

Emissionsverhalten von TiB_x Sputtertargets

Einfluss der Winkelverteilung & Gastsreueung auf die Ti/B Rate

Jörg Neidhardt

Christian Doppler Labor „Advanced Hard Coatings“

Christian Mitterer

Dep. Metallkunde & Werkstoffprüfung

Montanuniversität Leoben

Österreich



Physical Metallurgy & Materials Testing
? University of Leoben

Stanislav Mraz

Werkstoffchemie

Jochen M. Schneider

RWTH Aachen

Deutschland



MATERIALS CHEMISTRY

Eric Strub

Ionenstrahllabor

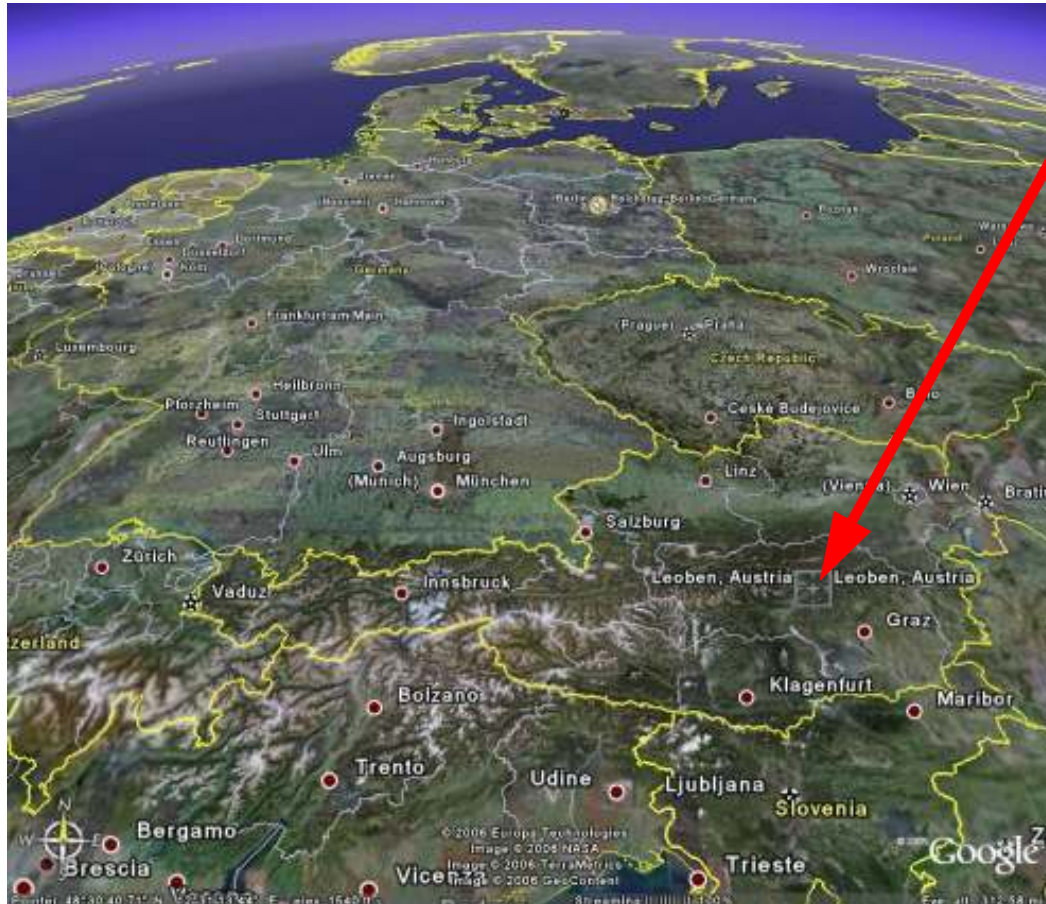
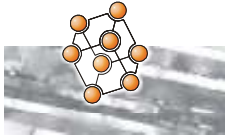
Wolfgang Bohne

Hahn-Meitner Institut Berlin

Deutschland



CD-Laboratory
Advanced
Hard Coatings



Thin Film Group

within
Dep. of Physical Metallurgy
University of Leoben

Head:

Christian Mitterer

Nanostructured Coatings:

Paul Mayrhofer

Christian Doppler Laboratory
„Advanced Hard Coatings“

æerlikon
balzers coating PLANSEE

Jörg Neidhardt

(„New Coating Materials“)

