počtu částic v důsledku srážek.

Rovnici lze numericky řešit metodou Direct Simulation Monte Carlo (DSMC), popsaná v Bird (1994), která aproximuje rozdělovací funkci pomocí  $N$  virtuálních částic. Úloha byla řešena pomocí modulu dsmcFoam implementovaného v programovém balíku OpenFOAM.

### 3 Model napouštění vakuové komory a hlavní výsledky

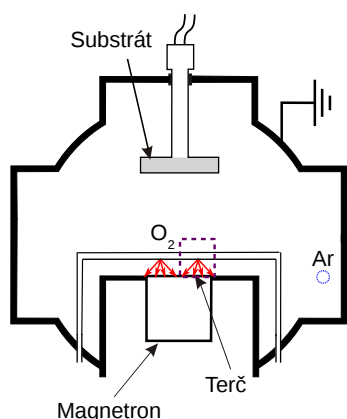
Pro simulaci byla vytvořena výpočetní geometrie v programu SolidWorks a výpočetní síť v programu Gmsh. Pro zjednodušení byl celkový prostor komory zredukován na válec se základnami o průměru 10 cm, symbolizujícími povrch terče a substrátu, viz obr. 1. Celková výška válce, tj. vzdálenost terče a substrátu, byla 10 cm. Plášť válce byl tvořen okrajovou podmínkou s pevným parciálním tlakem argonu 2 Pa. Reaktivní plyn je přiváděn trubičkou o vnitřním

<sup>1</sup> studentka navazujícího studijního programu Aplikované vědy a informatika, obor Aplikovaná fyzika a fyzikální inženýrství, specializace Fyzikálně-matematické modelování, e-mail: [mkrejcov@students.zcu.cz](mailto:mkrejcov@students.zcu.cz)

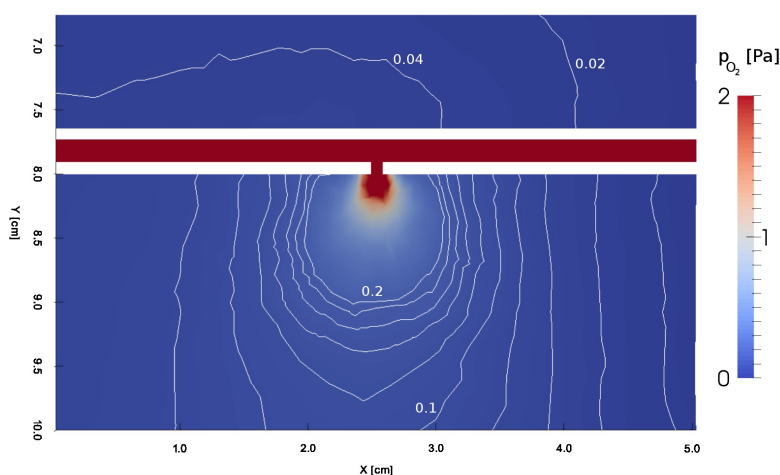
<sup>2</sup> NTIS - Nové technologie pro informační společnost, VP4, Fakulta aplikovaných věd, Západočeská univerzita v Plzni, e-mail: [kozakt@ntis.zcu.cz](mailto:kozakt@ntis.zcu.cz)

průměru 2 mm umístěnou 2 cm od terče s tryskami orientovanými směrem k terči. Na vstupu trubičky byl tlak kyslíku nastaven tak, abychom dosáhli požadovaného průtoku napouštěcí trubičkou (10 až 50 sccm). Pro urychlení výpočtu se využilo symetrie úlohy vzhledem k rovině kolmé na napouštěcí trubičku.

Obr. 2 ukazuje rozložení parciálního tlaku kyslíku v komoře při průtoku kyslíku napouštěcí trubičkou 10 sccm. Kvůli přehlednosti je na obrázku omezena stupnice do 2 Pa, a tudíž není zobrazeno rozložení tlaku v trubičce (větší než 2 Pa). Orientace trysky směrem k terči vede k výrazně vyššímu parciálnímu tlaku kyslíku u terče (0,1 Pa) oproti oblasti u substrátu (méně než 0,02 Pa). Ke zvýšenému toku reaktivního plynu na terč také přispívá vyšší driftová rychlost ve směru k terči daná orientací trysky ( $280 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  u trysky, avšak se vzrůstající vzdáleností rychle klesá). Zajímavým jevem je malý, přesto pozorovatelný zpětný tok argonu do napouštěcí trubičky vlivem difuze.



**Obrázek 1:** Schéma vakuové komory s vyznačenou oblastí zobrazenou v detailu na obr. 2.



**Obrázek 2:** Parciální tlak kyslíku po dosažení ustáleného stavu při průtoku kyslíku 10 sccm (vybraný výřez).

## 4 Závěr

Byla vytvořena počítačová simulace napouštění reaktivního plynu do vakuové komory metodou DSMC. Bylo vypočteno rozložení parciálního tlaku kyslíku v komoře v závislosti na průtoku kyslíku napouštěcí trubičkou. Výsledky pro zkoumanou orientaci napouštění ukazují lokální nárůst parciálního tlaku kyslíku u terče, což povede ke zvýšení rychlosti chemisorpce kyslíku na jeho povrchu.

## Literatura

- Vlček, J., et al. 2013. Process stabilization and a significant enhancement of the deposition rate in reactive high-power impulse magnetron sputtering of  $\text{ZrO}_2$  and  $\text{Ta}_2\text{O}_5$  films. *Surface & Coatings Technology*. Vol. 236 pp 550-556.
- Bird, G. A., 1994. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Clarendon press, Oxford.