

Wiederholung: Die Sputterausbeute

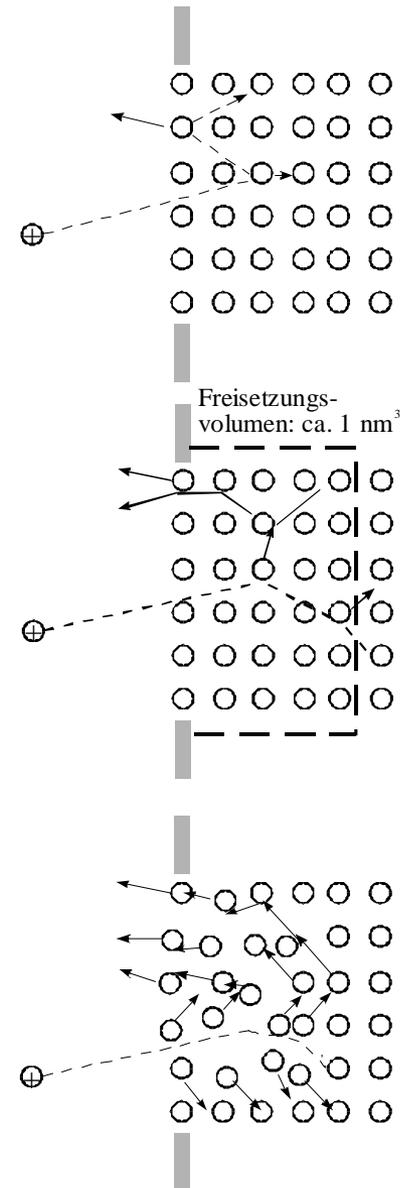
$$Y = \frac{\langle n \rangle}{n^+}$$

$\langle n \rangle$ = mittlere Anzahl der pro Einschluß emittierten Teilchen
 n^+ = Anzahl der auftreffenden Ionen

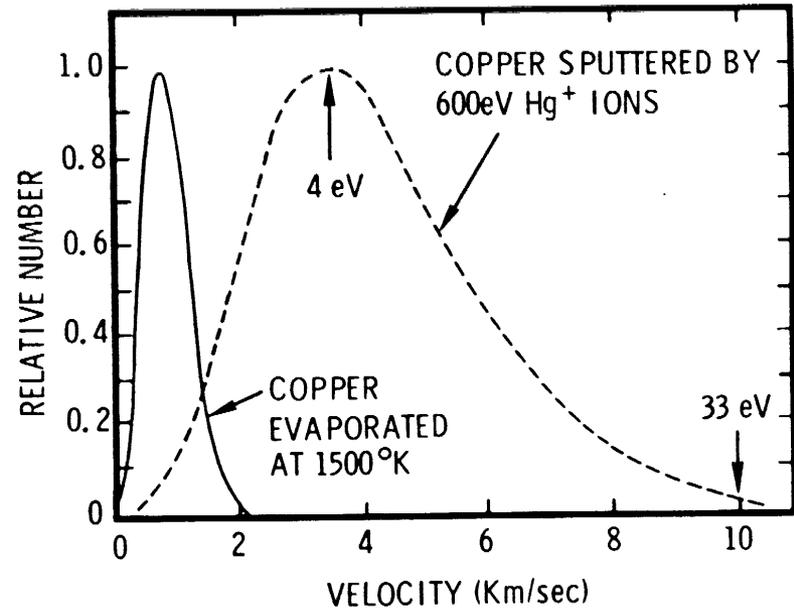
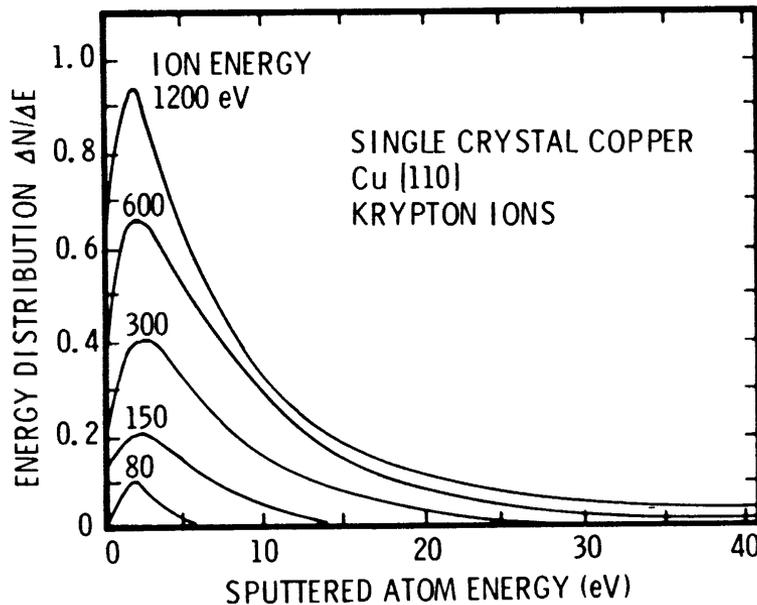
Y hängt von mehreren Ionen- und Materialparametern ab.

Wiederholung: Sputterregimes

- **Single Knock On**
- **Lineare Stosskaskade**
- **Thermal Spike**

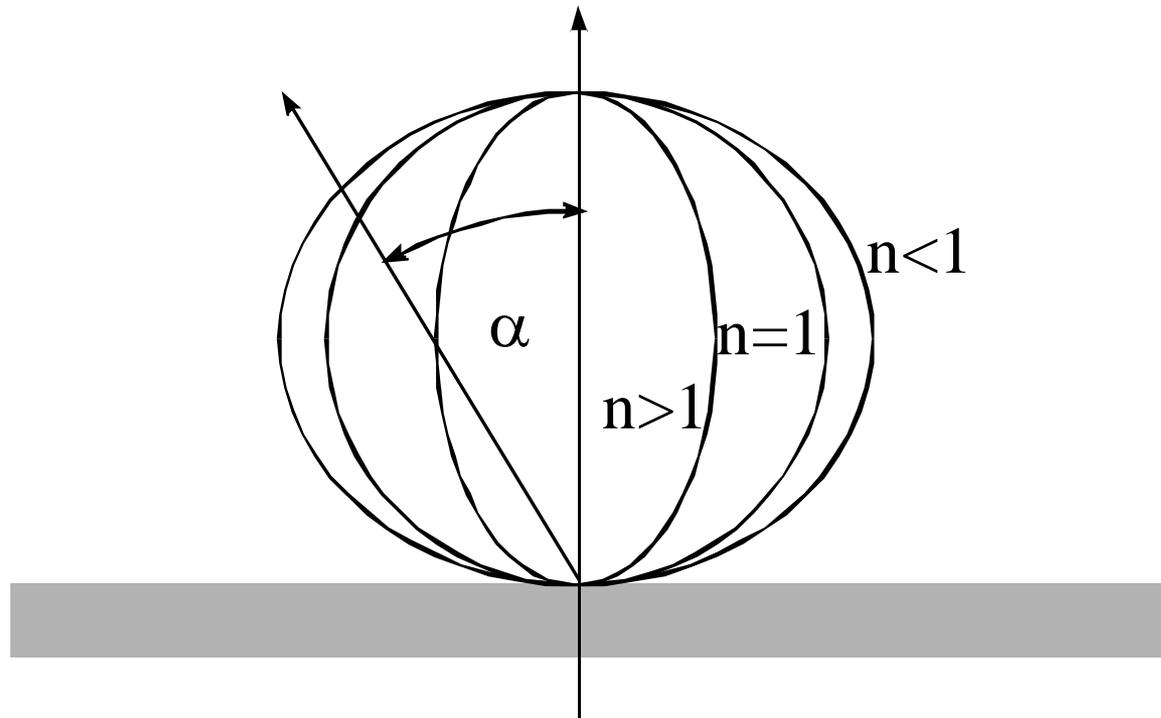


Wiederholung: Energieverteilung bei Emission



Die Energieverteilung gesputterter Teilchen unterscheidet sich deutlich von jener thermisch evaporierter Atome!