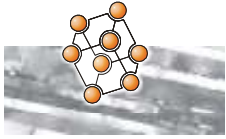
~ **20 people**

→ 6 Seniors & Post Docs

→ 12 PhD students

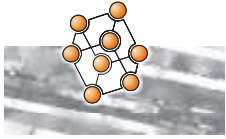


CD-Laboratory
Advanced
Hard Coatings



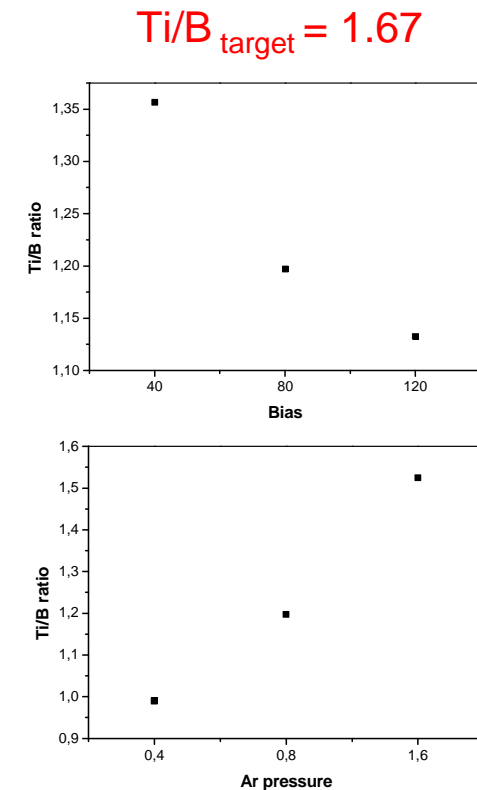
- **Motivation**
- **Beschichtungsexperimente**
- **Auswertung der ERDA Daten**
- **Simulation des Sputterprozesses**
- **Simulation des Gasphasentransports**
- **Massen-Energie Analysator Messungen**
- **Zusammenfassung**

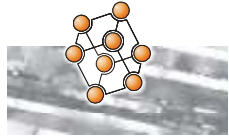




- signifikante Differenzen zwischen Target und Schicht Stöchiometrie (PVD)
 - besonders für Verbundtargets mit großem Δm
 - bisher keine befriedigende global Erklärung
- Ti_xB_y als Modellsystem
 - kein gasförmiger B Precursor \Rightarrow Mischtargets
 - historisch begründet (Mitterer, Mayrhofer ...)
- massive Ti-Defizienz beim „Sputtern“
 - variiert nach Lit.Quelle (5-25%)
 - keine Korrelation zu Randbedingungen
- B-Defizienz beim „Arcen“

⇓
Gasstreung, Resputtering, Emissionsverhalten
??





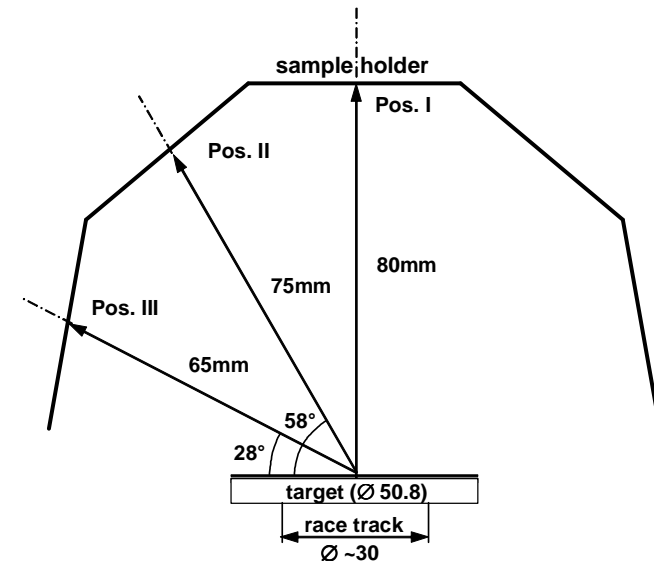
Modellschichten & Analyse

DC Sputtern von TiB_x Targets (RT, 100W)

- Ti/B Rate (TiB_x x = 0.6, 1, 2.2)
- Gasdruck (2, 1.5, 1, 0.5)
- Argon oder Stickstoff
- Abstand (20, 10, 8, 5cm)
- Winkel (30, 60, 90°)
- Bias (floating, 50, 100, 150, 200V)

Zusammensetzungsanalyse via ERDA

- 350 MeV Au (ISL/HMI Berlin)
- 23 Proben (50hr) ⇒ Winkel/Streuungsabhängigkeit



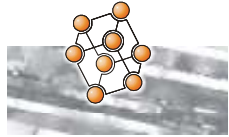
Simulation via Monte Carlo (SRIM2006)

- Winkel/Energieverteilung für 500eV Ar Beschuß von Ti bzw B
- Gastransport der emittierten Atome

Massen-Energie Analysator Messungen (Pfeifer PPM422)

