



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

ATRAPAMIENTO DE LOS ELECTRONES Y LA DISTRIBUCIÓN DEL DEPÓSITO
PRODUCIDO POR SPUTTERING CON MAGNETRÓN

T E S I S

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE :
MAESTRA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

P R E S E N T A :

FÍS. KASSANDRA SALGUERO MARTÍNEZ

T U T O R :

DR. STEPHEN MUHL SAUNDERS
Instituto de Investigaciones en Materiales

COMITÉ TUTOR :

DRA. CITLALI SÁNCHEZ AKÉ
Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología
DR. ENRIQUE CAMPS CARVAJAL
Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

CIUDAD UNIVERSITARIA, CD. MX., ABRIL DE 2022



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Declaro conocer el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, plasmado en la Legislación Universitaria. Con base en las definiciones de integridad y honestidad ahí especificadas, aseguro mediante mi firma al calce que el presente trabajo es original y enteramente de mi autoría. Todas las citas de, o referencias a, las obras de otros autores aparecen debida y adecuadamente señaladas, así como acreditadas mediante los recursos editoriales convencionales.

Kassandra Salguero Martínez

Dedico este trabajo a mi familia y amigos

Agradecimientos especiales a Fernando Lezana, que siempre confió en mí y me alentó a concluir este trabajo; a mi familia porque siempre me han hecho sentir que están orgullosos de mí; al Dr. Stephen Muhl por su infinita paciencia, comprensión y mentoría.

RESUMEN

La técnica de *sputtering* con magnetrón para el depósito de películas delgadas se ha desarrollado en gran medida durante las últimas décadas y ha logrado posicionarse como una de las mejores técnicas para la fabricación de una amplia gama de recubrimientos de importancia industrial. En muchos casos, las características de las películas producidas usando esta técnica sobresalen de aquéllas producidas por otros procesos de depósito físico de fase vapor (PVD), y pueden ofrecer la misma funcionalidad que las películas más gruesas generadas por otras técnicas de recubrimiento de superficies.

La eficiencia de expulsión de átomos (el rendimiento de *sputtering*), depende de muchos factores, los cuales a su vez están relacionados con características del plasma como densidad, energía y masa de los iones incidentes; otros factores son el ángulo de incidencia de ellos, la composición elemental y estructura cristalina del blanco, la temperatura, etc. En un magnetrón, el campo magnético se utiliza para atrapar los electrones generados (electrones secundarios) cerca de la superficie del blanco, ya que al hacer esto, se obtiene mayor ionización y un incremento en la cantidad de iones conlleva a una mayor tasa de *sputtering* lo que mejora en gran medida el proceso.

En este trabajo se emplearon tres modelos que funcionan con la ecuación de Lorentz pero que tienen diferentes características en su formulación, con ellos se realizó el estudio de la trayectoria de los electrones secundarios bajo la influencia del campo magnético del magnetrón. Un resultado de particular interés es que dichas trayectorias no son meramente helicoidales alrededor de las líneas de campo magnético, sino que estas se desvían generando un flujo perpendicular al plano de las líneas de campo (azimutal). Además, se implementó el cálculo de la densidad de electrones sobre el blanco que es un parámetro relevante en los procesos de *sputtering* con magnetrón debido su relación con el perfil de erosión.

Otros resultados fueron las trayectorias de los iones de He^+ y Ar^+ y su ángulo de incidencia con el blanco, con ello se confirmó que dicho ángulo depende de la masa del ion.

Los resultados de las trayectorias de los iones y electrones que se obtuvieron con los tres modelos fueron comparados, confirmando que a pesar de ser métodos distintos de cálculo, el comportamiento cualitativo obtenido fue similar.

El atrapamiento de los electrones en cierta región del blanco es lo que produce el patrón de erosión conocido como *racetrack*, en este estudio se confirmó que la región de mayor erosión se encuentra en el centro del plano que contiene las líneas de campo magnético y se analizó como repercute en la distribución del depósito, por lo que este trabajo sirve como base para discernir la importancia del atrapamiento de los electrones en un proceso de *sputtering* con magnetrón.

Comprender aspectos básicos de la física del plasma en este sistema ayuda a efectuar de manera

más precisa la fabricación de depósitos controlados de recubrimientos complejos que requieren un alto grado de dominio del proceso, así como ayudar entender mejor el funcionamiento y limitaciones del sistema de sputtering con magnetrón.

ÍNDICE

Agradecimientos	II
Resumen	III
Índice	VII
Índice de figuras	XIII
1. Introducción	1
1.1. Estructura de la tesis	1
1.1.1. Motivación	1
1.1.2. Objetivos	2
1.1.3. Metodología	2
1.2. Glosario de términos	3
2. Plasmas	5
2.1. Conceptos básicos de la física de plasmas	5
2.1.1. Definición y características del plasma	5
2.1.2. Conceptos de velocidad, energía y temperatura	7
2.1.3. Grado de ionización	7
2.1.4. Colisiones principales en un plasma: Elásticas e Inelásticas	8
2.2. Ecuaciones de movimiento	12
2.2.1. Movimiento de partículas en líneas de campo magnético curvas	13
2.3. Procesos asistidos por plasmas	14
2.3.1. Mediciones experimentales en plasmas	14
3. Sputtering	17
3.1. Interacción de iones y superficie	17
3.2. Cinética del bombardeo	18
3.3. Características de las descargas gaseosas en sistemas de sputtering	20
3.3.1. Ruptura dieléctrica	22
3.3.2. Emisión y atrapamiento de electrones secundarios	24
3.4. Aplicaciones	27
3.4.1. Crecimiento de películas delgadas	28
3.5. Tipos de sistemas de sputtering	32

3.5.1.	Sistemas sin campo magnético	32
3.5.2.	Sistemas con campo magnético	33
4.	Sputtering con magnetrón	37
4.1.	Configuraciones de sputtering con magnetrón	38
4.1.1.	Magnetron plano	38
4.2.	Campo magnético del sistema	39
4.2.1.	Patrón de erosión	41
4.3.	Física del plasma en un sistema de sputtering con magnetrón	41
4.3.1.	Trayectorias de partículas cargadas	45
5.	Tres métodos para modelar el atrapamiento de los electrones sobre un magnetron	47
5.1.	Descripción del modelo	47
5.2.	Arreglo experimental	48
5.3.	Modelado de las trayectorias de los electrones con métodos numéricos	49
5.3.1.	Modelo 1: programación con aceleración constante	50
5.3.2.	Modelo 2: programación con ecuaciones íntegras	52
5.3.3.	Modelo 3: usando software especializado	53
6.	Resultados	55
6.1.	Cálculos realizados para electrones	55
6.1.1.	Modelo 1	56
6.1.2.	Modelo 2	58
6.1.3.	Modelo 3	62
6.2.	Cálculos realizados para iones	64
6.2.1.	Modelo 1	64
6.2.2.	Modelo 2	66
6.2.3.	Modelo 3	69
6.3.	Comparación entre modelos	70
6.4.	Discusión de resultados	75
7.	Conclusiones	79
7.1.	Conclusiones del trabajo	79
7.2.	Trabajo futuro	80
A.	Campo magnético	81
B.	Solución numérica al sistema de ecuaciones diferenciales para modelar la trayectoria de los electrones	83
B.1.	Métodos de Runge-Kutta	83
B.1.1.	Método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4)	84
B.2.	Trayectoria.c	85
B.3.	Cálculo de la densidad del plasma	88
B.4.	Subrutina para calcular la densidad del plasma	88
C.	Código de Mathematica	93

ÍNDICE

VII

Bibliografía

94

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1. Apantallamiento de Debye [6].	6
2.2. Sección eficaz de colisión para electrones en argón. Se representan las colisiones con productos Ar^+ (argón ionizado), Ar^{+2} (argón doblemente ionizado). Adaptación de [13].	9
2.3. Componentes de la velocidad antes y después de una colisión elástica [14].	10
2.4. Ionización por impacto de electrón [14].	11
2.5. Aparición de derivas $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$. En un campo magnético curvo como este se tiene que sobre la superficie es paralelo al campo eléctrico por lo que la deriva es cero, mientras que en su punto más alejado de la superficie, el campo magnético es perpendicular al eléctrico y ahí la deriva se encuentra perpendicular a ambos (en dirección $-\hat{y}$).	13
2.6. Gráfica de la temperatura de los electrones y del gas (del plasma) como función de la presión del plasma para una corriente constante. [20]	15
2.7. Definición de corriente y voltaje en una sonda de Langmuir [22]	16
3.1. Interacción entre ion y superficie [14].	18
3.2. Rendimiento de sputtering como función de la energía incidente de los iones [29].	19
3.3. Datos del umbral de sputtering para diferentes iones incidentes sobre blancos distintos, extracto de [29].	19
3.4. La corriente de descarga I_D versus el voltaje de descarga V_D para una descarga de baja presión. Se indican los diversos regímenes operativos, con corriente creciente, régimen Townsend, resplandor subnormal, resplandor normal, resplandor anormal y régimen de arco [32].	21
3.5. Esquema de una descarga luminiscente, se muestran varias regiones distintas que aparecen entre el cátodo y el ánodo. Los colores son los correspondientes a una descarga de neón (ver tabla 3.1. Los espacios oscuros se abrevian como DS[32].	21
3.6. Distribución de energías de electrones secundarios asociados con impactos de electrones en una superficie de plata[18].	25
3.7. Coeficientes de emisión de electrones secundarios debido a impacto de electrones como función de la energía del electrón primario [18].	26
3.8. Neutralización Auger de un ion en la superficie de un metal con emisión de un electrón secundario [18].	26

