

МЕТОД РАСЧЕТА ПЛОТНОСТИ КОНДЕНСАТОВ, ОСАЖДАЕМЫХ ИЗ ПАРА, ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ТЕМПЕРАТУРЫ ПОДЛОЖКИ И ПОТОКА АТОМОВ МЕТАЛЛА

С.Н. Слепцов, А.С. Бакай, А.И. Жуков, А.Н. Слепцов
ННЦ "ХФТИ"

Известно [1-3], что структура покрытий, полученных методом вакуумного осаждения пара металла, в значительной степени определяется температурой подложки T_s и скоростью осаждения V (или плотностью потока J_n). Для управления процессом формирования структуры конденсата, а тем самым и плотностью ρ_f необходимо знать, как она зависит от T_s и V . Как правило, такие зависимости устанавливаются экспериментальным путем при решении той или иной технологической задачи. Однако проведение таких экспериментов является дорогостоящей, трудоемкой и длительной во времени процедурой. Именно по этим причинам в литературе практически отсутствуют данные $\rho_f(V, T_s)$ для широкого спектра металлов. Для того, чтобы обойти объективные трудности при решении поставленной задачи, в настоящей работе предложен полуэмпирический метод оценки значений ρ_f при изменении V и T_s .

Как показано в [5], макроструктура металлических покрытий может быть условно разбита на три структурные зоны в зависимости от отношения T_s/T_m , где T_m - температура точки плавления осаждаемого материала. Для конденсатов I-структурная зона лежит в температурном интервале $0 \leq T_s < T_1$, где $T_1 \cong 0,3T_m$ при скорости осаждения $\sim 10^2$ нм/с [5]. Структурная зона II имеет границы $T_1 \leq T_s < T_2$, где $T_2 \cong 0,45T_m$. Экспериментально установлено, что конденсаты, сформированные во II-зоне, а также на границе I и II структурных зон, являются плотными [4-6]. Также обнаружено, что при постоянной V прирост плотности пористой пленки, осаждаемой при $(0,4-0,5) \leq T_s/T_1 < 1$ составляет $\sim 50\%$ при повышении температуры подложки до значения $T \sim 0,3(T_1 - T_s)$ [3,4,6,9]. Учитывая выше сказанное, а также тот факт, что производная от плотности по температуре равна нулю на границе I-ой и II-ой структурных зон, т.е. при $T=T_1$, изменение плотности конденсата ρ_f при росте температуры подложки в пределах I-зоны можно описать зависимостью в виде полинома $P_3(T)$ третьей степени. Для нахождения коэффициентов полинома достаточно знать граничную температуру перехода между I-ой и II-ой зонами.

Температурная граница T_1 , как показано в [5], не является четко фиксированной и имеет ширину перехода ΔT . Более того, экспериментально обнаружено, что ширина температурного перехода, как и само значение T_1 , сильно зависит от скорости осаждения [1,4,5]. Также установлено, что увеличение плотности потока металлического пара вызывает рост ΔT и T_1 (см. рис. 1), причем зависимости этих величин от скорости роста пленки являются нелинейными функциями [6]. Для нахождения этих зависимостей можно воспользоваться результатами работы К.Н.Мюллер [7]. В указанной работе методом математического моделирования изучался рост плотных пленок при различных значениях угла падения атомов пара на подложку, скорости роста конденсата и температуры T_s . На основании результатов моделирования в работе предложена теоретическая модель роста плотноупакованных пленок. В рамках этой модели получена аналитическая зависимость, связывающая отношение T_1/T_m со скоростью роста конденсата:

$$\frac{T_1}{T_m} = 5 \left[\ln \left(\frac{\sqrt{3} \nu(T_1) a}{2VnN} \right) - \frac{20}{3} \right]^{-1}, \quad (1)$$