Wiederholung: Winkelverteilung bei Emission

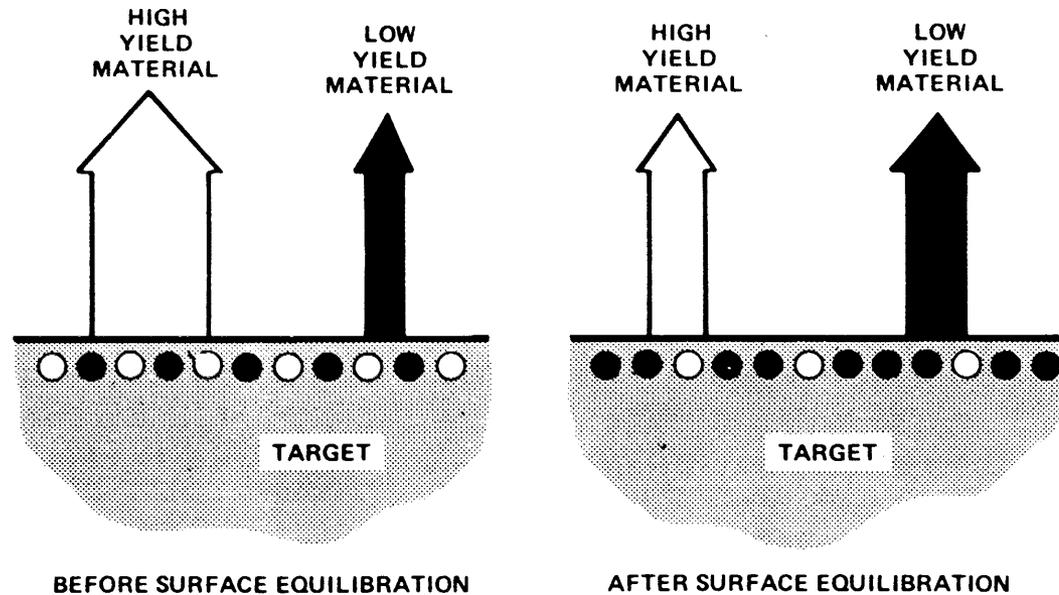


$$n(\alpha) \propto \cos^n \alpha$$

$$n \leq 1 \quad E < 1 \text{ keV}$$

$$n > 1 \quad E > 1 \text{ keV}$$

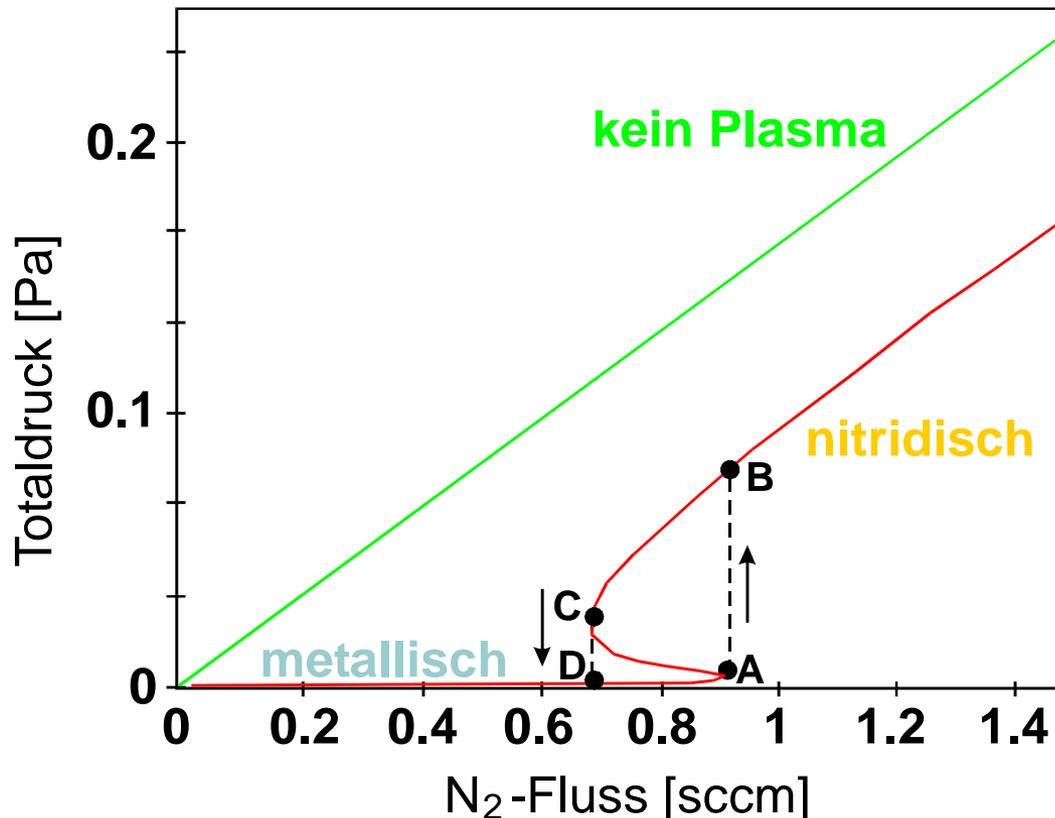
Wiederholung: Sputtern von Legierungen



Bei einer gleichmässigen Verteilung von Materialien verschiedener Sputterausbeuten entspricht (nach einer Einlaufphase) die Dampfstrahlzusammensetzung der ursprünglichen Targetzusammensetzung.

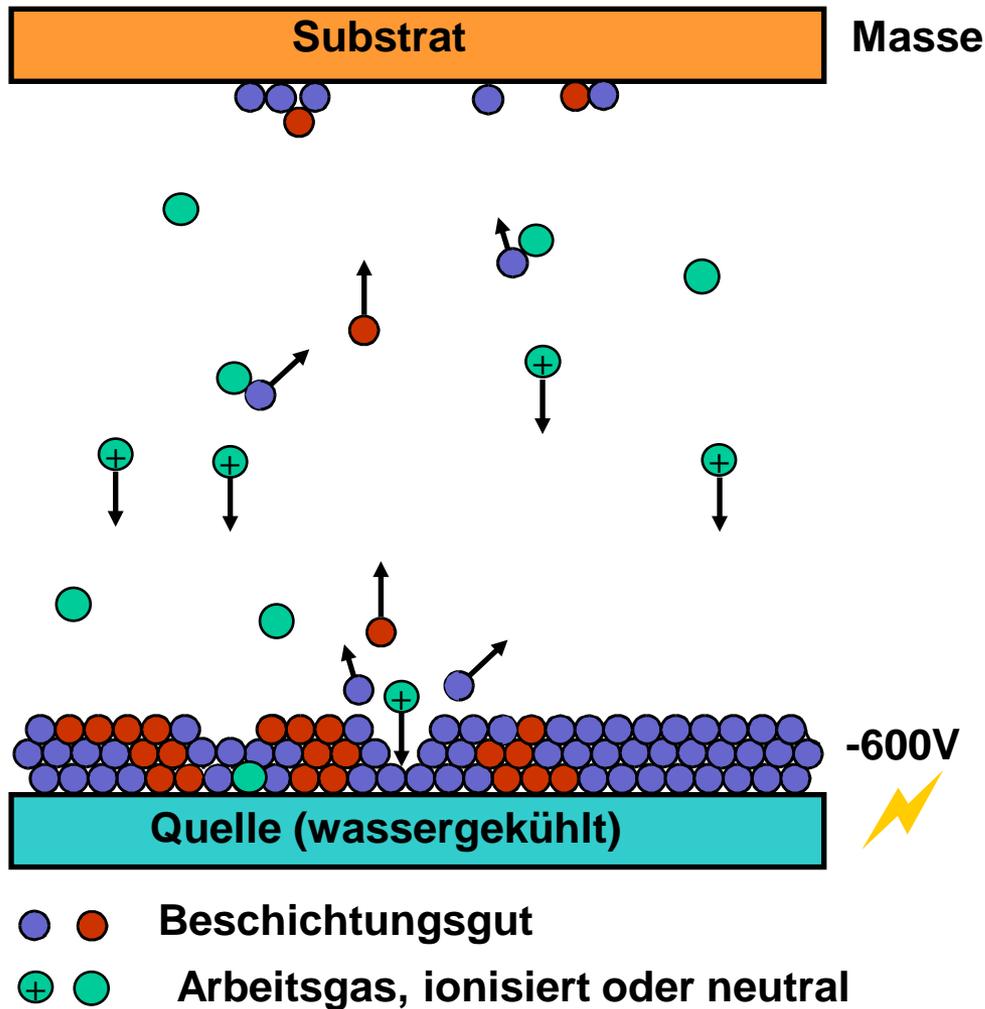
Wiederholung: Reaktive Prozesse (TiN)