3.9.	Coeficientes de emisión de electrones secundarios del Mo como función de la energía cinética de las partículas primarias debido a átomos (N) Ar y iones (I) Ar^+ medidos experimentalmente y simulado de los iones (S) a partir le valor aproximadamente constante $\gamma_{\pi} = 0.074$ de los átomos neutrales [18].	27
3.10.	Ejemplos concretos de aplicaciones del proceso de Sputtering para el recubrimiento de objetos de uso cotidiano tales como a) Recubrimientos decorativos en la industria automotriz, b) Celdas solares, c) Ventanal antireflejante de una estructura arquitectónica[38].	28
3.11.	Variación de la probabilidad de adherencia en una superficie de N_2 a diferentes temperaturas[18].	29
3.12.	Gráfica generalizada de la probabilidad de atrapamiento como función de la energía cinética de la partícula [18].	30
3.13.	Tres modos del proceso de crecimiento de películas delgadas [41].	31
3.14.	Depósito por erosión catódica de diodo planar [42].	32
3.15.	Haz de Iones [42].	33
3.16.	Magnetron cilíndrico [42].	34
3.17.	a) Magnetron plano circular, b) magnetron plano rectangular [44].	35
3.18.	Esquema de un sistema de DC <i>sputtering</i> con magnetron [45].	35
4.1.	Blanco plano rectangular para sistema de <i>sputtering</i> con magnetron mostrando las líneas de campo magnético y la zona de erosión [50].	39
4.2.	Representación simplificada de un sistema de <i>sputtering</i> con magnetron con un blanco de material A (cátodo), los electrones que son atrapados por el campo magnético producen ionización del gas de trabajo que al ser acelerados hacia el cátodo expulsan átomos del blanco.	40
4.3.	Esquema de los imanes de un magnetron rectangular plano [55].	42
4.4.	Esquema del campo magnético de un magnetron rectangular plano. Se muestra únicamente la sección en la que las líneas de campo se encuentran en planos consecutivos paralelos al plano XZ. Sobre la línea de campo se esquematizan las componentes B_x y B_z parametrizadas por R y la magnitud del campo magnético que disminuye conforme la altura z aumenta.	42
4.5.	Parametrización de las coordenadas del campo magnético como función del radio de Sputtering.	44
4.6.	Comportamiento de las componentes del campo magnético modelado por las ecuaciones 4.8 y 4.9.	45
4.7.	Posibles movimientos de un electrón en campos magnéticos estáticos [13].	46
5.1.	Cátodo rectangular de un magnetron. (a) líneas de campo magnético y región del plasma, (b) sección transversal (que une los puntos A-A de la primera figura) que muestra líneas de campo y trayectorias de escape de electrones.[56].	48
5.2.	Sección transversal de un dispositivo de <i>sputtering</i> con magnetron rectangular.[55].	48
5.3.	Esquema de la región empleada para el cálculo y las dimensiones del sistema. Adaptada de [55].	50
5.4.	Estimación del ángulo de incidencia de una partícula teniendo los datos sobre su trayectoria.	52

6.1. Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, el eje vertical es el de la energía medida en eV y el horizontal la evolución temporal (en segundos). Cada curva corresponde a una diferente posición inicial en el blanco. Gráfica obtenida con el modelo 1	56
6.2. Gráficas de las trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, con diferente posición inicial en el blanco, obtenidas con el modelo 1.	57
6.3. Gráficas de las trayectorias de los electrones (obtenidas con el modelo 2) con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, con diferente posición inicial en el blanco.	58
6.4. Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, el eje vertical es el de la energía medida en eV y el horizontal la evolución temporal (en segundos). Cada curva corresponde a una diferente posición inicial en el blanco. Gráfica obtenida con el modelo 2	59
6.5. Cambio en las componentes x y z de las trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm a diferentes posiciones iniciales sobre el blanco x . El lapso de tiempo de este cambio es de 1 ns.	60
6.6. Gráficas del cambio de la densidad de los electrones a diferentes tiempos sobre el plano XZ , ambos ejes se encuentran normalizados a $R= 0.02$ m.	61
6.7. Densidad de electrones durante los primeros 8.8 ns, los ejes X y Z se encuentran normalizados a $R= 0.02$ m.	62
6.8. Trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm. Imagen obtenida con Mathematica	63
6.9. Trayectorias de los iones de He^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 1	65
6.10. Trayectorias de los iones de Ar^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 1	65
6.11. Ángulo de incidencia (eje vertical) de los iones de He^+ y Ar^+ con diferentes posiciones iniciales (eje horizontal) con una energía de 100 meV a una altura inicial de 1 cm. Gráfica obtenida con el modelo 1	66
6.12. Trayectorias de los iones de He^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 2	67
6.13. Trayectorias de los iones de Ar^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 2	67
6.14. Ángulo de incidencia (sobre el blanco) de los iones de He^+ y Ar^+ con diferentes posiciones iniciales sobre el blanco, con una energía de 100 meV a una altura inicial de 1 cm. El eje vertical representa el ángulo medido en grados y el eje horizontal representa la posición inicial medida en metros. Gráfica obtenida con el modelo 2	68
6.15. Gráfica de la energía cinética de los iones de He^+ como función del tiempo, el eje vertical es la energía cinética en eV, el eje horizontal es el tiempo medido en s.	68

6.16. Gráficas de la energía cinética de los iones de Ar^+ como función del tiempo, el eje vertical es la energía cinética en eV, el eje horizontal es el tiempo medido en s.	69
6.17. Trayectorias de los iones de He^+ con diferentes posiciones iniciales x_o y energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^8$ s. Gráfica obtenida con Mathematica	69
6.18. Trayectorias de los iones de Ar^+ con diferentes posiciones iniciales x_o y energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^8$ s. Gráfica obtenida con Mathematica	70
6.19. Trayectorias de electrones emitidos en diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).	71
6.20. Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.	71
6.21. Trayectorias de los iones incidentes de He con diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).	72
6.22. Trayectorias de los iones incidentes de Ar con diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).	73
6.23. Ángulo de incidencia de los iones de He con diferentes posiciones iniciales en el blanco, comparación entre los modelos 1 y 2	73
6.24. Ángulo de incidencia de los iones de Ar con diferentes posiciones iniciales en el blanco, comparación entre los modelos 1 y 2	74
6.25. Evolución temporal de la energía cinética de los iones incidentes de He con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.	74
6.26. Evolución temporal de la energía cinética de los iones incidentes de Ar con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.	75
6.27. Dependencia del rendimiento de <i>sputtering</i> con el ángulo de incidencia sobre la superficie para iones de argón con energías de 400 eV (a) y 800 eV (b) sobre un blanco de cobre [57].	76
6.28. Variación temporal y espacial de la densidad de electrones sobre el objetivo. Los datos que se muestran en los gráficos (a)–(d) se tomaron 40, 160, 280 y 640 μs después del encendido por pulso, respectivamente. Se registró un plasma de alta densidad en forma de rosquilla que se expande desde el blanco del magnetrón en una etapa temprana de la descarga. Más tarde, en el resplandor del plasma, observaron electrones capturados por la botella magnética formada por el magnetrón desequilibrado. [58]	77
A.1. Gráficas a) de la componente del campo magnético paralela a la superficie a diferentes alturas Z, b) del campo magnético perpendicular a la superficie a diferentes alturas Z; el eje horizontal representa la posición en X sobre la superficie (en mm) y el eje vertical el campo magnético medido en G. Realizadas por el grupo Plasmat del IIM, facilitada por el Dr. Stephen Muhl.	82
B.1. Ilustración gráfica del método de un paso.[62].	84

B.2. Representación gráfica de las pendientes estimadas empleadas en el método RK de cuarto orden[62]. 85

B.3. Representación gráfica de la partición en pequeñas fracciones de volumen para crear una malla para realizar los cálculos de la densidad. 89

B.4. Gráficas de la evolución temporal de cada coordenada de las trayectorias de los electrones en el intervalo de tiempo $\Delta t = 1.5$ ns, las variables x , y y z se encuentran normalizadas a $R=0.02m$, en a) se puede observar cuáles son las posiciones iniciales en el blanco, los colores correspondientes a cada posición inicial son los mismos en b) y c). 90

INTRODUCCIÓN

El uso de películas delgadas para potenciar las propiedades físicas y químicas de los materiales es una práctica sumamente común en todo el mundo. Las aplicaciones son muy diversas y van desde la microelectrónica hasta la ingeniería espacial [1]. Por ello, la demanda de películas de alta calidad en muchos sectores industriales ha ido en aumento, así como la necesidad de invertir en técnicas que logren los estándares requeridos.

1.1. Estructura de la tesis

La técnica de sputtering ha logrado ser establecida como el mejor proceso para el depósito de una amplia gama de recubrimientos. En el siguiente capítulo se abordan los elementos necesarios de física de plasmas para comprender el fenómeno de sputtering, en el tercer capítulo se describe este método de manera general y su importancia en la ciencia de materiales. Posteriormente, el capítulo cuatro se centra en el sistema de sputtering con magnetrón, sentando las bases teóricas para el estudio del atrapamiento de los electrones desarrollado en el quinto capítulo. Los resultados obtenidos se presentan y se discuten en el sexto capítulo para finalizar con las conclusiones y el posible trabajo futuro en el séptimo capítulo.

1.1.1. Motivación

En la fabricación de películas delgadas, diversos dispositivos experimentales tanto en depósito físico en fase vapor (PVD) como en depósito químico en fase vapor (CVD) emplean plasmas para mejorar el procesamiento. Sin embargo, algunos aspectos de la física de plasmas en aparatos que lo utilizan, no han sido explorados completamente.

En sistemas de sputtering con magnetrón, es particularmente importante el atrapamiento de los electrones; realizar un estudio de este fenómeno puede ayudar a tener un mayor control del proceso y la calidad de la película. Esto a su vez puede ayudar a mejorar los costos de producción entre otras cosas.

Hipótesis

Es posible modelar el atrapamiento de los electrones mediante un estudio que emplea únicamente la fuerza de Lorentz (fuerza electromagnética) en un sistema de sputtering con magnetrón, obteniendo así las trayectorias de los electrones sobre el blanco y a partir de ellas obtener la densidad de plasma. Con esto se puede verificar de manera teórica la localización del patrón de erosión y hacer un estudio con resultados publicados sobre el impacto de este patrón de erosión en el depósito producido por sputtering con magnetrón.

1.1.2. Objetivos

Objetivo general

Desarrollar tres modelos que permitan estudiar el atrapamiento de los electrones secundarios en un sistema de sputtering con magnetrón cuyos resultados puedan compararse y que sirvan como base para determinar cuál es el comportamiento de las trayectorias de los electrones para poder confirmar la hipótesis.

El primer modelo emplea las ecuaciones de aceleración constante incorporadas en el sistema de ecuaciones diferenciales descrito por la fuerza de Lorentz, el segundo modelo no hace tal implicación de aceleración constante y resuelve de manera numérica mediante el método RK4 el sistema de ecuaciones. En el tercer modelo se hace uso del software **Mathematica** para dar solución de manera paramétrica al sistema.

Objetivos específicos

- Utilizando teoría electromagnética, deducir el sistema de ecuaciones con el cual se puedan desarrollar los tres modelos para simular las trayectorias de los electrones secundarios dentro del plasma.
- Determinar la distribución de la densidad del plasma a partir de dicha simulación.
- Establecer la relación entre el atrapamiento de los electrones y el depósito producido por sputtering con magnetrón.

Objetivos secundarios

- Comparar los tres modelos para establecer sus diferencias y sus fortalezas.
- Explotar los modelos generados para obtener otros resultados que puedan ser empleados en el estudio de un plasma en un sistema de sputtering con magnetrón.

1.1.3. Metodología

- Revisión de bibliografía sobre sputtering, profundizando en lo referente al sistema de sputtering con magnetrón, su funcionamiento, aplicaciones y la física del plasma producido en dicho sistema.