- Thermalisierungsdruck der Ti bzw B Atome
- Korrelation zu Simulation



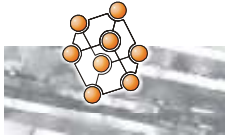


#	Ti/B	p (Pa)	gas	bias (V)	Dist. (cm)	angle (°)	d e15at/cm ²	Ti at%	B at%	H at%	C at%	N at%	O at%	Cl at%	Ar at%	Fe at%
1	5/3	2	Ar	Ufl	10	0	3730	24.5	15.2	9.95	1.4	1.8	46.6	-	0.02	0.8
2	5/3	1.5	Ar	Ufl	10	0	3545	28.45	18.5	10	0.61	2.58	39	0.04	0.02	0.8
3	5/3	1	Ar	Ufl	10	0	3100	34.9	24.5	15.63	0.5	4.3	19.37	-	-	0.8
4	5/3	0.5	Ar	Ufl	10	0	2430	44.27	34.9	8.9	0.44	4.3	6.77	0.14	-	0.28
5	5/3	2	Ar	-50	10	0	3250	26.7	18.5	10	0.66	1.8	42.12	0.05	-	0.17
6	5/3	2	Ar	-100	10	0	2520	33.96	24.8	8.8	0.21	5.3	26.2	0.08	0.33	0.32
7	5/3	2	Ar	-150	10	0	2110	39.6	28.4	10.03	0.56	2.8	17.16	0.03	1	0.42
8	5/3	2	Ar	-200	10	0	1350	39.6	27.4	9.33	0.66	2.3	18.8	0.01	1.7	0.6
9	5/3	2	Ar	Ufl	5	0	10500	35.1	26.1	15.7	0.23	4.24	18.08	-	-	0.55
10	5/3	2	Ar	Ufl	20	0	505	18.4	9	20	1.53	0.55	50.17	-	-	0.35
11	5/3	2	Ar	Ufl	8	0	4820	27.89	19	12.77	0.8	3.16	36	-	-	0.38
12	5/3	2	Ar	Ufl	8	30	5990	26.4	16.6	9.18	0.5	1.52	45.48	-	-	0.32
13	5/3	2	Ar	Ufl	8	60	5450	30.66	16.83	10.1	0.4	1.35	40.3	-	-	0.36
14	5/3	0.5	Ar	Ufl	8	0	1730	45.7	35.82	13.17	0.4	0.55	4.23	0.06	-	0.07
							1970	45.7	35.82	10.27	0.4	3.45	4.23	0.06	-	0.07
15	5/3	0.5	Ar	Ufl	8	30	2200	49.5	32.72	13	0.4	0.55	3.73	-	-	0.1
							1950	45.7	30.12	9.8	0.4	3.45	10.43	-	-	0.1
16	5/3	0.5	Ar	Ufl	8	60	2200	54.44	25.6	14.3	0.3	0.6	4.7	-	-	0.06
							2000	51.31	23.8	10.6	0.3	3.5	10.43	-	-	0.06
17	5/3	0.5	N2	Ufl	8	0	2360	18.4	15.47	13	2	36.6	14.46	-	-	0.07
18	5/3	0.5	N2	Ufl	8	30	2340	21.1	13.45	14.12	0.2	35.6	15.49	-	-	0.04
19	5/3	0.5	N2	Ufl	8	60	2550	22.8	11.85	12.72	0.4	35.7	16.49	-	-	0.04
20	1/2	0.5	Ar	Ufl	8	0	3070	20.3	62.74	6.9	0.9	3.3	5.7	-	0.1	0.06
21	1/2	0.5	Ar	Ufl	8	30	3400	24	59.5	5.58	0.93	2.9	7	-	0.05	0.04
22	1/2	0.5	Ar	Ufl	8	60	3200	30.5	53.2	3.86	0.8	3	8.5	-	0.1	0.04
23	1/1	0.5	Ar	Ufl	8	0	3150	33.93	55.9	2.22	0.45	4.3	2.98	0.1	0.04	0.08

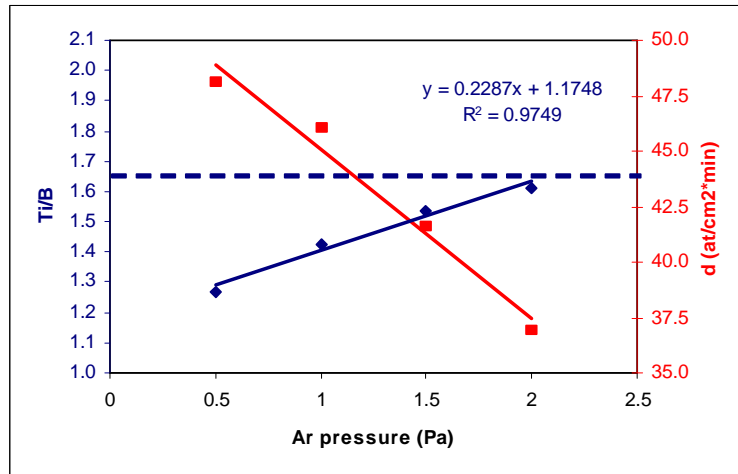
H, N, O, (C) Verunreinigungen (10-20%)