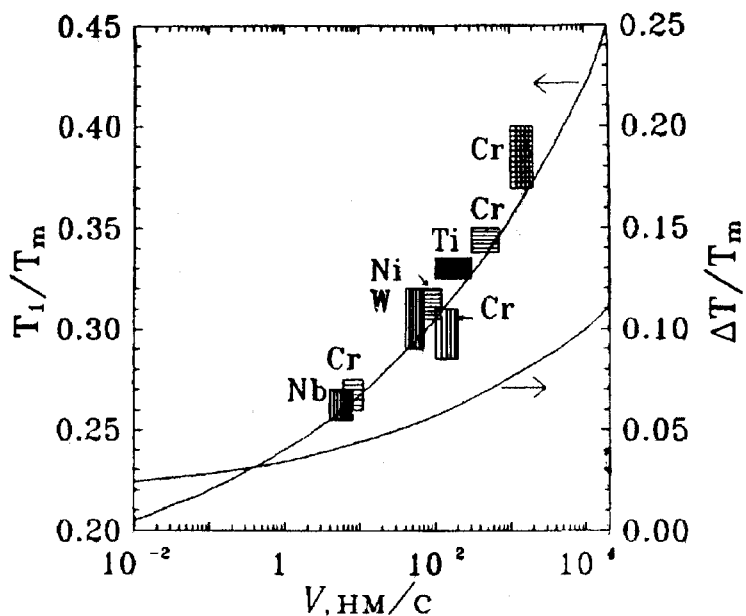


Рис. 1. Отношение температуры границы первой структурной зоны T_1 к температуре точки плавления осаждаемого материала T_m в зависимости от скорости роста V пленок Ti, Cr, Ni, Nb, W [3-6,8,9]. На правой стороне рисунка - отношение ширины температурной границы первой структурной зоны ΔT к T_m в зависимости от скорости V .

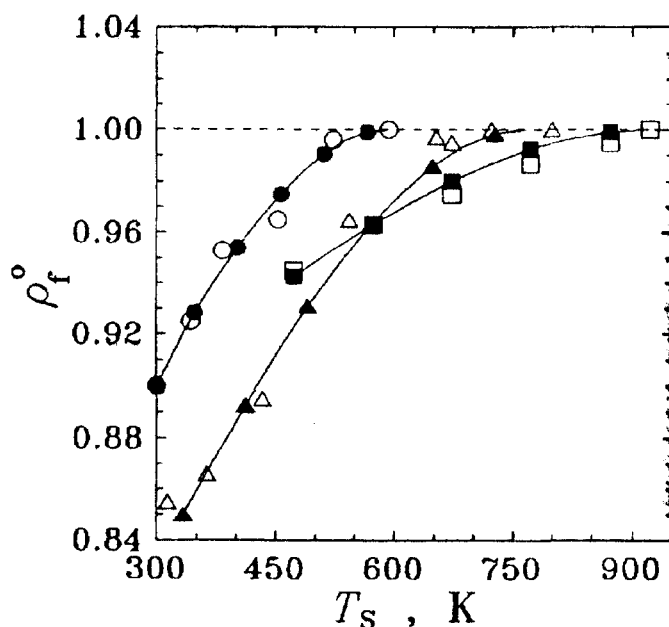


Рис. 2. Температурная зависимость плотности конденсатов, осажденных из металлического пара. Светлыми символами обозначены экспериментальные данные; темными символами - расчетные значения. \blacktriangle , \triangle -Nb пленки ($V \approx 5$ нм/с [8]); \bullet , \circ -Cr конденсаты ($V \approx 5,2$ нм/с [9]); \blacksquare , \square -Cr покрытия ($V \approx 10^3$ нм/с [6]).

где обозначения такие же, как и в [7]. Из выражения (1) видно, что для нахождения величины отношения T_1/T_m необходимо решить трансцендентное уравнение, так как частота перескока ν адатома из одного положения в другое на поверхности конденсата является функцией температуры T_1 . Зависимость ν от T_1 имеет вид $\nu = kT_1/h$, где k - постоянная Больцмана; h - постоянная Планка. Решая численно уравнение (1) для различных значений V , получим зависимость T_1/T_m от скорости роста пленки. Для того, чтобы облегчить процесс расчета величины T_1 , данные T_1/T_m , полученные при численном решении уравнения (1), аппроксимированы полиномом третьей степени:

$$T_1/T_m = 0.24 + \sqrt{\frac{5}{3}} \times \lg V \times [0.0233 + (0.0375 + 0.000417 \times \lg V) \times \lg V]. \quad (2)$$

Аналогичным способом получается и выражение для ширины температурной границы между I-ой и II-ой структурными зонами:

$$\Delta T/T_m = 0.0342 + \lg V \times [0.00767 + (0.00161 + 0.00015 \times \lg V) \times \lg V]. \quad (3)$$

Теоретические зависимости изменения T_1/T_m и $\Delta T/T_m$ от скорости роста конденсата представлены на рис. 1. Ошибка аппроксимации в обоих случаях не превышает 0,5%.