- Desarrollo de las ecuaciones de las trayectorias de los electrones en el plasma producido en un sistema de magnetrón a partir de la fuerza de Lorentz.
- Implementación de las ecuaciones en tres modelos distintos para la simulación de las trayectorias de los electrones secundarios emitidos del cátodo de un sistema de magnetrón.
- Establecimiento de las condiciones iniciales apropiadas para que los resultados obtenidos puedan ser corroborados experimentalmente.
- Cálculo de la distribución espacial de los electrones para la determinación de la densidad del plasma formado.
- Comparación de las trayectorias de iones y electrones obtenidas entre los tres modelos.
- Cotejo de los resultados teóricos con resultados experimentales obtenidos en diversas fuentes.
- Correlación entre los resultados obtenidos del atrapamiento de electrones y el depósito producido por *sputtering* con magnetrón.

1.2. Glosario de términos

Adsorción Es un proceso ya sea físico o químico mediante el cual una partícula (átomo, ion, molécula) se adhiere o es atrapada en una superficie.

Anodización Técnica para modificar la superficie de materiales por medio de procesos electroquímicos [2]

Colisión elástica Es una colisión en la que hay conservación de la energía cinética y momento lineal.

Desorción Es un proceso mediante el cual una partícula (átomo, ion, molécula) es expulsada de una superficie.

Estructura cristalina Es una estructura ordenada presente en sólidos, posee patrones de repetición que idealmente abarcan todo el espacio.

Fisorción Es un proceso físico mediante el cual un elemento o compuesto químico se adhiere a una superficie conservando su naturaleza química.

Longitud de Debye Es la longitud característica de un plasma, es la distancia crítica a la que el plasma ya puede considerarse neutral.

Impedancia Es la resistencia al paso de una corriente eléctrica.

Magnetrón Dispositivo de campo magnético.

Neutralización Auger Es un proceso mediante el cual un ion cercano a una superficie atrapa un electrón, transfiriendo su energía de neutralización a otro electrón del sólido [3]

Nitruración iónica Es un proceso de tratamiento térmico de los metales mediante el cual pueden ser modificadas diversas características del material. Se realiza dentro de un reactor donde se genera un plasma cuyos iones reaccionan con los iones metálicos y se implantan en la superficie [4].

Película delgada Es un recubrimiento de un material determinado sobre un sustrato de otro material; para que el recubrimiento sea considerado una película delgada, el proceso de fabricación debe ser mediante un método de condensación átomo por átomo o bien molécula por molécula¹, y el depósito resultante debe ser tal que una de sus dimensiones sea despreciable a comparación de las otras dos [5].

Perfl de erosión (*racetrack*) zona erosionada formada en el blanco dentro de un sistema de *sputtering* con magnetrón debida al bombardeo.

Potencial de ionización Es la cantidad mínima necesaria de energía para remover el electrón más débilmente ligado de un átomo de un gas.

Plasma Es un gas ionizado cuasi neutral que posee comportamiento colectivo.

PVD Acrónimo: *Physical Vapor Deposition*, en español es Depósito Físico en fase Vapor.

Quimisorción Es un proceso mediante el cual un elemento o compuesto químico se adhiere a una superficie mediante una reacción química.

Sputtering Es una técnica de depósito de películas delgadas, en español frecuentemente se le llama “pulverización catódica” o “erosión catódica”, aunque estrictamente hablando el fenómeno de sputtering no se trate de pulverización ni erosión. La palabra en español empleada como traducción es “espurreo”, pero frecuentemente no se emplea.

Sputtering con magnetrón Es una técnica de sputtering que implementa campos magnéticos como medio para localizar el bombardeo.

Vaina catódica (*Cathode Sheat*) es una región luminosa en la que se generan electrones secundarios con la suficiente energía para ionizar el gas del plasma.

¹También puede ser ion por ion

PLASMAS

Cerca del 99 % de la materia en el universo observable se encuentra en estado de plasma, que es un gas cuyos protones y electrones se encuentran separados al menos parcialmente, es decir, está ionizado. En un gas a baja presión, se tiene una variedad de energías térmicas repartidas entre todos los átomos; para que dicho gas pueda ser ionizado se requiere que estos colisionen con electrones que posean suficiente energía; mientras menor sea la energía térmica promedio, menor será la probabilidad de que ocurra la ionización. Un plasma es un gas cuasineutro que tiene partículas cargadas que presentan un comportamiento colectivo.

2.1. Conceptos básicos de la física de plasmas

Al componerse de partículas cargadas, un plasma puede manipularse relativamente fácil mediante campos magnéticos y eléctricos, además conduce en buena medida la electricidad. Existen plasmas de diferente naturaleza y con propiedades diversas. Para definir un plasma es necesario establecer apropiadamente los parámetros que rigen su comportamiento, así se puede escoger la descripción más acertada para cualquier sistema que involucre plasmas.

2.1.1. Definición y características del plasma

Dado que existe un cierto grado de ionización en cualquier gas, no cualquier gas que se encuentre ionizado puede llamarse plasma. En [6] se define al plasma como *un gas cuasineutral de partículas cargadas y neutras que exhibe un comportamiento colectivo*.

Como el plasma está compuesto por partículas cargadas, a pesar de ser cuasineutral, gracias al movimiento de las partículas, se originan zonas de concentración de carga positiva o negativa que a su vez originan campos eléctricos y magnéticos que provocan movimiento en otras regiones del plasma, a esto se le llama comportamiento colectivo.

Otra característica del comportamiento del plasma es su capacidad para aislar potenciales eléctricos (ver figura 2.1) formando una nube de carga opuesta al rededor de la carga introducida, a esto se le conoce como apantallamiento de Debye. El grosor de la nube depende de la energía térmica²

²El concepto de energía se discutirá en la siguiente sección

de los electrones T_e (en unidades de eV) y de la densidad del plasma³ n (en unidades de cm^{-3}) conforme a la expresión:

$$\lambda_D \approx \kappa \left(\frac{T_e}{n_e} \right)^{1/2}, \quad (2.1)$$

donde $\kappa = 743 \text{ eV}^{-1/2} \text{ cm}^{3/2}$ es una constante [7] y λ_D es conocida como *longitud de Debye*.

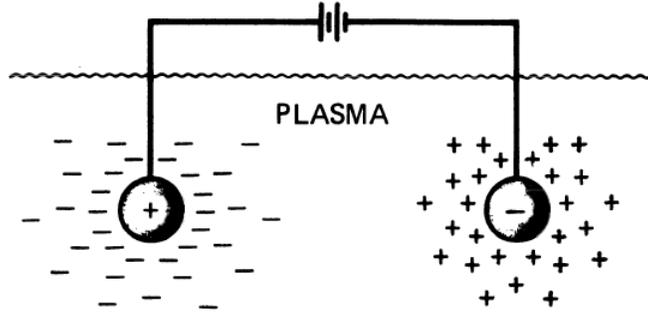


Figura 2.1: Apantallamiento de Debye [6].

La longitud de Debye delimita una región que es conocida como “esfera de Debye”, más allá de ella el plasma permanece neutral, por lo que la longitud de Debye es una medida de qué tanto puede penetrar un campo eléctrico externo. Así, mientras más partículas se encuentren dentro de la esfera, es menos probable que debido a colisiones, se origine una fuerza resultante significativa sobre cualquier partícula dada. Por lo tanto, λ_D es una medida del dominio de las interacciones colectivas sobre las colisiones [8]. Una de las interacciones colectivas más fundamentales son las oscilaciones del plasma creadas debido a un desequilibrio de carga [9]. Los fuertes campos electrostáticos que impulsan a los electrones a restablecer la neutralidad provocan oscilaciones alrededor de la posición de equilibrio a una frecuencia característica llamada “frecuencia de plasma” ω_p , que es diferente para electrones (ω_{pe}) y iones (ω_{pi}), para electrones se calcula como

$$\omega_{pe} = \frac{(k_B T_e / m_e)^{1/2}}{\lambda_D} = \left(\frac{n_e e^2}{m_e \epsilon_0} \right)^{1/2} \simeq 56.4 n_e^{1/2} \text{ s}^{-1}, \quad (2.2)$$

donde m_e es la masa del electrón y ϵ_0 es la permitividad del vacío y para iones se tiene

$$\omega_{pi} = \left(\frac{n_i (Ze)^2}{m_i \epsilon_0} \right)^{1/2} \simeq 1.32 Z \left(\frac{n_i}{A} \right)^{1/2} \text{ s}^{-1}, \quad (2.3)$$

donde Z es la carga y A es el número atómico.

Entonces para un gas ionizado, si su frecuencia de plasma es ω y la frecuencia promedio entre colisiones es τ , se requiere que $\omega\tau > 1$ para que pueda llamarse plasma, además de que la longitud de Debye debe ser un parámetro estadísticamente válido, es decir, si el sistema tiene una escala de longitud L , se requiere que $L \gg \lambda_D$ [9].

³En física de plasmas, la densidad n se define como el número de partículas ionizadas por unidad de volumen, con la condición de cuasineutralidad, la densidad de los electrones n_e es igual a la densidad de los iones n_i , y en general $n_e \simeq n_i \simeq n$

2.1.2. Conceptos de velocidad, energía y temperatura

Para cualquier gas en equilibrio térmico a temperatura T , la energía promedio por partícula⁴ es $3k_B T/2$, donde $k_B = 1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ es la constante de Boltzmann y T es la temperatura (en grados Kelvin) [10]. Existen partículas con diversas velocidades posibles en un gas que se encuentra en equilibrio térmico, la distribución más probable de estas velocidades es la denominada distribución maxwelliana (o Maxwell-Boltzmann)[15]. Para un sistema tridimensional, esta distribución está dada por

$$f(u) = Au^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{mu^2}{k_B T}\right) ; \quad (2.4)$$

Donde A es una constante. El número de partículas por unidad de volumen que poseen una velocidad cuya magnitud es $u = \sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}$ y se encuentra en un intervalo infinitesimal centrado en u es $f(u)$. La energía cinética es $\frac{1}{2}mu^2$ y la constante A está relacionada con la densidad n (número de partículas por unidad de volumen) que se encuentra dada por

$$n = \int_{-\infty}^{\infty} f(u) d^3u , \quad (2.5)$$

mientras que A se puede determinar a partir de (2.4) y (2.5) como sigue

$$A = 4\pi n \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} . \quad (2.6)$$

El ancho de la distribución maxwelliana dada en la ecuación (2.4) está caracterizado por la temperatura T , por otra parte, unidimensionalmente la energía cinética promedio de las partículas puede ser calculada de la distribución como

$$\langle E \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} mu^2 f(u) d^3u}{\int_{-\infty}^{\infty} f(u) d^3u} , \quad (2.7)$$

que en el caso tridimensional, el resultado es $\frac{3}{2}k_B T$.