Druck in der Kammer in Abhängigkeit vom N₂-Fluss:



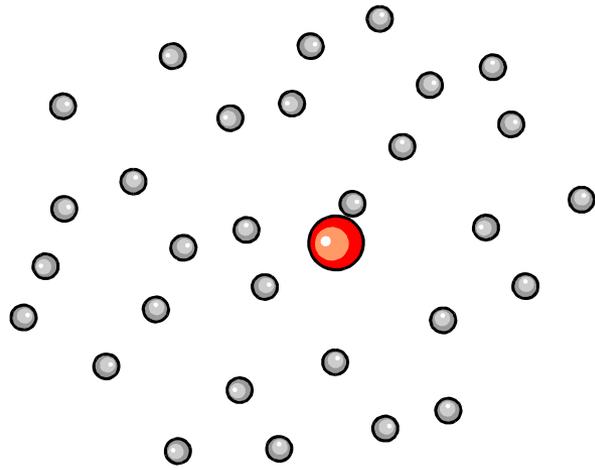
Zunächst wird aller Stickstoff verbraucht; Optimal wäre der instabile Arbeitspunkt A.

Gasphasentransport



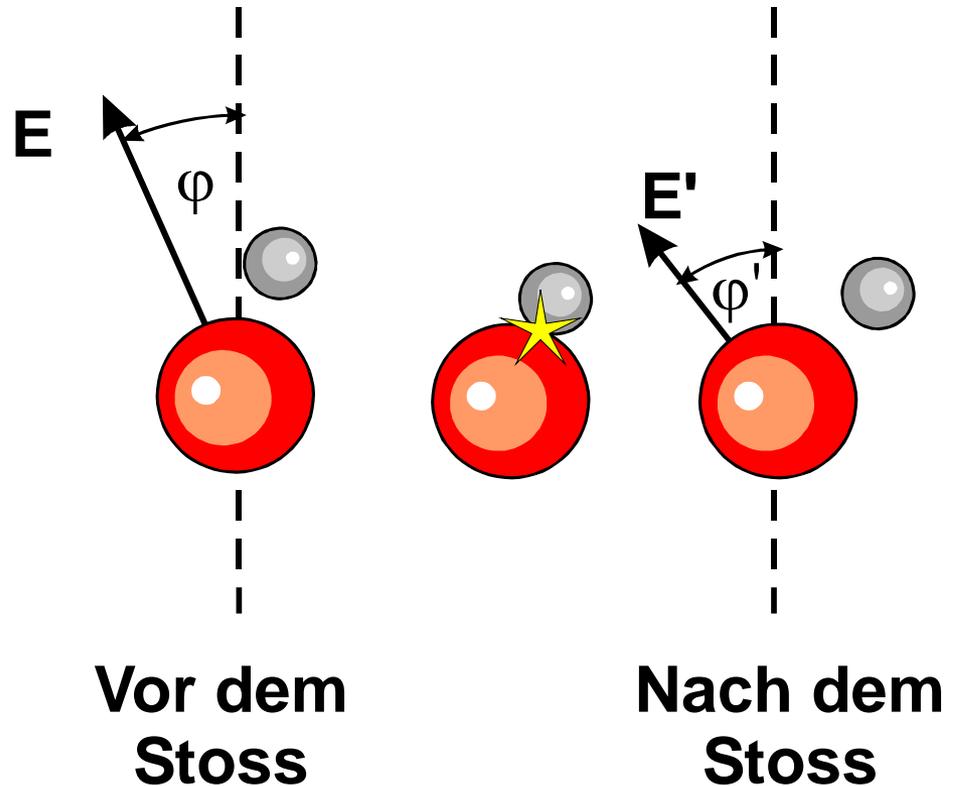
Modifikation der
Energie- und
Winkelverteilung
des Beschichtungs-
gutes beim
Transport von der
Quelle zum Substrat

Beschichtungsteilchen durchquert Gasphase



$$E' = E - \Delta E$$

$$\varphi' = \varphi - \Delta\varphi$$



Pro Stoss erleidet das **Beschichtungsteilchen** einen **mittleren Energieverlust ΔE** und eine **mittlere Winkeländerung $\Delta\varphi$** .

Mittlerer Energieverlust I

Anfangsbedingung: Teilchen 1 in Ruhe, Teilchen 2 bewegt sich. Betrachte den **Energieverlust von Teilchen 2.**

$$\left\langle \frac{E'}{E} \right\rangle = 1 - \frac{1}{2} \cdot \frac{4 \cdot \mu}{(1 + \mu)^2}, \quad \mu = \frac{m_1}{m_2}, \quad \langle \Delta E \rangle \approx E \cdot \left(1 - \left\langle \frac{E'}{E} \right\rangle \right)$$

E ... Energie Teilchen 2 vor dem Stoss

E' ... Energie Teilchen 2 nach dem Stoss

Leichtes Arbeitsgas: $\mu = 0.1 \Rightarrow \langle E' / E \rangle = 0.83$

Gleiche Massen: $\mu = 1 \Rightarrow \langle E' / E \rangle = 0.5$

Schweres Arbeitsgas: $\mu = 10 \Rightarrow \langle E' / E \rangle = 0.83$

Mittlerer Energieverlust II

Situation nach 5 Stößen:

Leichtes Arbeitsgas: $\mu = 0.1 \Rightarrow (\langle E' / E \rangle)^5 = 0.4$

Gleiche Massen: $\mu = 1 \Rightarrow (\langle E' / E \rangle)^5 = 0.03$

Schweres Arbeitsgas: $\mu = 0.1 \Rightarrow (\langle E' / E \rangle)^5 = 0.4$

Bei realistischeren Stossprozessen treten energieabhängige Wirkungsquerschnitte auf. Je langsamer ein Teilchen, desto größer sein Wirkungsquerschnitt. Weiters muss irgendwann die Geschwindigkeitsverteilung der Gasatome berücksichtigt werden.

Mittlerer Streuwinkel I

Mittlerer Streuwinkel θ von Teilchen 2:

$$\langle \cos \varphi \rangle = 1 - \frac{\mu^2}{3}, \quad \mu = \frac{m_1}{m_2} < 1$$

$$\langle \cos \varphi \rangle = \frac{2}{3 \cdot \mu}, \quad \mu = \frac{m_1}{m_2} > 1$$

Leichtes Arbeitsgas: $\mu = 0.1 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 4.6^\circ$

Gleiche Massen: $\mu = 1 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 48.2^\circ$

Schweres Arbeitsgas: $\mu = 10 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 86.2^\circ$

Mittlerer Streuwinkel II

Anzahl der Stöße n , um 360° zu überstreichen
(vollständiger Verlust der Richtungsinformation):

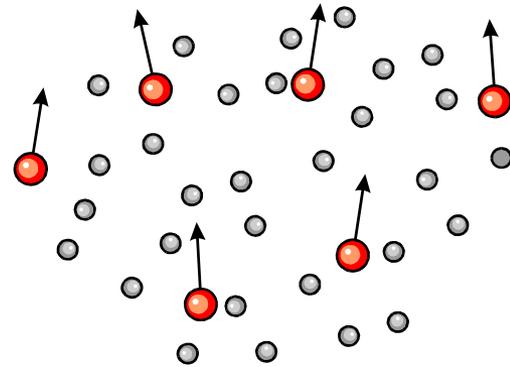
Leichtes Arbeitsgas: $\mu = 0.1 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 4.6^\circ$
 $n = 79$

Gleiche Massen: $\mu = 1 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 48.2^\circ$
 $n = 8$