→ Oxidation/Adsorption der porösen RT Schichten





Druck - Abstand

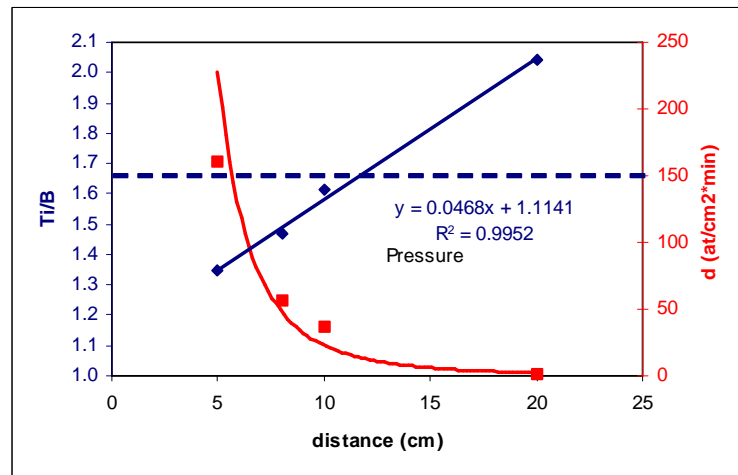


Ti/B steigt (linear) mit Gasdruck

- Kollisionen ???
- $r_{\text{Ti}} 176 \text{ pm} > r_{\text{B}} 87 \text{ pm} !!!$
- generelle Ti-Defizienz

Einbaurrate fällt (linear) mit Gasdruck

- Kollisionen
- warum nahezu linear?



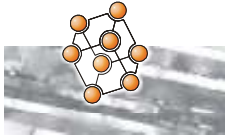
Ti/B steigt (linear) mit Abstand

- hohe Bandbreite (45% !!!)
- Kollisionen ???
- Abstand-Druck komplementär?

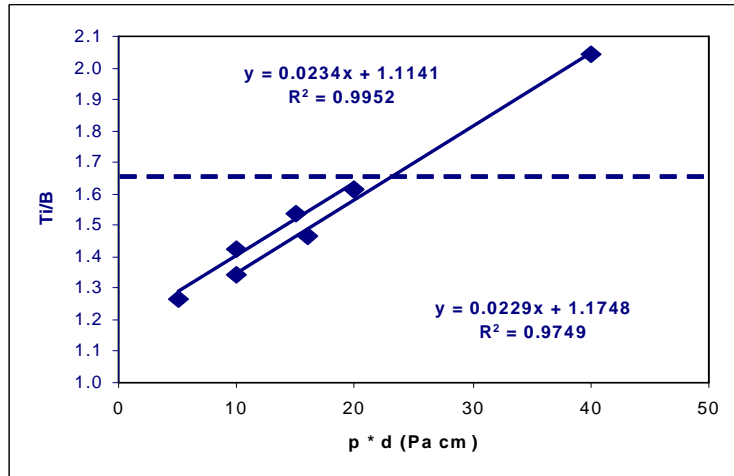
Einbaurrate fällt (exp.) mit Gasdruck

- Kollisions-Raumwinkelabhängigkeit
- kinetisch-thermische Ausbreitung



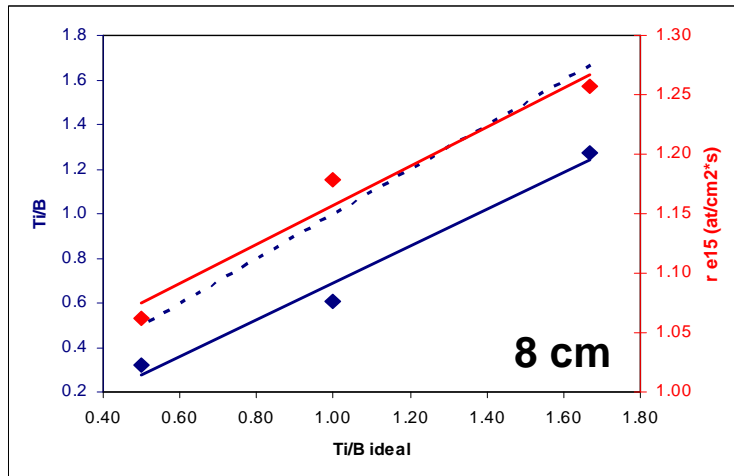


Druck - Abstand



Druck-Abstand sind komplementär

- Warum linear?
- kinetisch-thermischer Übergang?
 (MFP_{Ti} 7mm ↔ MFP_B 17mm @ 2Pa Ar)
- Ti Defizienz??
- zusätzliche Faktoren??