Таким образом, алгоритм расчета температурной зависимости плотности покрытия, осажденного из пара на подложку с температурой $T_s < T_1$, состоит из двух этапов. Первый шаг: для заданной скорости роста пленки V , используя выражения (2) и (3), находим T_1 и ΔT . Определяем верхнее значение температурной границы I-структурной зоны: $T_1^{I-II} = T_1 + \Delta T/2$. Второй шаг: используя экспериментальные данные ρ_f для температуры подложки T_s и расчетное значение T_1^{I-II} , находим коэффициенты интерполяционного полинома $P_3(T)$ и строим зависимость ρ_f от температуры в диапазоне $T_s < T < T_1$. В качестве примера на рис. 2 приведены расчетные данные плотности конденсатов Сг и Nb от температуры подложки для различных значений скорости роста V . Там же представлены и экспериментальные данные $\rho_f(T_s)$. Видно, что расчетные значения согласуются с экспериментальными данными.

В заключение необходимо отметить, что приведенный алгоритм расчета $\rho_f(V, T_s)$ дает лишь оценочные значения плотности, поскольку при его построении использованы эмпирические данные, полученные с различной экспериментальной погрешностью.

ЛИТЕРАТУРА

1. Мовчан Б.А., Демчишин А.В., Чурсанов Н.А. и др. Структура и свойства тугоплавких соединений, полученных электроннолучевым испарением//Пробл. спец. электрометаллургии (Материалы сов.-амер. симпозиума). -Киев: Наукова думка, 1979. -С. 131-158.
2. Палатник Л.С., Фукс М.Я., Косевич В.М. Механизм образования и субструктура конденсированных пленок. -М.: Наука, 1972. -319 с.
3. Палатник Л.С., Черемской П.Г., Фукс М.Я. Поры в пленках. -М.: Энергоиздат, 1982, -215 с.
4. Демчишин А.В., Мовчан Б.А. Структура и некоторые свойства толстых вакуумных конденсатов титана//Физ. и хим. обработки материалов. -1967, -№ 1, -С. 45-50.
5. Мовчан Б.А., Демчишин А.В. Исследование структуры и свойств толстых конденсатов никеля, титана, вольфрама, окиси алюминия//ФММ. -1969. -Т.26. -№ 4. -С. 653-660.
6. Мовчан Б.А., Ковальчук В.С., Статкевич Л. К. Структура и свойства вакуумных конденсатов хрома, применяемых в качестве защитных покрытий// Спецэлектрометаллургия. -1968. -№ 1. -С.77-84.

7. Muller K.-H. Dependence of thin-film microstructure on deposition rate by means of a computer simulation//J. Appl. Phys., 1985, V. 58, -№ 7, -P. 2573-2576.

8. Слепцов С.Н., Марченко И.Г., Булатова Л.В., Слепцов А.Н., Поляков Ю.И. Структурное состояние толстых конденсатов ниобия, осажденных из собственных атомно-ионных потоков//ВАНТ. Сер.: ФРП и РМ. -1993. -Вып. 1(60), -С. 62-69.

9. Булатова Л.В., Бакай А.С., Слепцов С.Н. и др. Основные тенденции формирования микро- и субструктуры металл и металл-углеродных покрытий, осаждаемых из ионно-плазменных потоков//В кн.: Материалы термоядерных реакторов (Труды I Всесоюзной конференции по радиационному воздействию на материалы термоядерных реакторов. Ленинград: 18-20 сентября 1990г.). -Ленинград: ЦНИИ КМ "Прометей", 1991. -Т.2, -С. 258-262.