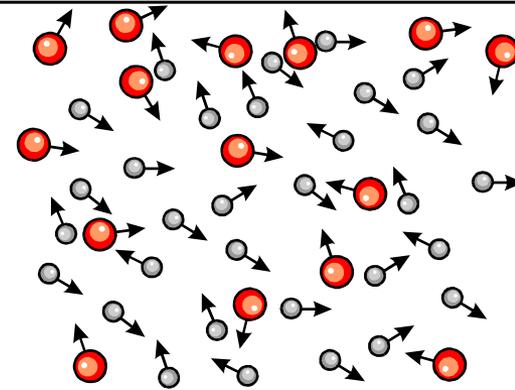
Schweres Arbeitsgas: $\mu = 10 \Rightarrow \langle \varphi \rangle = 86.2^\circ$
 $n = 5$

Gasphasenstreuung Zusammenfassung

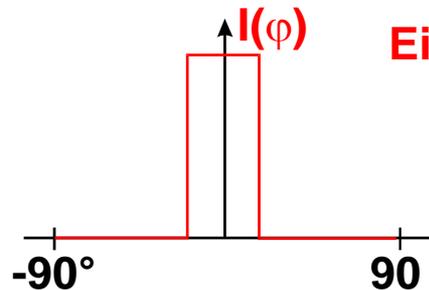
Als Resultat der Stöße in der Gasphase ergeben sich folgende zwei **Extremfälle**:



energiereich

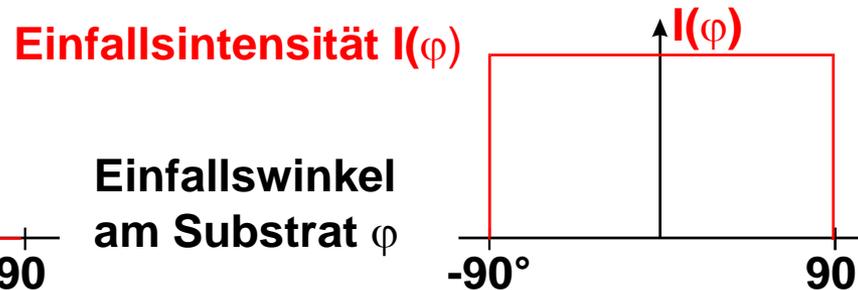


thermalisiert



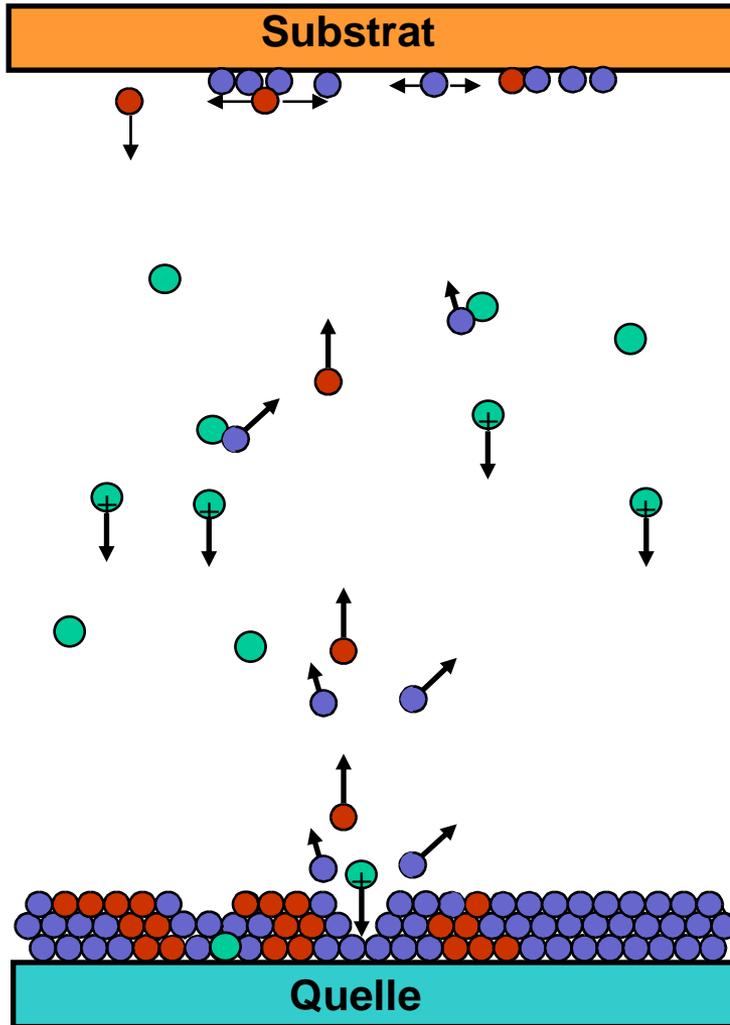
kollimiert

Einfallswinkel am Substrat φ



isotrop

Elementare Stufen der Beschichtung



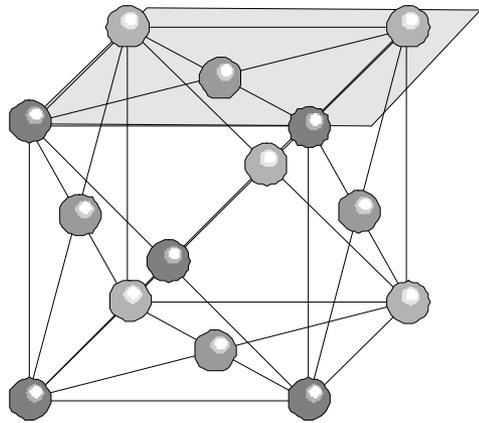
Auftreffen am Substrat

Transport

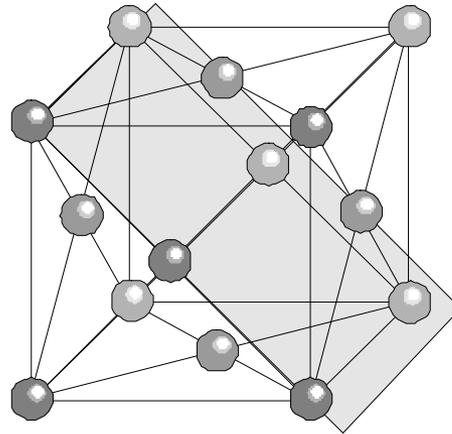
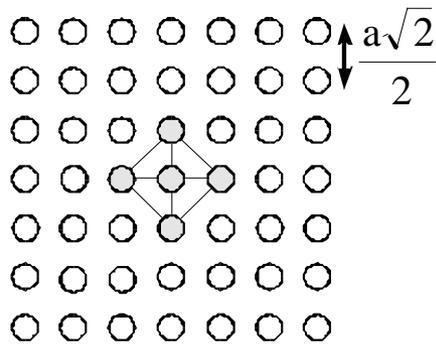
Loslösung von der Quelle

Oberflächentypen I

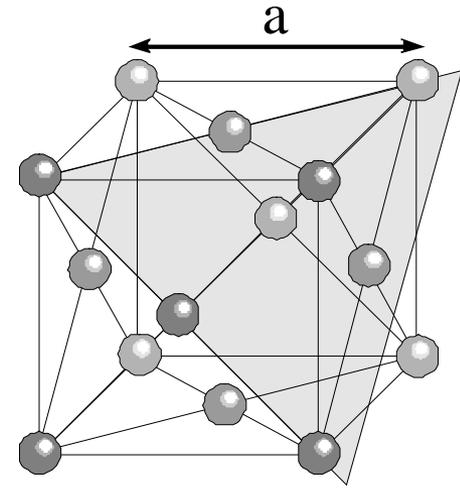
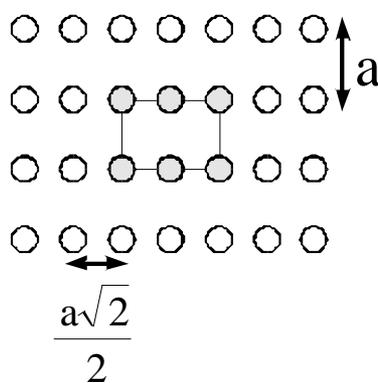
Kubisch-flächenzentriert



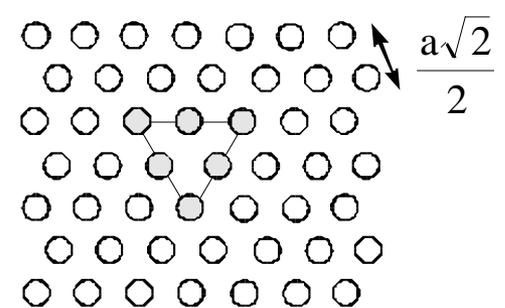
(100)