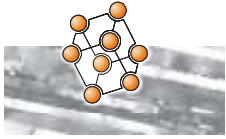
Ti/B skaliert mit Target Stöchiometrie

- ähnliche Prozesse (Matrix Effekte)
- generelle Ti-Defizienz

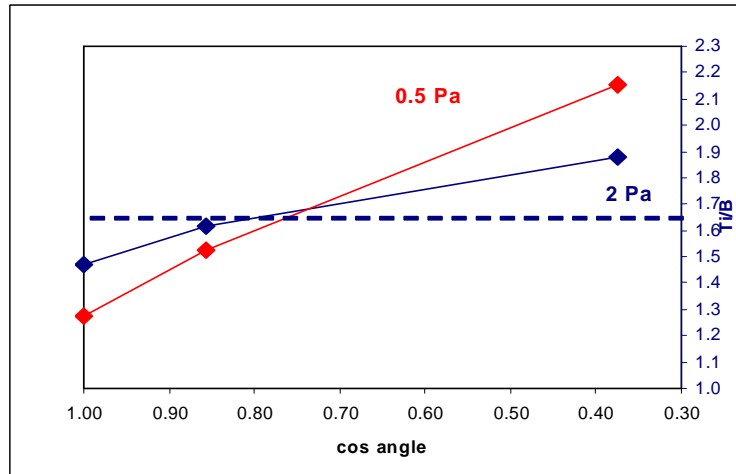
Einbaurrate fällt mit B-Gehalt

- Ausbeute Effekt
- $\gamma_{Ti} \gg \gamma_B$ (Ar)



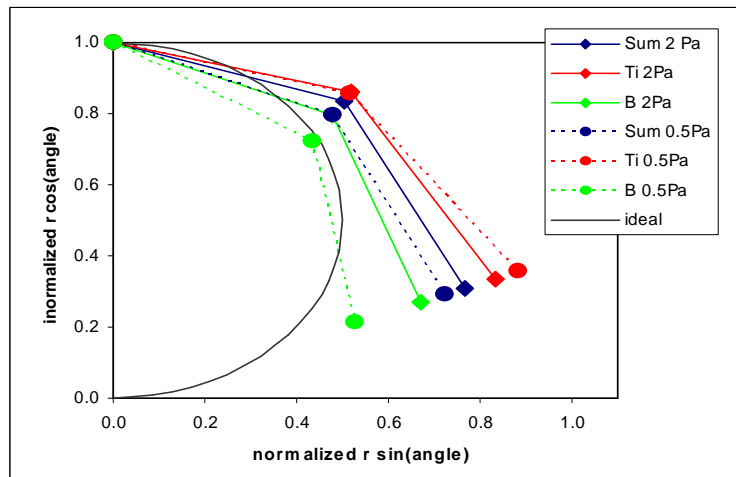


Winkelverteilung



Winkelabhängigkeit der Ti/B Rate

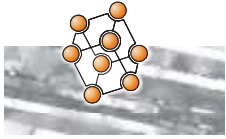
- präferentielle B Emission @ 90°
- flachere Winkel für Ti
- moderiert durch Gasstreuung
0.5 Pa > 2 Pa



Winkelabhängigkeit der Einbaurate

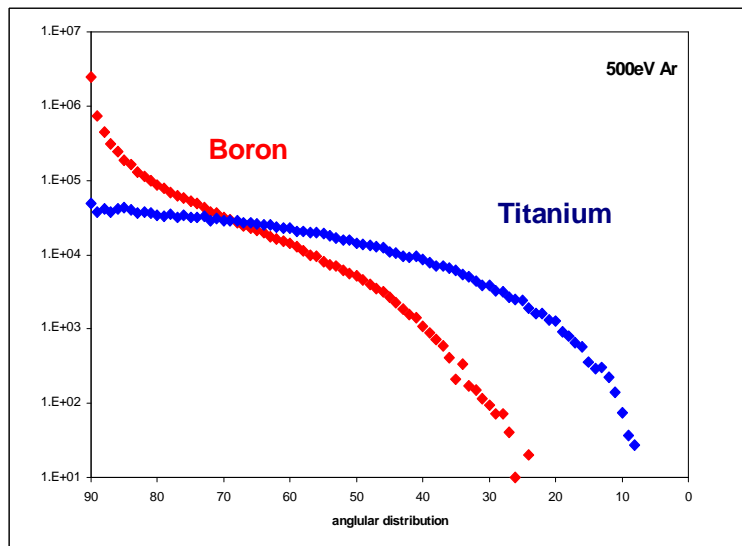
- allg. keine cos Verteilung
- $1/r^2$ Abhängigkeit ?
- keine Thermalisierung mit Druck