Es esta relación entre energía y temperatura lo que origina que se emplee el uso de la temperatura en términos de energía usando la conversión $k_B T$, es decir, para un plasma a una temperatura de $11600K$ corresponde una energía de $1eV$, por lo que será común hablar de una plasma a $1 eV$ de temperatura⁵. Por otra parte, frecuentemente ocurre que se tengan diferentes distribuciones maxwellianas para iones y electrones, lo que origina que se tengan temperaturas diferentes para iones T_i y electrones T_e . Aunque cada especie puede tener así su propio equilibrio térmico, con el tiempo la tendencia sería que las temperaturas se igualaran.

2.1.3. Grado de ionización

Un plasma está compuesto de iones, electrones y átomos neutros, la mayoría de los plasmas de laboratorio están ionizados solo parcialmente. Un plasma se obtiene arrancado los electrones

⁴Se toma $\langle E \rangle = \frac{1}{2}k_B T$ por cada grado de libertad, por lo tanto en un caso tridimensional $\langle E \rangle = \frac{3}{2}k_B T$ [10]

⁵Temperatura promedio, ya que puede haber diferentes temperaturas en diversas regiones del plasma

de átomos neutros quedando iones con carga positiva y electrones con carga negativa. El grado de ionización es el número relativo de iones (n_i) y átomos neutros (n_a). En el caso más simple de equilibrio termodinámico, el grado de ionización depende solo de la temperatura [11], pero es posible dar una expresión general en términos del *potencial de ionización* I , por tanto

$$\frac{n_i}{n_a} = \frac{g_{i+e}}{g_a} e^{-I/k_B T}, \quad (2.8)$$

donde $g_{i+e} = g_e g_i$ es el número de estados posibles ión-electrón y g_a del átomo. Usualmente $g_a \sim g_i \sim 1$, mientras que

$$g_e \sim \frac{(k_B T m_e)^{3/2}}{n_e h^3}, \quad (2.9)$$

donde h es la constante de Planck. Al combinar las ecuaciones (2.8) y (2.9), junto con la suposición de que $g_a \sim g_i \sim 1$ se obtiene

$$\frac{n_i n_e}{n_a} \sim \frac{(k_B T m_e)^{3/2}}{h^3} e^{-I/k_B T}. \quad (2.10)$$

Un caso particular de esta ecuación se obtiene al suponer que el gas se encuentra ionizado únicamente una vez, por lo que se tiene la misma cantidad de iones y electrones $n_i = n_e$, con lo que se obtiene la ecuación de Saha

$$\frac{z^2}{1-z} \sim \frac{(k_B T m_e)^{3/2}}{n h^3} e^{-I/k_B T}, \quad (2.11)$$

donde $z = n_i/n$ y n es el número de densidad de átomos neutrales; cuando se tiene una n baja entonces $1-z \ll 1$, en este caso el plasma está completamente ionizado.

2.1.4. Colisiones principales en un plasma: Elásticas e Inelásticas

La energía térmica, la presión y la densidad de plasma son algunos de los parámetros que se suelen usar para caracterizarlo. Las colisiones entre los componentes del gas (electrones y partículas pesadas) lo mantienen en un estado ionizado, es decir, sostienen el plasma, además influyen en la densidad de las especies reactivas y el flujo de partículas.

Las colisiones que involucran especies producidas por plasma conllevan un proceso de intercambio de energía que es de vital importancia. En un plasma, la energía se transporta dentro de sí mismo, hacia los electrodos (si los hay) y hacia las superficies inmediatas. Se puede transmitir energía de un campo eléctrico a un gas mediante una descarga de plasma, se aprovecha esta transmisión energética para promover reacciones químicas en el gas o para producir efectos como reordenamiento o pulverización catódica (*sputtering*) en una superficie [12].

Hay dos parámetros relacionados con las probabilidades de colisión en fase gaseosa: el camino libre medio λ y la sección eficaz de colisión σ que se definen generalmente mediante una relación simple que trata a las partículas como esferas duras o impenetrables [13]. En el caso de un gas de densidad N a través del cuál pasan partículas de una cierta velocidad igual a aquélla de las moléculas del gas, el camino libre medio se define como

$$\lambda = \frac{1}{\sqrt{2} N \sigma}, \quad (2.12)$$

sin embargo, cuando el proyectil es una partícula que se mueve hacia una partícula de gas que está en reposo, λ es

$$\lambda = \frac{1}{N\sigma} . \quad (2.13)$$

Para este trabajo son de especial interés las colisiones entre electrones y átomos (o iones) de Argón, la sección eficaz de estas colisiones varían conforme a la energía del electrón, de la figura 2.2 se puede observar que para energías menores al potencial de ionización del argón (15.75 eV) predominan las colisiones elásticas y en menor medida, colisiones que producen argón excitado.

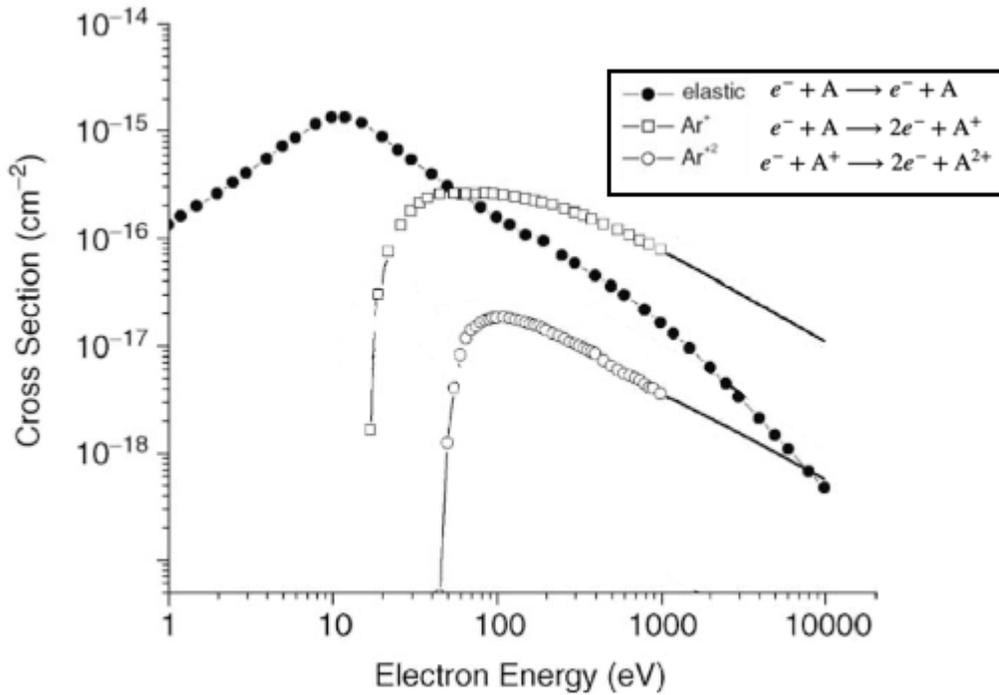


Figura 2.2: Sección eficaz de colisión para electrones en argón. Se representan las colisiones con productos Ar^+ (argón ionizado), Ar^{+2} (argón doblemente ionizado). Adaptación de [13].

Se puede estudiar clásicamente la colisión entre dos partículas de masas m_i y m_t , suponiendo que m_t se encuentra inicialmente estacionaria y que m_i choca con velocidad v_i en un ángulo θ respecto a la línea que une los centros de m_i y m_t en el momento de la colisión (ver figura 2.3). Por conservación del momento lineal se tiene

$$m_i v_i \cos \theta = m_i u_i + m_t u_t , \quad (2.14)$$

donde u_i y u_t son las velocidades (sobre la vertical) después de la colisión de las masas m_i y m_t respectivamente. Como también se conserva la energía se tiene

$$\frac{1}{2} m_i v_i^2 = \frac{1}{2} m_i (u_i^2 + v_i^2 \sin^2 \theta) + \frac{1}{2} m_t u_t^2 \quad (2.15)$$

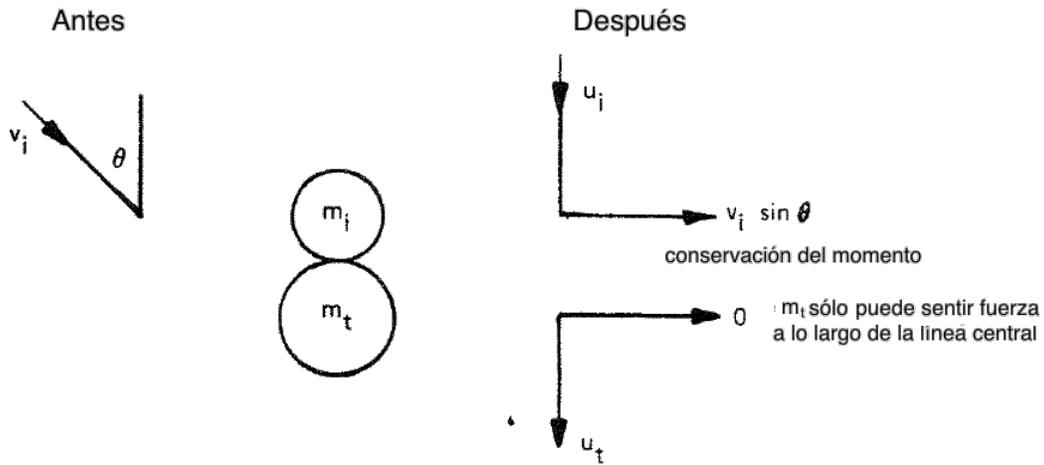


Figura 2.3: Componentes de la velocidad antes y después de una colisión elástica [14].