(110)

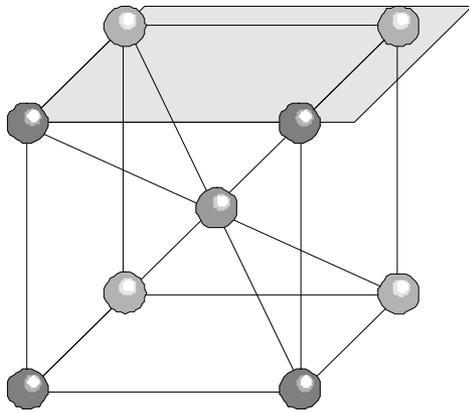


(111)

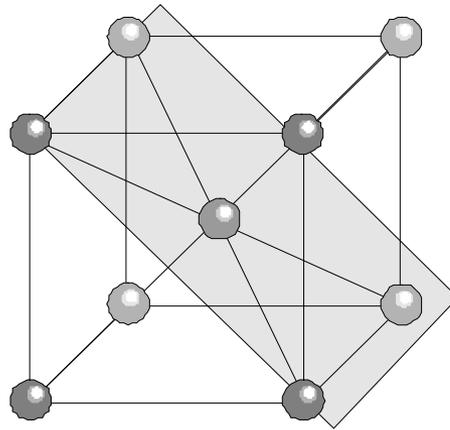
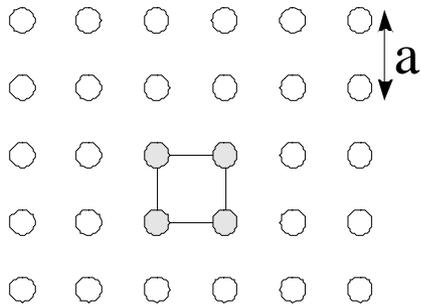


Oberflächentypen II

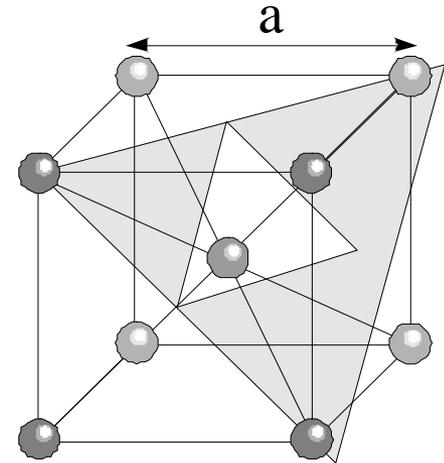
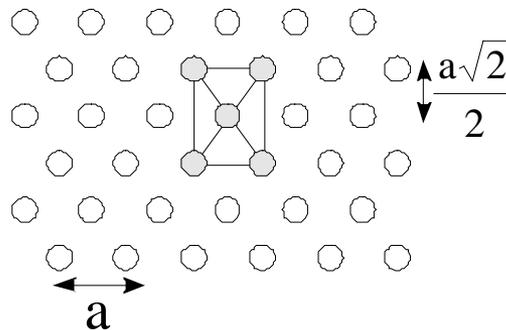
Kubisch-raumzentriert



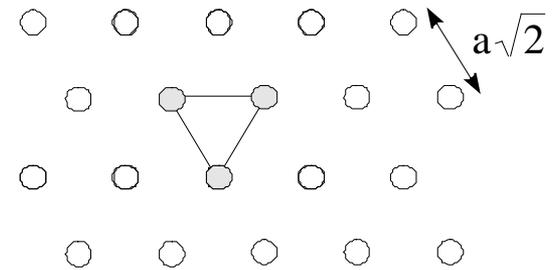
(100)



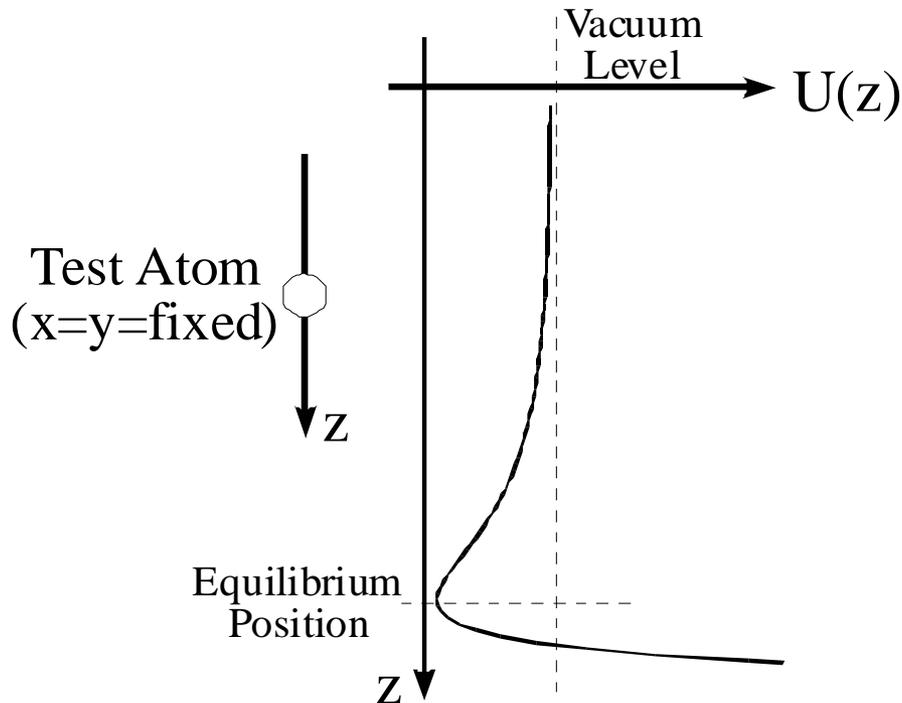
(110)



(111)



Bestimmung von Potentialenergieoberflächen



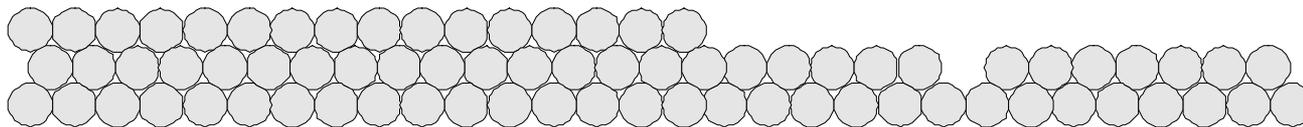
Interaction Surface/Test Atom Described by Model Potentials

Pair Potentials:

- Lennard Jones
- Morse

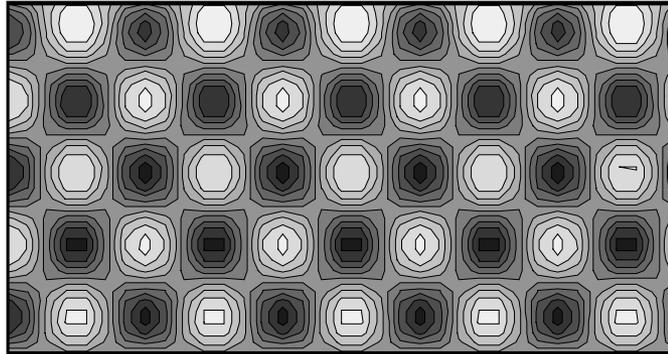
Many Body Potentials:

- Embedded Atom
- Sutton Chen
- Tight Binding

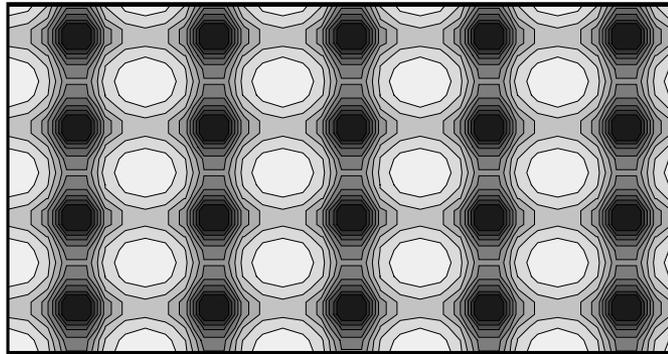


Topmost Atomic Layers (Side View)