Simulation - Emission

500 eV Ar auf Ti bzw. B Elementtargets
(SRIM2006)



Ti/B Rate wird bestimmt durch:

- Ausbeuten (Ti 0.65 ↔ B 0.18)
- Energieverteilung (Ti 28eV ↔ B 8eV)
- Emissionswinkel

B - präferentiell entlang der Normalen

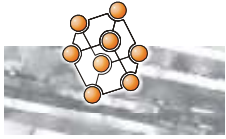
- Kaskaden-Emission ($m_B < m_{Ar}$)

Ti - flachere Emissionswinkel

- Einfachstöße ($m_{Ti} \sim m_{Ar}$)

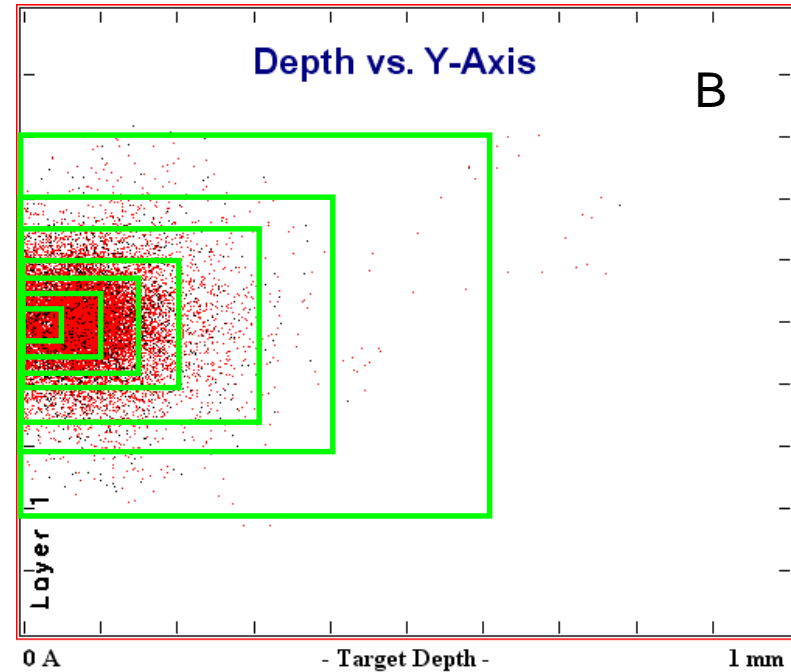
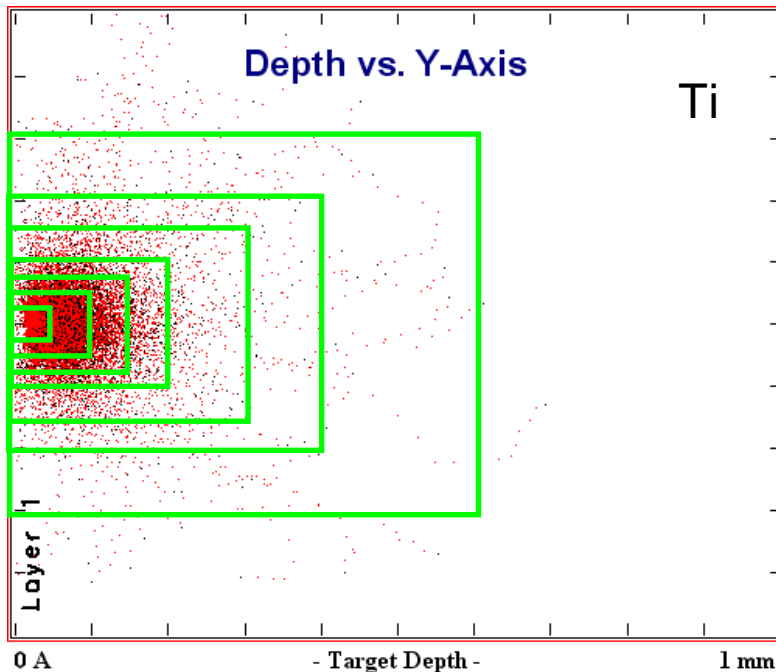
- Winkelverteilung
- Energieverteilung (kin.-therm.)
- Streuwinkel (Masse)
- Weglänge (Radius)