Al despejar u_i de la ecuación 2.14 se tiene

$$u_i = v_i \cos \theta - \frac{m_t}{m_i} u_t ,$$

al sustituir esto en la ecuación 2.15, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} m_i v_i^2 &= \frac{1}{2} m_i \left(\left[v_i \cos \theta - \frac{m_t}{m_i} u_t \right]^2 + v_i^2 \sin^2 \theta \right) + \frac{1}{2} m_t u_t^2 \\ \frac{1}{2} m_i v_i^2 &= \frac{1}{2} m_i v_i^2 \cos^2 \theta - m_t u_t v_i \cos \theta + \frac{m_t^2}{2 m_i} u_t^2 + \frac{1}{2} m_i v_i^2 \sin^2 \theta + \frac{1}{2} m_t u_t^2 \\ m_i^2 v_i^2 &= m_i^2 v_i^2 (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) - 2 m_i m_t u_t v_i \cos \theta + m_t^2 u_t^2 + m_i m_t u_t^2 \end{aligned}$$

Usando el hecho de que $\cos^2 \theta + \sin^2 \theta = 1$, simplificando y agrupando términos, la ecuación anterior se puede escribir como

$$2 m_i m_t u_t v_i \cos \theta = m_t^2 u_t^2 + m_i m_t u_t^2$$

o bien

$$m_i v_i^2 \cos^2 \theta = \frac{m_i}{m_t^2} (m_i v_i \cos \theta - m_t u_t)^2 + m_t u_t^2 . \quad (2.16)$$

La fracción de energía transferida de la masa m_i a la masa m_t es

$$\begin{aligned} \frac{E_t}{E_i} &= \frac{\frac{1}{2} m_t u_t^2}{\frac{1}{2} m_i v_i^2} = \frac{m_t}{m_i v_i^2} \left(\frac{2 m_i v_i}{m_t + m_i} \cos \theta \right)^2 \\ &= \frac{4 m_i m_t}{(m_t + m_i)^2} \cos^2 \theta . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Para esta deducción no fue necesario conocer la naturaleza detallada de la interacción entre las dos masas, por lo que el resultado puede ser cierto para dos átomos ya que las leyes de conservación

de la cantidad de movimiento y la energía son universales. La única suposición implícita es que las energías potenciales de los dos cuerpos que chocan son las mismas antes y después de la interacción; es decir, se trata de una *colisión elástica*.

Esto quiere decir que puede haber una transferencia de energía muy eficiente en colisiones entre átomos del mismo gas y explica por qué, las velocidades del 90% de los átomos de gas en condiciones de estado estacionario están dentro de un factor de dos de la velocidad media [14].

El término $4m_i m_t / (m_i + m_t)^2$ se conoce como función de transferencia de energía, si $m_i \ll m_t$, entonces la función de transferencia se convierte en sólo $4m_i / m_t$, la relación de masa hace que la función de transferencia de energía tenga un valor pequeño, esto significa que muy poca energía puede transferirse del electrón a la molécula de gas. En cambio, suponiendo que una partícula muy pesada golpea una partícula muy ligera en una colisión frontal, es decir, $m_i \gg m_t$ entonces la función de transferencia de energía se simplifica a $4m_t / m_i$ entonces se tiene

$$\frac{\frac{1}{2}m_t u_t^2}{\frac{1}{2}m_i v_i^2} = \frac{4m_t}{m_i},$$

lo que implica que

$$u_t = 2v_i,$$

este resultado indica que la partícula ligera adquiere una velocidad igual al doble de la velocidad de impacto.

En una colisión elástica como lo es la de un electrón con un átomo, el factor de transferencia de energía mencionado anteriormente es despreciable, gracias a que la masa del electrón es significativamente más pequeña que la de cualquier átomo. Por lo que en este tipo de colisiones se considera que el electrón se “refleja” con la misma velocidad antes del impacto y el átomo no se ve afectado por la acción.

Por otra parte, una de las colisiones inelásticas de gran interés para este trabajo es la ionización por impacto de electrón (ver figura 2.4), en la que un electrón remueve otro electrón de un átomo mediante una colisión en la que no se conserva la energía cinética. Por ejemplo, la producción de un ion positivo de argón mediante la reacción

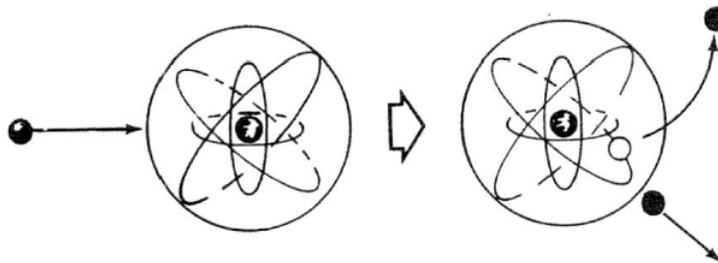


Figura 2.4: Ionización por impacto de electrón [14].

otro resultado posible es que el electrón no expulse otro electrón del átomo sino que le transfiera energía suficiente para saltar a un nivel energético permitido con lo cuál se obtiene un estado excitado, para el ejemplo con argón la reacción sería la siguiente



además, los átomos pueden pasar del estado excitado a su estado base mediante un proceso de relajación, en el que el electrón baja de nivel energético emitiendo un fotón.

Otro fenómeno posible con colisiones inelásticas es la *recombinación*, en la que un electrón choca con un ion y resulta absorbido dando lugar a un átomo neutro, pero haciendo el análisis de conservación del momento y la energía para una colisión entre dos cuerpos (ion y electrón), se obtienen soluciones imaginarias para la velocidad [14]. Este problema ya no existe cuando se involucra un tercer cuerpo, ya sea otro átomo o incluso la pared de una cámara de plasma.

2.2. Ecuaciones de movimiento

Se sabe que un plasma es un gas ionizado, sin embargo para que cualquier gas ionizado pueda llamarse plasma, debe ser cuasineutral y sus partículas tanto cargadas como neutras deben exhibir un comportamiento colectivo.

Sobre una partícula o molécula neutra, no hay fuerza electromagnética neta, además la fuerza de gravedad es insignificante, por lo que dentro del plasma es libre de moverse sin ser perturbada hasta que choca con otra molécula; son estas colisiones las que controlan su movimiento.

La situación es totalmente diferente con partículas cargadas; en un plasma, a medida que las cargas se mueven, pueden generar concentraciones locales de carga positiva o negativa, que dan lugar a campos eléctricos. El movimiento de cargas también genera corrientes y, por tanto, campos magnéticos. Estos campos afectan el movimiento de otras partículas cargadas lejanas [15].

De manera general, la fuerza que experimenta una carga q estará dada por la fuerza de Lorentz

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) . \quad (2.20)$$

Si $\mathbf{E} = 0$ se tiene únicamente la fuerza magnética que provocará en las partículas movimiento circular. El radio de la órbita se conoce como *radio de Larmor* [15]

$$r_L = \frac{v_{\perp} m}{|q|B} , \quad (2.21)$$

y su frecuencia como la *frecuencia de ciclotrón* ω_c

$$\omega_c = \frac{|q|B}{m} , \quad (2.22)$$

donde m es la masa de la partícula cargada, q su carga y B la magnitud del campo magnético.

2.2.1. Movimiento de partículas en líneas de campo magnético curvas

Existen diversas geometrías para las líneas de campo magnético. En la figura 2.5 se muestra un campo magnético curvo y un campo eléctrico en dirección $-z$, las partículas inmersas en este tipo de configuración poseen una “velocidad de deriva” [16].

La expresión para la fuerza de Lorentz (2.20), puede ser escrita como

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) , \quad (2.23)$$

que es una ecuación diferencial de \mathbf{v} cuya solución está dada por $\mathbf{v} = \mathbf{v}_P + \mathbf{v}_H$ donde \mathbf{v}_P es la solución particular, es decir

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

y \mathbf{v}_H es la solución a la ecuación homogénea⁶, por lo tanto $\dot{\mathbf{v}}_H = 0$, o bien

$$q(\mathbf{E} + \mathbf{v}_H \times \mathbf{B}) = 0 . \quad (2.24)$$

La solución particular indica la evolución del movimiento ya que depende del tiempo, mientras que la solución a la homogénea es una constante relacionada con la deriva anteriormente mencionada. Eliminando q de 2.24 y realizando el producto vectorial con \mathbf{B} se tiene que

$$\mathbf{E} \times \mathbf{B} = \mathbf{B} \times (\mathbf{v}_H \times \mathbf{B}) = \mathbf{v}_H B^2 - \mathbf{B}(\mathbf{v}_H \cdot \mathbf{B}) . \quad (2.25)$$

Al ser un producto vectorial, necesariamente el lado izquierdo de la ecuación ($\mathbf{E} \times \mathbf{B}$) es perpendicular a \mathbf{B} , mientras que en el lado derecho el término $\mathbf{B}(\mathbf{v} \cdot \mathbf{B})$ es paralelo a \mathbf{B} , por lo tanto,

$$\mathbf{E} \times \mathbf{B} = \mathbf{v}_H B^2$$

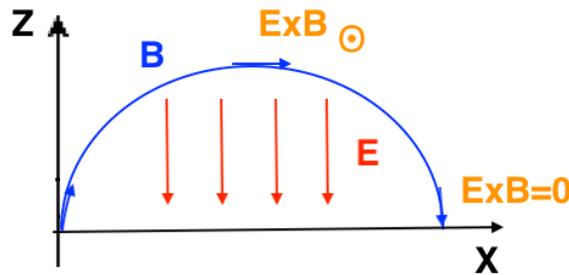


Figura 2.5: Aparición de derivas $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$. En un campo magnético curvo como este se tiene que sobre la superficie es paralelo al campo eléctrico por lo que la deriva es cero, mientras que en su punto más alejado de la superficie, el campo magnético es perpendicular al eléctrico y ahí la deriva se encuentra perpendicular a ambos (en dirección $-\hat{y}$).

⁶En ecuaciones diferenciales, la ecuación homogénea es siempre de la forma $f(x) = 0$, donde $f(x)$ es la derivada de cualquier orden de x

Identificamos esta solución a la homogénea como la velocidad de deriva (\mathbf{v}_E), es decir

$$\mathbf{v}_E = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} . \quad (2.26)$$

En [15] se define de forma más general la velocidad de deriva ocasionada por una fuerza \mathbf{F} como

$$\mathbf{v}_f = \frac{1}{q} \frac{\mathbf{F} \times \mathbf{B}}{B^2} . \quad (2.27)$$

Dependiendo de su magnitud, la velocidad de deriva puede modificar las trayectorias de las partículas significativamente, por ejemplo evitando que los electrones se muevan en trayectorias circulares alrededor del campo magnético.

2.3. Procesos asistidos por plasmas

Un plasma frío cuya temperatura típica es del orden de unos miles de grados [17] posee una energía mayor que la de los compuestos de diversas reacciones químicas ordinarias. Es por ello, que los plasmas pueden servir para asistir algunos procesos, favoreciendo ciertas reacciones químicas.

Los plasmas generan radiación electromagnética de diferentes longitudes de onda, algunos van desde el infrarrojo hasta el ultravioleta en el espectro electromagnético y otros pueden emitir microondas⁷ [18]. Estas longitudes de onda emitidas pueden ser aprovechadas para modificar superficialmente diversos materiales, ya que las moléculas se excitan por acción de la radiación y sus actividad química se dispara.

Mediante esta técnica, es posible disminuir la temperatura que se requiere para que una reacción química ocurra y en algunos casos, también se pueden llevar a cabo fácilmente reacciones químicas, que de otro modo serían imposibles termodinámicamente [19]. Los procesos de plasma son especialmente efectivos para reacciones que tienen grandes energías de activación.