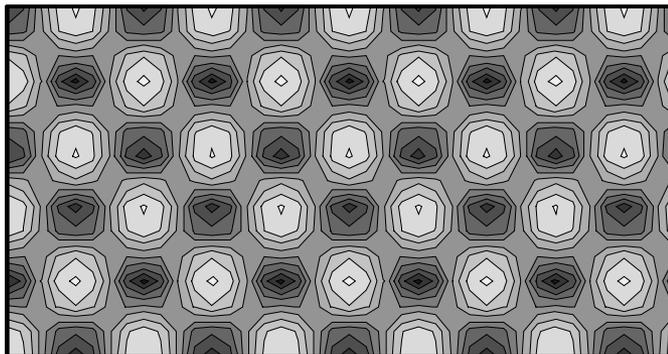
Elementare Potentialenergieoberflächen



(100)



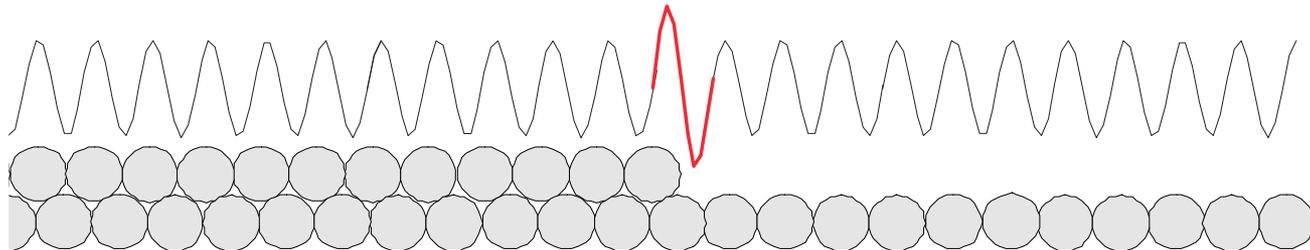
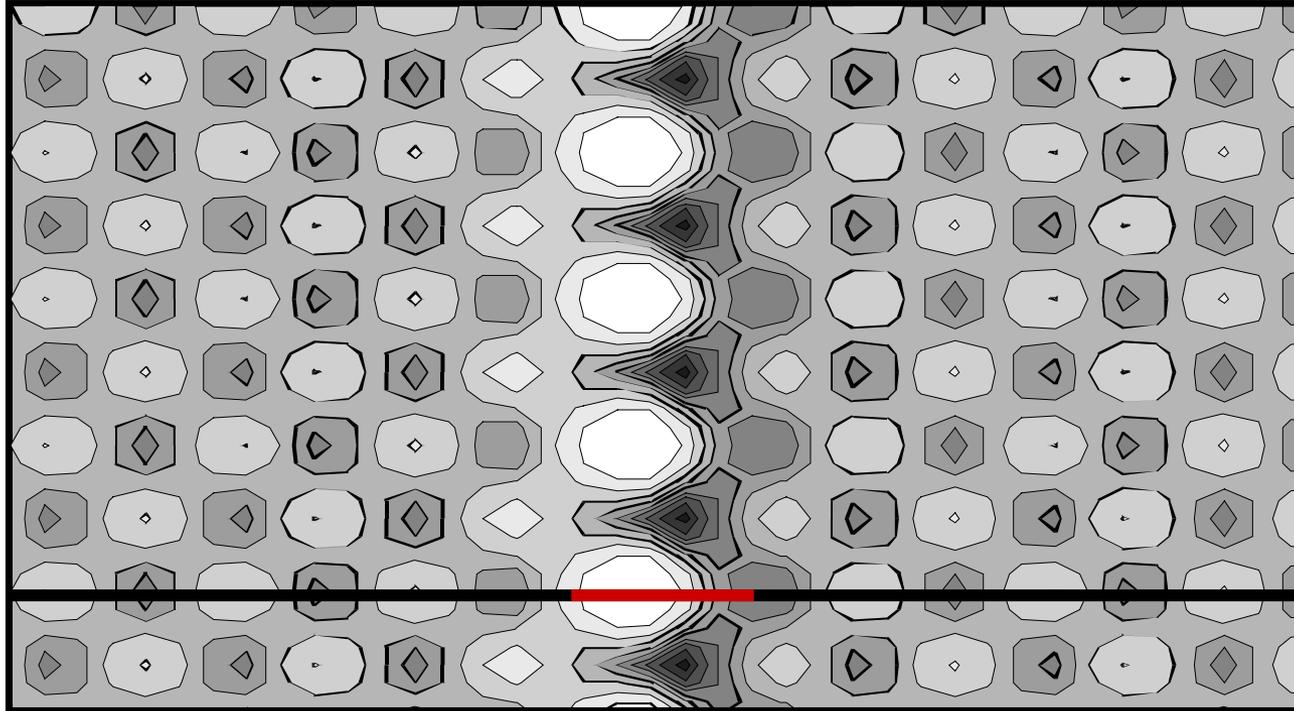
(110)



(111)