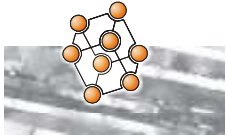
Simulation - Transport

54000 Ti und B in 1 Pa Ar (respektive Winkel/Energieverteilung)

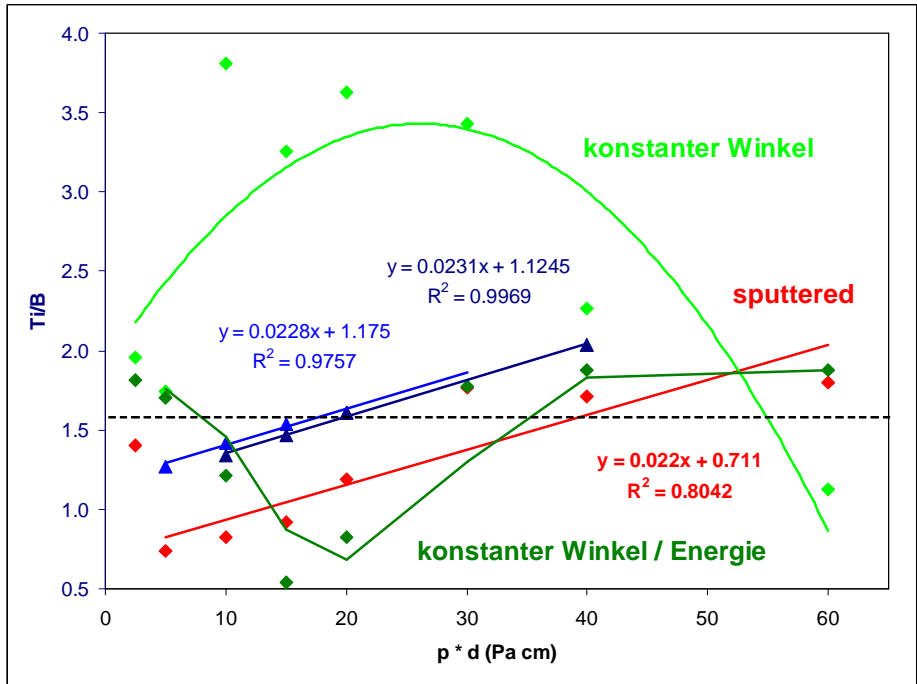


- Übergang kinetisch-thermische Ausbreitung
- Unterscheidung transmittierte / gestoppte Atome
- Variable Größe der Simulationsboxen



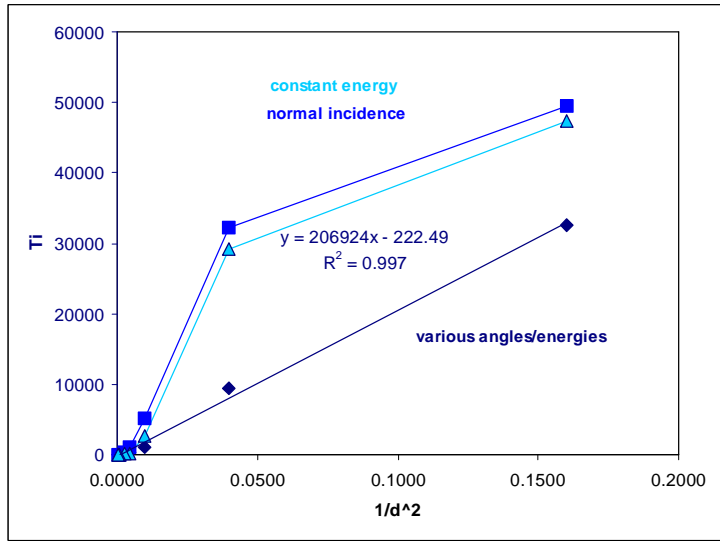


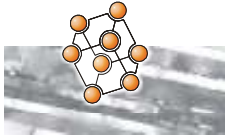
Experiment ↔ Simulation



- gute Korrelation der Ti/B Rate
- komplexes System
 - Winkelverteilung
 - Energieverteilung
 - Gasstreuung
 - kin.-therm. Übergang

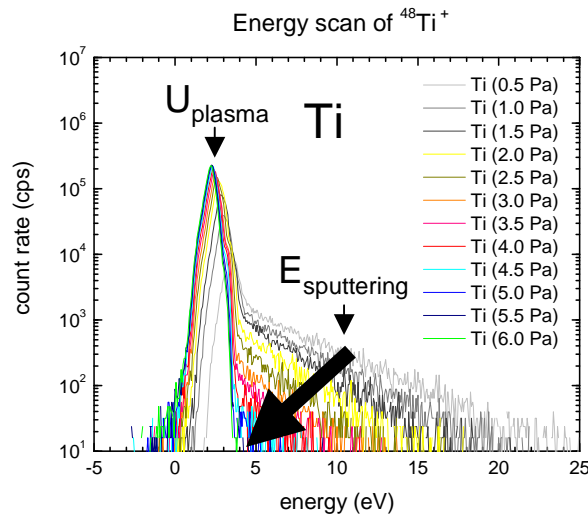
→ zufälliger $1/d^2$ Zusammenhang (Experiment & Simulation)