Cuando las partículas cargadas, aceleradas por campos eléctricos o magnéticos en el plasma impactan sobre superficies sólidas, varios tipos de reacciones químicas pueden ser propiciadas, tales como *nitruración iónica*, la *anodización* por plasma, etc.

El bombardeo de iones afecta las reacciones entre átomos o moléculas que se adhieren en superficies sólidas. Los iones acelerados por grandes campos eléctricos a baja presión, provocan la pulverización catódica de los materiales objetivo, ya que al momento de la colisión pueden tener energías del orden de 100 eV [18]. En el siguiente capítulo se hablará con mayor detalle de este proceso.

2.3.1. Mediciones experimentales en plasmas

La naturaleza del movimiento de las partículas neutras en el plasma influye en muchos procesos que tienen lugar en él, por lo tanto, cualquier examen detallado de un plasma incluye la determinación de las energías del movimiento de los átomos y moléculas. Como ya se mencionó,

⁷Los electrones son capaces de oscilar en frecuencia de microondas gracias a su masa tan pequeña [18].

la temperatura del plasma está relacionada con la energía térmica de las partículas, pero también está relacionada con otros parámetros como la velocidad y la presión; esta última se relaciona con las colisiones entre partículas y por tanto con la transferencia energética a través de ellas.

La probabilidad de intercambio de energía depende de las especies involucradas, en la figura 2.6 se grafica la tendencia de las temperaturas de los electrones y átomos neutros de una mezcla de mercurio y otros gases [20]; se muestra como a baja presión (debido a que hay pocas colisiones) las temperaturas T_e y T_g de los electrones y del gas respectivamente no se encuentran en equilibrio, pero a medida que se esta aumenta, crece la transferencia de energía y se logra el equilibrio entre estas dos temperaturas.

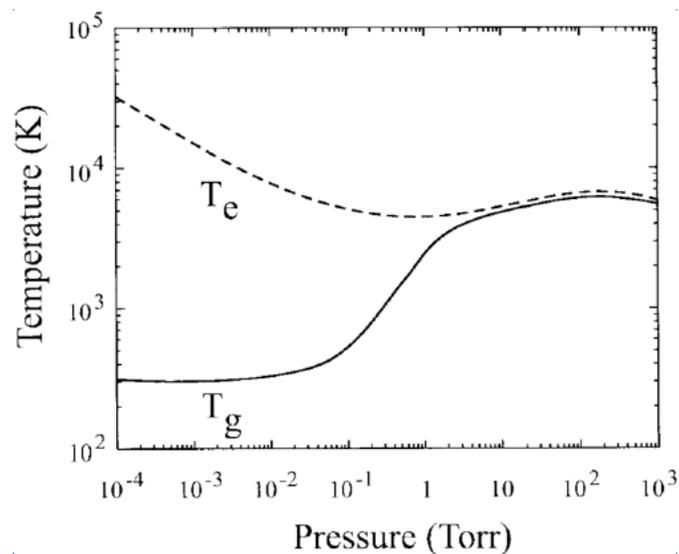


Figura 2.6: Gráfica de la temperatura de los electrones y del gas (del plasma) como función de la presión del plasma para una corriente constante. [20]

Existen diversos métodos para medir la temperatura del plasma, muchos de ellos son indirectos, puesto que no están relacionados con la determinación de la distribución de velocidades de las partícula de manera directa [21].

Una de las herramientas más antiguas y una de las más útiles para diagnosticar un plasma es una sonda de metal, se inserta en la descarga gaseosa y se encuentra cargada positiva o negativamente para extraer la corriente de electrones o iones (ver figura 2.7). Estas sondas suelen denominarse sondas Langmuir. Como ocurre con cualquier otro electrodo, la sonda esta rodeada por una vaina, suele ser bastante pequeña y, en condiciones adecuadas, sólo produce pequeñas perturbaciones locales del plasma [22]. Las sondas de Langmuir son de especial interés para este trabajo, ya que gracias a su simplicidad pueden servir para confirmar los resultados teóricos de manera experimental.

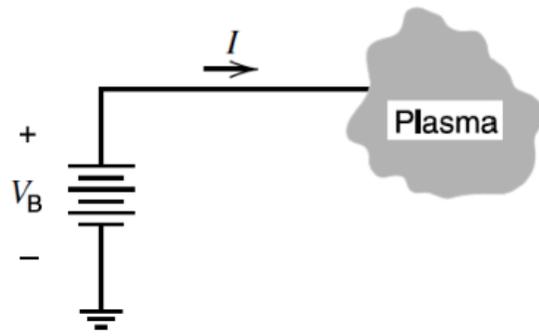


Figura 2.7: Definición de corriente y voltaje en una sonda de Langmuir [22]

3

SPUTTERING

El fenómeno de erosión catódica o “sputtering” como se conoce en inglés fue reportado por primera vez en el año de 1852 por el científico inglés William Robert Grove [26]; él utilizó una campana de cristal en la que creó una atmósfera aproximadamente de 10 torr mediante una bomba manual de vacío y colocó un cátodo de cobre recubierto con plata con la intención de revestir la superficie que actuaba como ánodo con una película de plata. Dicho de una manera simple, lo que sucedió fue que al aplicar una diferencia de potencial entre cátodo y ánodo, los iones de plata fueron arrancados, acelerados e implantados en la superficie.

Cualquier partícula atómica energéticamente adecuada que choque contra una superficie puede causar sputtering [27], pero las aplicaciones más relevantes son las realizadas mediante bombardeo de iones [28].

3.1. Interacción de iones y superficie

Cuando un ion impacta la superficie del material (blanco), hay una probabilidad de que ocurra cualquiera de los siguientes eventos [14]:

- El ion puede ser reflejado, en la mayoría de los casos es neutralizado en el proceso.
- El impacto del ion puede provocar que el blanco expulse un electrón (electrón secundario).
- El ion puede ser implantado en el blanco. Este fenómeno puede ser aprovechado en el dopaje de ciertos materiales que requieren impurezas específicas.
- El impacto del ion puede originar un reacomodo estructural en el blanco, es decir, pueden producirse vacancias, intersticios, etc.
- El impacto del ion puede producir una serie de colisiones entre los átomos del blanco que concluya en la expulsión de uno de ellos, es decir produce *sputtering*.

En la figura 3.1 se puede observar que para que haya un átomo expulsado o *sputtering*, se requiere de una colisión en cascada; sin embargo, al rededor de solo 1 % de la energía incidente es aprovechada para expulsar átomos.

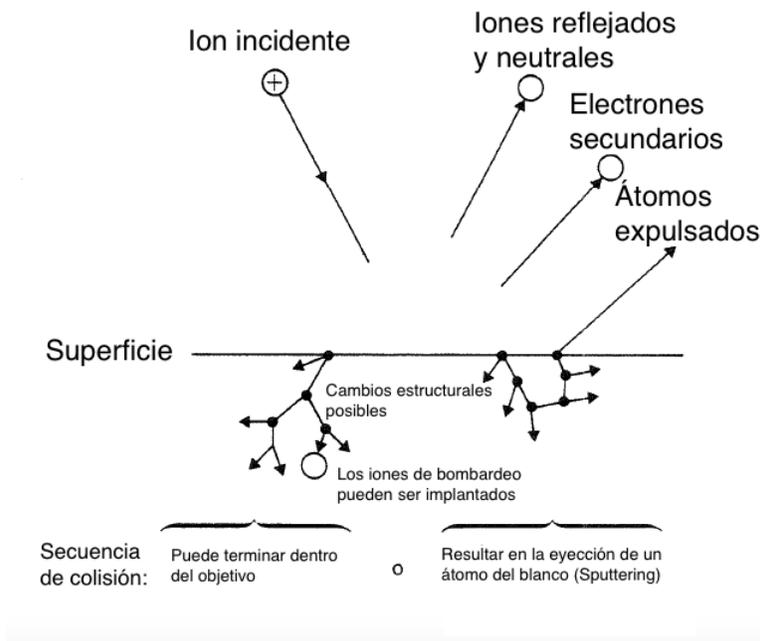


Figura 3.1: Interacción entre ion y superficie [14].

Los núcleos de los átomos del blanco se encuentran apantallados por una nube de electrones. El tipo de colisión entre la partícula incidente y la superficie será determinada por la energía del ion incidente y el grado de apantallamiento de los núcleos [29].

3.2. Cinética del bombardeo

En el rango de energía relevante para hacer *sputtering*, la interacción entre iones y átomos de la superficie del blanco puede verse como una serie de colisiones binarias; los efectos del apantallamiento electrónico llevan a que las colisiones sean tratadas como *colisiones de Coulomb* [30]. El potencial de interacción entre el ion incidente de carga z_1 y el átomo del blanco con carga nuclear z_2 estará dada por:

$$V = \pm \frac{z_1 z_2 e^2}{r} \exp(-r/a) , \quad (3.1)$$

donde r es la distancia entre las partículas y a es el radio de apantallamiento.

Existe un umbral de *sputtering* observado por primera vez en 1923. El cátodo termoiónico $T_h - W$ en los tubos rectificadores de gas se dañaba por el bombardeo con iones cuando la energía de bombardeo de los iones excedía un valor crítico, que era del orden de 20 - 30 eV[29]. Otros autores han situado los valores de umbral entre 50 y 300 eV [18]. La energía umbral es muy sensible a la contaminación de la superficie del cátodo. Además, el ángulo de incidencia de los iones y la orientación del cristal de los materiales del cátodo también cambian los valores de umbral. La figura 3.2 muestra una variación típica del rendimiento de *sputtering* con la energía incidente de los iones. Se observa que en una región de baja energía, existe un umbral para la pulverización catódica y el

rendimiento de sputtering muestra un valor máximo en una región de alta energía.

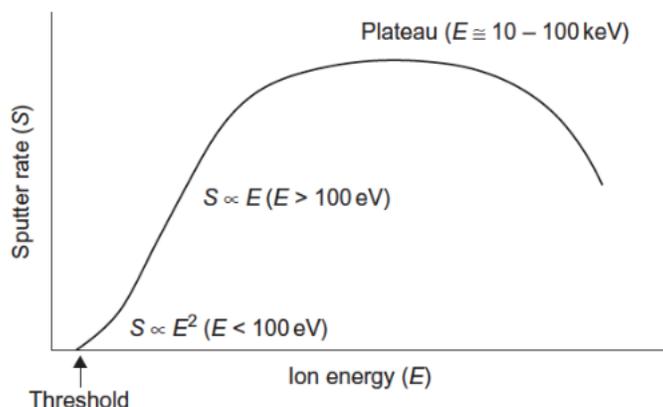


Figura 3.2: Rendimiento de sputtering como función de la energía incidente de los iones [29].