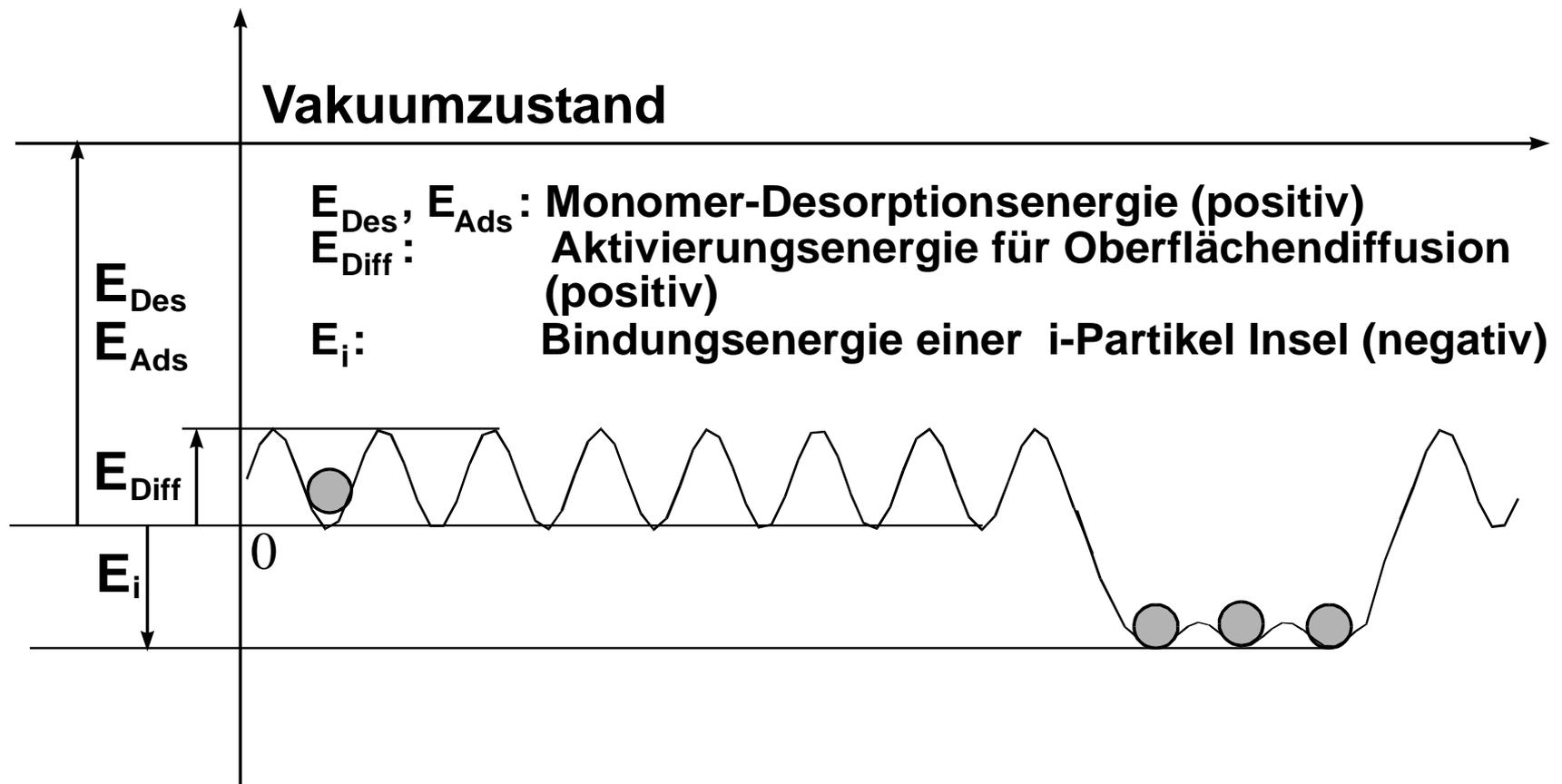
Komplexere Oberflächengeometrien

Gestufte Oberfläche – Ehrlich Schwöbel Barriere

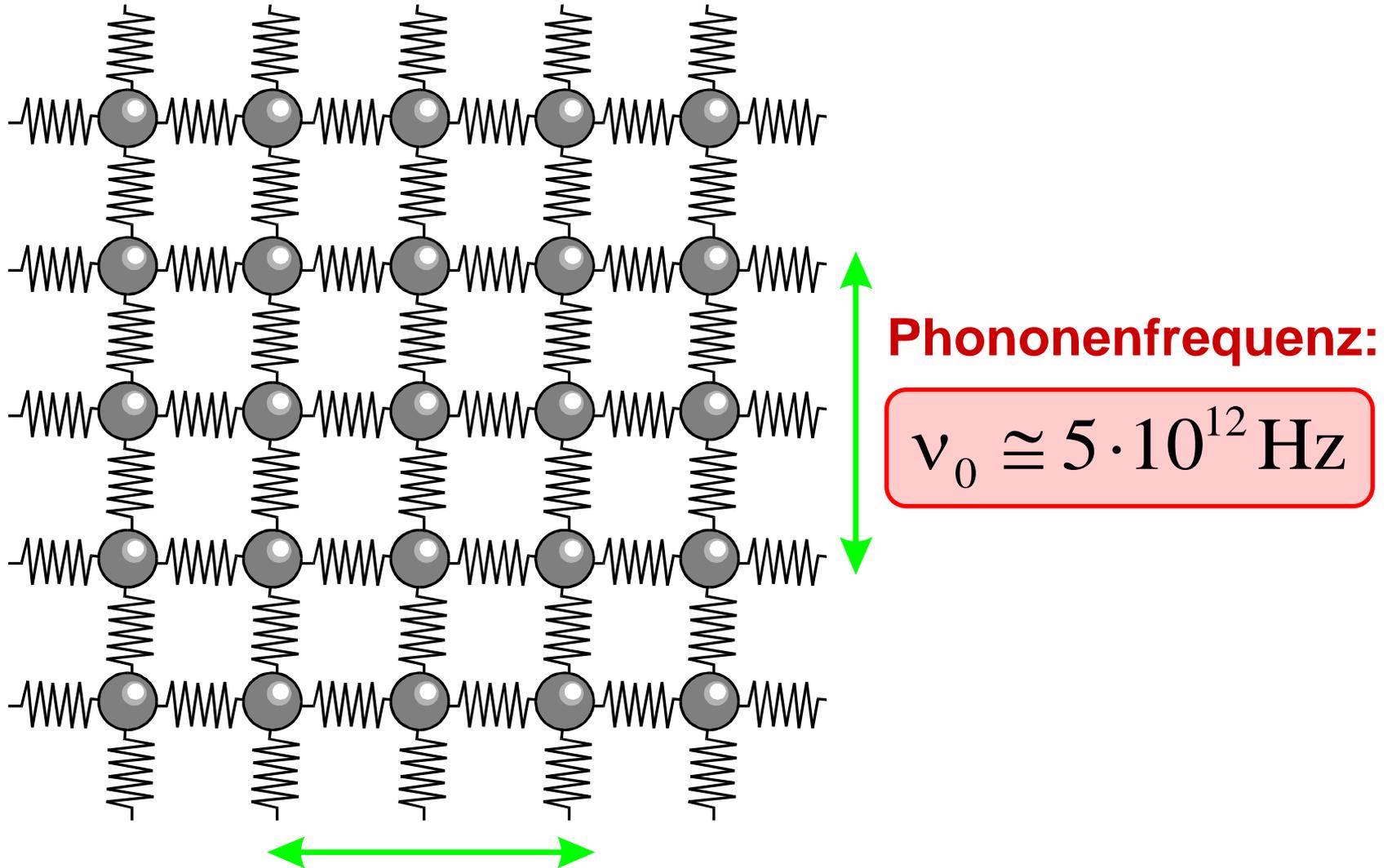


Bindungsenergien

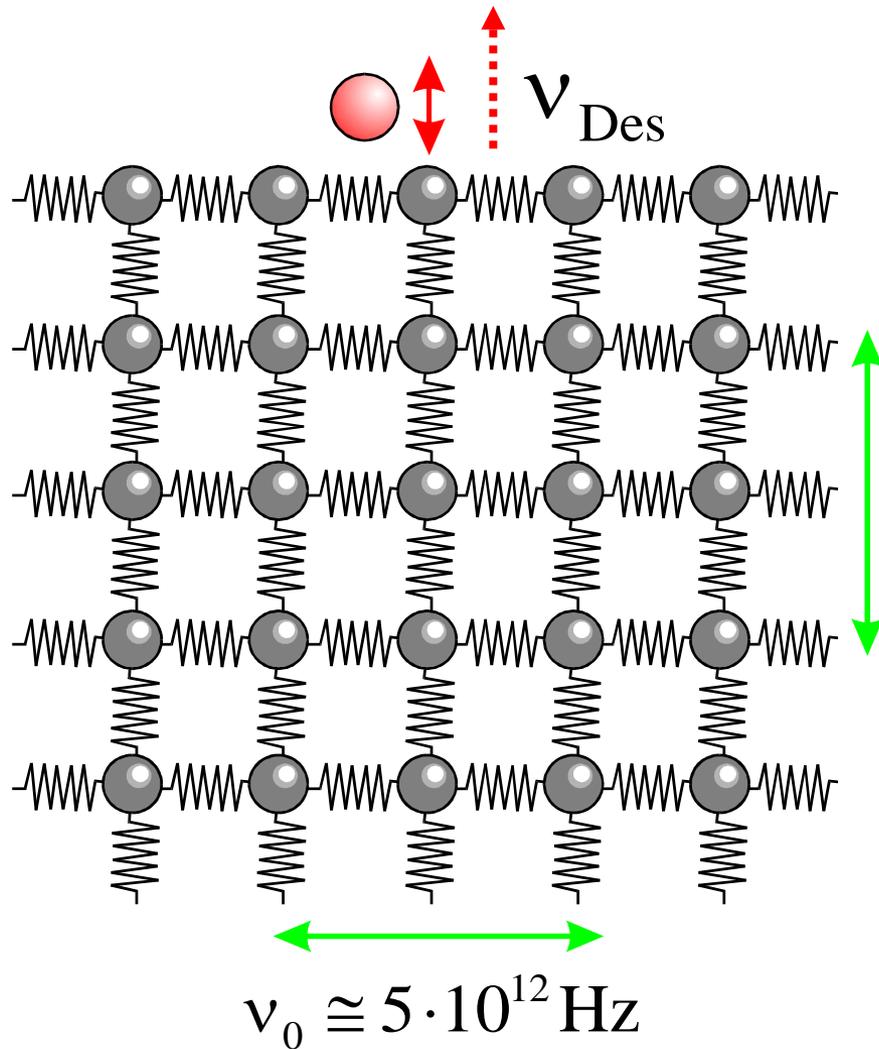
Wichtige Bindungsenergien



Elementarprozesse: Phononenschwingungen



Elementarprozesse: Desorption

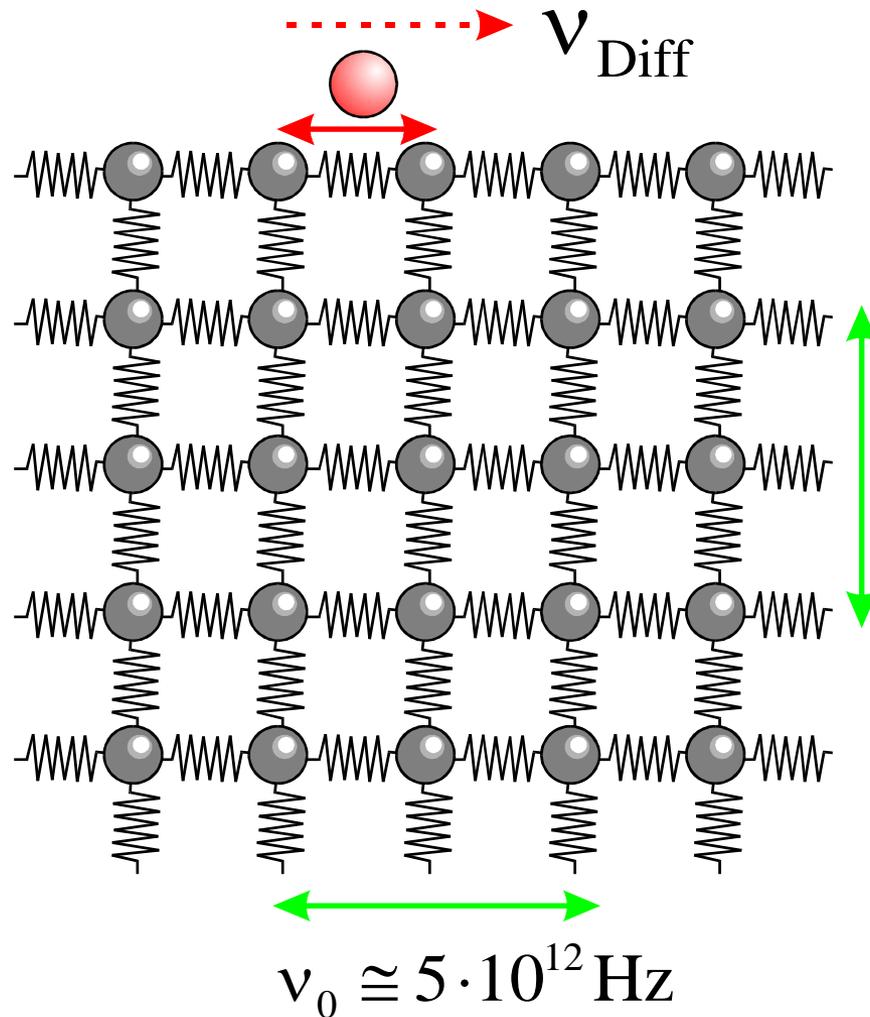


Desorptionsfrequenz:

$$v_{\text{Des}} = v_0 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Des}}}{k_B T_S}}$$

$$E_{\text{Des}} \cong 1 - 3 \text{ eV}$$

Elementarprozesse: Oberflächendiffusion

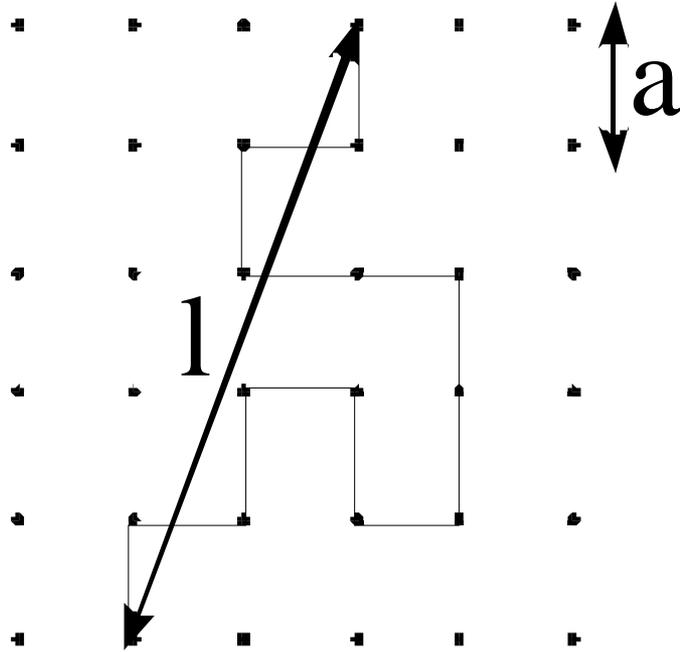


Diffusionsfrequenz:

$$\nu_{\text{Diff}} = \nu_0 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Diff}}}{k_B T_S}}$$

$$E_{\text{Diff}} \approx 0.1 - 0.8 \text{ eV}$$

Oberflächendiffusion: Random Walk



a ...Gitterkonstante

l ...effektiv zurückgelegte
Weglänge

Pythagoras:

$$l^2 = \left(\sum_{i=1}^{n_x} x_i \right)^2 + \left(\sum_{i=1}^{n_y} y_i \right)^2 \quad x_i, y_i = \pm a$$

$$l^2 = \left(\sum_{i=1}^{n_x} x_i \sum_{j=1}^{n_x} x_j \right) + \left(\sum_{i=1}^{n_y} y_i \sum_{j=1}^{n_y} y_j \right)$$

$$\langle l^2 \rangle = \left\langle \left(\sum x_i \sum x_j \right) \right\rangle + \left\langle \left(\sum y_i \sum y_j \right) \right\rangle =$$

$$= \left\langle \sum_{i=1}^{n_x} x_i^2 \right\rangle + \left\langle \sum_{i=1}^{n_y} y_i^2 \right\rangle = (n_x + n_y) \cdot a^2 = N \cdot a^2$$

$$\langle l^2 \rangle = N \cdot a^2$$

Oberflächendiffusion: Diffusionskoeffizient

$$\langle l^2 \rangle = N \cdot a^2$$

$$D = v_0 \cdot a^2 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Diff}}}{k_B T_S}} \quad [\text{m}^2 \text{s}^{-1}]$$