Massen-Energie-Analysator

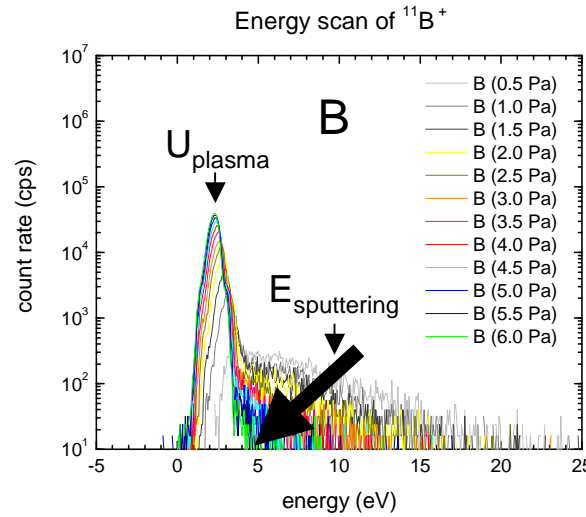
Zusätzliche Energie vom Sputtern → Thermalisierung mit Druck



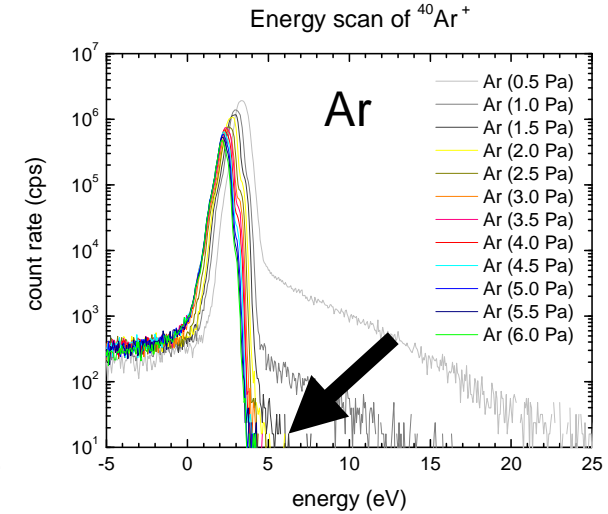
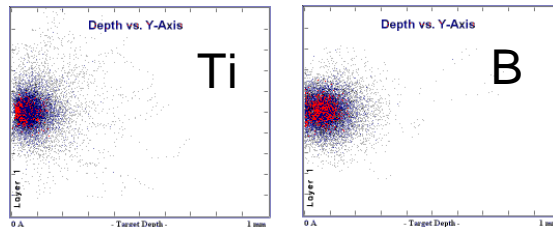
$$\text{MFP}_{\text{Theorie}} = 6.9 \text{ mm}$$

Thermalisierung bei 5-6 Pa ⇒ 30-35 cm @ 1Pa

MEA = SRIM



$$\text{MFP}_{\text{Theorie}} = 17 \text{ mm}$$



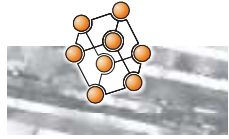
Thermalisierung @ **2Pa**
 (~60 mm Abstand)

$$\Rightarrow \text{MFP} \sim 20 \text{ mm}$$

$$\text{MFP} = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{kT}{p} \frac{1}{\sigma}$$

$$\Rightarrow \text{MFP}_{\text{Theorie}} = 21 \text{ mm}$$



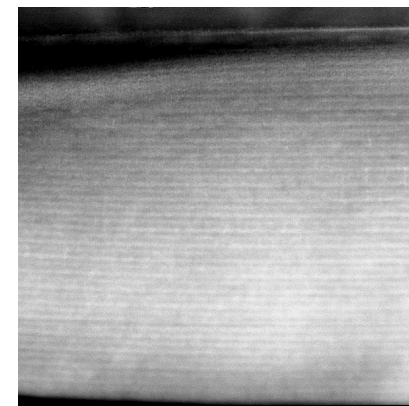


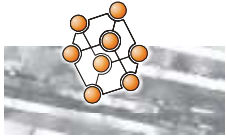
Zusammenfassung

- Übereinstimmung zwischen **Experiment** und **Simulation**
- **Ti/B Rate** wird durch **Emissioncharakteristik** (Winkel & Energie) & **Gasstreuung** (Streuquerschnitt, Masse) bestimmt
- Einfluss von **Geometrie** und **Gasdruck** (Gasart) auf **Ti/B** & **Abscheiderate**

→ am größten für Mischtargets mit großem Δm
→ wichtige Drucksteuerung für Reaktivprozesse
→ 3D Effekte (Substratrotation etc.)

TiBN (100%) HADF 140mm





Vielen Dank für ihre Aufmerksamkeit