En [29] describen el primer experimento confiable para medir el rendimiento de *sputtering* en el que utilizaron diferentes gases de trabajo y blancos con lo que obtuvieron que el rendimiento de *sputtering* está dado por:

$$Y = 10^5 \frac{W}{AIt}, \quad (3.2)$$

en donde W denota la pérdida (en masa) del material del blanco que depende tanto de su composición como del gas de trabajo, t es la duración del proceso, I es la corriente iónica hacia el blanco y A es el número atómico del material objetivo. Así, la energía requerida para poder hacer sputtering dependerá tanto del material del blanco como del tipo de iones como se muestra en la figura 3.3

Target	Incident Ion Energy (eV)					
	Ne	Ar	Kr	Xe	Hg	H
Be	12	15	15	15	–	–
Al	13	13	15	18	18	–
Ti	22	20	17	18	25	4.40
V	21	23	25	28	25	5.28
Cr	22	22	18	20	23	4.03
Fe	22	20	25	23	25	4.12
Co	20	25	23	22	–	4.40
Ni	23	21	25	20	–	4.41
Cu	17	17	16	15	20	3.53

Figura 3.3: Datos del umbral de sputtering para diferentes iones incidentes sobre blancos distintos, extracto de [29].

En resumen, la eficiencia de sputtering depende de las características de los iones y blancos usados, del ángulo de incidencia de los iones y su energía así como el número de iones incidentes en el blanco, los últimos aspectos mencionados dependerán de las características de la descarga.

3.3. Características de las descargas gaseosas en sistemas de sputtering

Una descarga gaseosa se define como un flujo de corriente eléctrica a través de un medio gaseoso. Es necesario que existan algunos átomos ionizados para que pueda haber un flujo de corriente, además esta tiene que ser impulsada por un campo eléctrico.

En la descarga gaseosa producida entre dos electrodos, existe una región luminosa en el cátodo (en inglés *cathode glow*), en la que se produce la mayor parte de la ionización [31]; fuera de esta región, la corriente de descarga es transportada principalmente por electrones hacia el ánodo y por iones hacia el cátodo. Para mantener la ionización en esta región luminosa, es necesario que existan electrones secundarios. La corriente de descarga se acumula por ionización dentro de la zona más próxima al cátodo, esto se debe a los electrones secundarios que son acelerados por los grandes campos eléctricos en la región.

Para describir la corriente en una descarga, se debe tener en cuenta la interacción de las partículas cargadas con las superficies de los electrodos. En un sistema con dos electrodos paralelos separados por una distancia L al que se llena con gas a la presión p (presión del gas de trabajo) y que se le aplica un cierto potencial V_D , se forma una descarga en el espacio entre los electrodos que depende de la presión utilizada (desde 0.1 a 10 Torr), la composición (del gas), el voltaje aplicado y la geometría del sistema [32].

Existen diversos regímenes operativos para las descargas gaseosas⁸, en todos la corriente de descarga I_D varía con el voltaje como se muestra en la figura 3.4, cuando se aplica el voltaje inicial, la corriente de descarga es muy pequeña. Como I_D depende de contribuciones de varias fuentes, incluso externas tales como la radiación proveniente de electrones y iones libres⁹, I_D va aumentando hasta que el voltaje se vuelve lo suficientemente grande como para recoger todas las partículas cargadas, la corriente permanece casi constante con el aumento del voltaje hasta que las cargas libres finalmente alcanzan suficiente energía para producir más partículas cargadas a través de colisiones con los átomos del gas de trabajo o por el bombardeo de los electrodos que conducen a la generación de electrones secundarios [32].

Una descarga gaseosa (también llamada descarga luminosa) posee diversas zonas de luz, algunas de ellas son la capa catódica, el brillo negativo y la columna positiva (ver figura 3.5); dependiendo del tipo de gas es el color que adquiere la luz emitida, en la tabla 3.1 se enlistan los colores de las diferentes zonas para algunos gases comunes.

⁸Los que se muestran en la figura 3.4 pueden encontrarse descritos con todo detalle en [32]

⁹En [32] se habla de rayos cósmicos como fuente de estas cargas libres

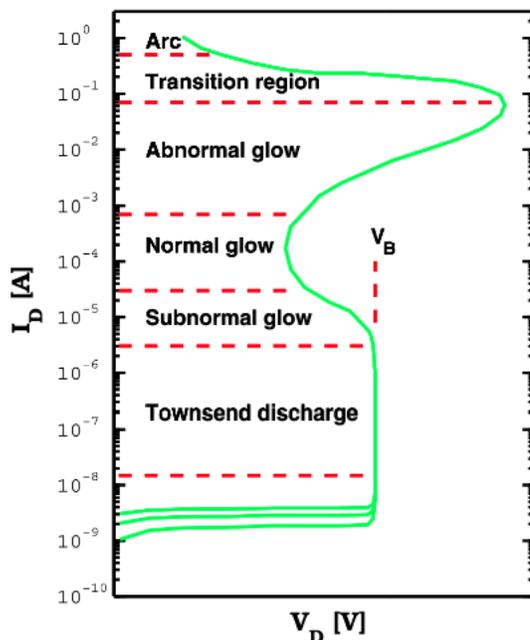


Figura 3.4: La corriente de descarga I_D versus el voltaje de descarga V_D para una descarga de baja presión. Se indican los diversos regímenes operativos, con corriente creciente, régimen Townsend, resplandor subnormal, resplandor normal, resplandor anormal y régimen de arco [32].

Anteriormente, se creía que los electrones emitidos por el cátodo se aceleraban y alcanzaban una energía correspondiente a la máxima función de excitación de las moléculas de gas en la capa catódica [33]; ahora se sabe que en realidad la excitación es producida en gran parte por los iones que están siendo acelerados hacia el cátodo, ya que en esta zona los electrones no poseen suficiente energía para producir excitación. En la región de brillo negativo, la intensidad del campo eléctrico se debilita debido al aumento de la densidad de electrones, la energía de los electrones se vuelve pequeña y estos excitan a las moléculas de gas con mayor eficacia [32]. Cerca del ánodo, los electrones son atraídos y acelerados, aunque los iones son repelidos, el ánodo está cubierto por el brillo luminoso. La columna positiva se considera una región casi libre de campo y tiene concentraciones casi equivalentes de iones y electrones [18], y por condición de cuasineutralidad, la columna positiva es la región que más representa un plasma.

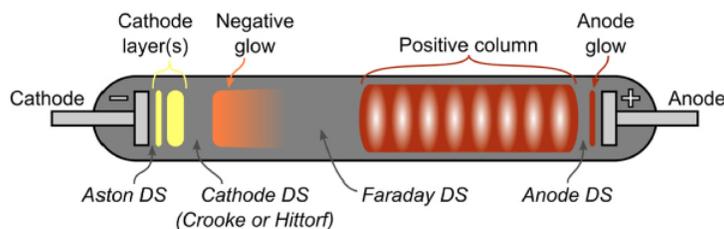


Figura 3.5: Esquema de una descarga luminiscente, se muestran varias regiones distintas que aparecen entre el cátodo y el ánodo. Los colores son los correspondientes a una descarga de neón (ver tabla 3.1. Los espacios oscuros se abrevian como DS[32].

Colores de las zonas luminosas en descargas gaseosas			
Gas	Capa catódica	Brillo negativo	Columna positiva
He	rojo	rosa	rojo-rosa
Ne	amarillo	naranja	rojo-café
Ar	rosa	azul oscuro	rojo oscuro
Kr	-	verde	azul-púrpura
Xe	-	naranja-verde	blanco-verde
H ₂	rojo-café	azul claro	rosa
N ₂	rosa	azul	rojo-amarillo
O ₂	rojo	amarillo-blanco	rojo-amarillo
Aire	rosa	azul	rojo-amarillo

Tabla 3.1: Colores de las diferentes zonas luminosas de una descarga gaseosa según el gas de trabajo

3.3.1. Ruptura dieléctrica

La ruptura dieléctrica es un fenómeno importante en la física de descargas gaseosas. El voltaje de ruptura depende del tipo de gas, la curvatura de los electrodos, etc, pero como aproximación, se puede decir que es una función del producto pL , donde p es la presión del gas de trabajo y L es la distancia entre los electrodos[34].

La densidad y el flujo de electrones¹⁰ crecen exponencialmente a medida que nos alejamos axialmente del cátodo (ya que este está polarizado negativamente). Por lo tanto, el aumento en el flujo de electrones es proporcional al mismo, es decir

$$\frac{d\Gamma_e}{dz} = \alpha\Gamma_e(z), \quad (3.3)$$

donde Γ_e es el flujo de electrones, y α se conoce como el primer coeficiente de ionización de Townsend [32] que es el inverso del camino libre medio para la ionización, es decir, $\alpha(z) = 1/\lambda_{iz}$. El flujo de electrones en la dirección a lo largo del eje de descarga (o la dirección del campo eléctrico) es

$$\Gamma_e(z) = \Gamma_e(0) \exp \left[\int_0^z \alpha(z') dz' \right], \quad (3.4)$$

donde $z \in [0, L]$ con L la distancia entre los electrodos. Como se crean pares de electrones-iones, existe continuidad de la carga total, es decir si Γ_i es el flujo de iones, se cumple

$$\Gamma_i(0) - \Gamma(L) = \Gamma_e(L) - \Gamma_e(0), \quad (3.5)$$

por lo tanto, al evaluar 3.4 en L la ecuación 3.5 se convierte en

$$\Gamma_i(0) - \Gamma(L) = \Gamma_e(0) \left(\exp \left[\int_0^L \alpha(z') dz' \right] - 1 \right). \quad (3.6)$$

¹⁰Para distinguir ambos conceptos, nos referimos a la densidad de electrones como la cantidad de electrones por unidad de volumen, estos están disponibles para moverse en un flujo de electrones, que es la cantidad de electrones que cruzan cierta unidad por unidad de tiempo bajo la acción de una cierta diferencia de potencial.

Por otra parte, al ser una descarga autosostenida, el flujo de electrones se genera en la superficie ($z = 0$) gracias al flujo de iones, es decir $\Gamma_e(0) = \gamma_e \Gamma_i(0)$ con γ_e el coeficiente de emisión de electrones secundarios¹¹; suponiendo que en la región del ánodo ($z = L$) ya no hay flujo de iones, es decir $\Gamma_i(L) = 0$, de la ecuación 3.6 se obtiene

$$\exp \left[\int_0^z \alpha(z') dz' \right] = 1 + \frac{1}{\gamma_e}, \quad (3.7)$$

que es la condición para la auto sostenibilidad de la descarga.