$$v_{\text{Diff}} = v_0 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Diff}}}{k_B T_S}}$$

Einstein-Relation:

$$\langle l \rangle \cong \sqrt{D\tau} [\text{m}]$$

$\tau = \text{Diffusionszeit}$

$$N[\text{s}^{-1}] = v_{\text{Diff}}$$

Zeitmasstäbe I

Gitterschwingungen:

$$\nu_0 \cong 5 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$$

$$T_S = 300 \text{ K}$$

$$k_B = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$$

Oberflächendiffusion:

$$\nu_{\text{Diff}} = \nu_0 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Diff}}}{k_B T_S}}$$

$$E_{\text{Diff}} = 0,2 \text{ eV} = 3,2 \cdot 10^{-20} \text{ J}$$

$$\nu_{\text{Diff}} = 2,2 \cdot 10^9 \text{ Hz}$$

$$\tau_{\text{Diff}} = \nu_{\text{Diff}}^{-1} = 0.5 \text{ ns}$$

Desorption:

$$\nu_{\text{Des}} = \nu_0 \cdot e^{-\frac{E_{\text{Des}}}{k_B T_S}}$$

$$E_{\text{Des}} = 2 \text{ eV} = 3,2 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

$$\nu_{\text{Des}} = 1,2 \cdot 10^{-21} \text{ Hz (!)}$$

$$\tau_{\text{Des}} = \nu_{\text{Des}}^{-1} = 10^{13} \text{ a}$$

Zeitmasstäbe II

$$\tau_{\text{Diff}}/\tau_{\text{Phonon}} = 10^4$$

$$\tau_{\text{Des}}/\tau_{\text{Diff}} = 10^{30} (!!)$$

Wesentliche Phänomene spielen sich auf extrem unterschiedlichen Zeitskalen ab!

Kondensationsregimes

- **Komplette Kondensation:**

Jedes auftreffende Teilchen bleibt an der Oberfläche, da die Desorptionsfrequenz extrem gering ist.

Voraussetzung: $T_s <$

- **Inkomplette Kondensation:**

Teilchen können desorbieren, es stellt sich ein Adsorptions/Desorptions-Gleichgewicht ein (dazu später mehr) .

Voraussetzung: $T_s >$