En el caso en el que el campo eléctrico E es una constante, se permite tratar α como constante en la ecuación 3.7[32]. Por lo tanto, tomando el logaritmo de ambos lados de 3.7

$$\alpha L = \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_e} \right), \quad (3.8)$$

que es la condición de ruptura para una descarga. Otra forma de escribir esta ecuación es

$$\frac{\alpha}{p} = A \left(-\frac{Bp}{E} \right), \quad (3.9)$$

donde A y B se determinan experimentalmente y son aproximadamente constantes en un rango de presiones y campos para un tipo de gas dado (ver tabla 3.2)

Gas	A [cm ⁻¹ Torr ⁻¹]	B [V/(cm Torr)]	Rango de E/p [V/(cm Torr)]
Aire	14.6	365	150-600
H ₂	5.0	130	150-400
Ar	13.6	235	100-600
N ₂	11.8	325	100-600

Tabla 3.2: Constantes para el coeficiente de ionización de Townsend [32]

Si el voltaje mínimo al cuál inicia la descarga (voltaje de ruptura) es $V_B = EL$, se tiene

$$ApL \exp \left(-\frac{BpL}{V_B} \right) = \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_e} \right), \quad (3.10)$$

despejando V_B de esta ecuación

$$V_B = \frac{BpL}{\ln(ApL) \ln \left[\ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_e} \right) \right]}. \quad (3.11)$$

De esta ecuación se puede deducir que el producto de la presión por la distancia entre los electrodos (pL) es un parámetro adecuado para caracterizar la descarga. Por lo tanto, para una longitud de

¹¹Ya que son los electrones secundarios los que se generan en la superficie y son los que sostienen la descarga [32]

descarga fija L , existe una presión de gas óptima para la descomposición del plasma.

Al derivar la ecuación 3.11 con respecto a pL e igualando la derivada a cero, podemos encontrar el valor de pL que corresponde a la tensión mínima de ruptura, es decir

$$(pL)_{\min} = \frac{e}{A} \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_e} \right), \quad (3.12)$$

y su correspondiente voltaje sería

$$V_{B,\min} = \frac{eB}{A} \ln \left(1 + \frac{1}{\gamma_e} \right), \quad (3.13)$$

que se conoce como el potencial mínimo de chispas y es el voltaje mínimo al que puede ocurrir una ruptura eléctrica en un gas dado. A presiones más bajas, el proceso de ionización es ineficaz debido a la baja probabilidad de colisión con electrones neutros, mientras que a presiones más altas, las colisiones elásticas evitan que los electrones alcancen una energía lo suficientemente alta como para que se produzca la ionización [35]. El número de átomos de gas o moléculas en el espacio entre los electrodos es proporcional a pL . A menor presión, la distancia entre el cátodo y el ánodo tiene que ser mayor para crear una descarga con propiedades comparables a las de alta presión con poca distancia entre los electrodos.

Para baja presión, el camino libre medio de los electrones es grande y la mayoría de los electrones alcanzan el ánodo sin chocar con átomos o moléculas de gas. Por lo tanto, en este rango, se requiere un valor más alto de V_B para generar suficientes electrones para provocar la descomposición del gas. A presiones más altas, el camino libre medio de los electrones es corto. Los electrones no obtienen suficiente energía del campo eléctrico para ionizar los átomos o moléculas del gas debido a sus frecuentes colisiones con las moléculas del gas. Por lo tanto, V_B aumenta a medida que aumenta la presión.

La mayor parte de la caída de potencial sobre una descarga luminiscente aparece a través de la zona más próxima al cátodo, llamada “vaina del cátodo”, es ahí donde se genera una región luminosa donde los electrones secundarios producidos poseen suficiente energía para ionizar el plasma. Child (1911) [32] dedujo la relación entre el espesor de la *vaina del cátodo* d_c , la densidad de corriente de descarga J y la caída de voltaje a través de la vaina V_c , asumiendo que la energía iónica inicial es insignificante en comparación con el potencial de la vaina:

$$J = \frac{4}{9} \epsilon_0 \left(\frac{2e}{m_i} \right)^{1/2} \frac{V_c^{3/2}}{d_c^2}, \quad (3.14)$$

donde m_i es la masa de iones. A la ecuación 3.14 se le conoce como la ley Child o la ley Child-Langmuir sin colisiones; es válida cuando el potencial de la vaina es grande en comparación con la energía promedio de los electrones.

3.3.2. Emisión y atrapamiento de electrones secundarios

Si una superficie sólida se somete a bombardeos de partículas energéticas, se emiten electrones. Este fenómeno se conoce como emisión de electrones secundarios; el número de electrones emitidos por partícula incidente se denomina coeficiente de emisión de electrones secundarios γ_e ;

esta puede ser inducida por las colisiones de electrones, iones, átomos neutros, moléculas e incluso fotones [18].

En un sistema con campos magnéticos, los electrones se someten a fuerzas magnéticas y eléctricas que pueden confinarlos en la región del campo. El camino libre medio aumenta cuando hay una presión suficientemente baja, los electrones que se encuentran en la región de atrapamiento magnético cuyas energías son mayores a la energía suministrada por el voltaje aplicado [36], adquieren suficiente momento para provocar ionización del gas mediante colisiones. Por lo tanto, la producción de electrones secundarios aumenta gracias al atrapamiento magnético, lo cual representa una mejora para los procesos de generación de plasmas.

La distribución de energía de los electrones emitidos en un sólido por electrones acelerados se representa esquemáticamente en la figura 3.6. El pico *a* consiste en electrones primarios reflejados debido a colisiones elásticas con el sólido, y el pico *b* es causado por colisiones inelásticas, mientras que los electrones secundarios tienen una amplia distribución de energía denominada *c*.

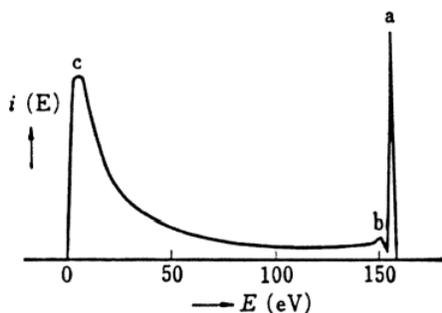


Figura 3.6: Distribución de energías de electrones secundarios asociados con impactos de electrones en una superficie de plata[18].

En la figura 3.7 se muestran los coeficientes de emisión de electrones secundarios γ_e debido al impacto de electrones para varios materiales, en función de la energía de los electrones primarios.

La emisión de electrones secundarios causada por iones de energía relativamente baja puede explicarse mediante la figura 3.8. Cuando los iones con energía de ionización E_i se acercan a la superficie del metal, se transfiere un electrón desde el primer nivel en la banda de conducción del metal al estado fundamental del ion. Simultáneamente, un segundo electrón gana el exceso de energía y es excitado desde el segundo nivel. Este proceso se conoce como *neutralización Auger*. La energía cinética del electrón emitido E_k viene dada por $E_i' - \alpha - \beta$ y su valor máximo es $E_i' = 2\phi$ [18]. La energía cinética del electrón expulsado está relacionada con la energía de ionización, aunque no está relacionada con la energía cinética del ion.

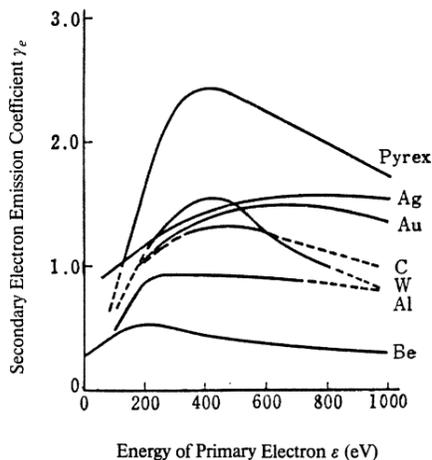


Figura 3.7: Coeficientes de emisión de electrones secundarios debido a impacto de electrones como función de la energía del electrón primario [18].

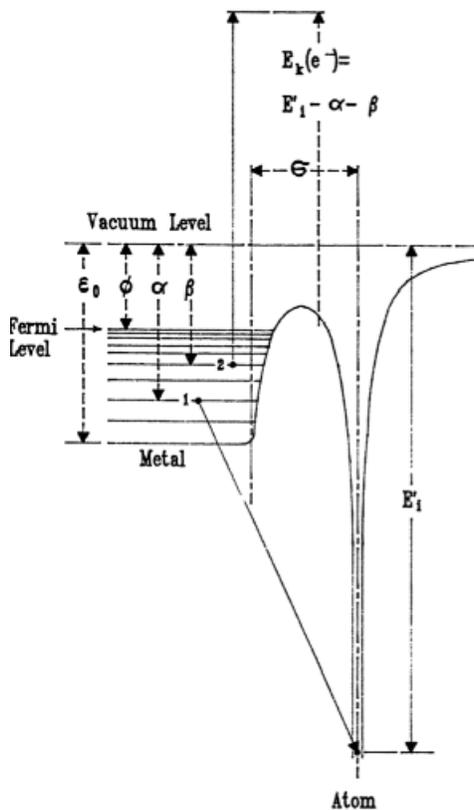


Figura 3.8: Neutralización Auger de un ion en la superficie de un metal con emisión de un electrón secundario [18].

El coeficiente de emisión de electrones secundarios depende de la energía de la partícula primaria incidente como se muestra en la figura 3.9 que grafica el coeficiente de emisión de electrones secundarios del molibdeno debido al bombardeo de iones Ar^+ , en función de la energía cinética

de los mismos.

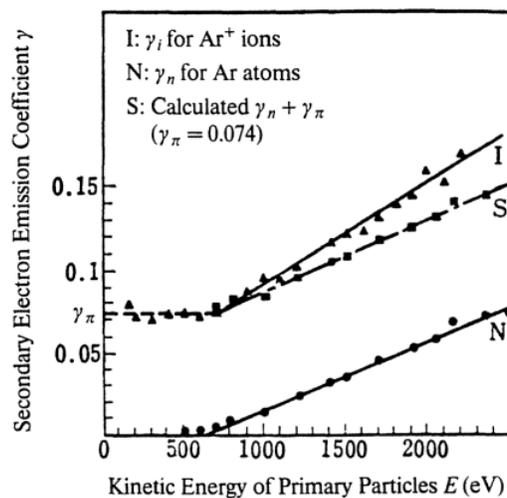


Figura 3.9: Coeficientes de emisión de electrones secundarios del Mo como función de la energía cinética de las partículas primarias debido a átomos (N) Ar y iones (I) Ar^+ medidos experimentalmente y simulado de los iones (S) a partir le valor aproximadamente constante $\gamma_\pi = 0.074$ de los átomos neutrales [18].

3.4. Aplicaciones

La fabricación de películas delgadas por *sputtering* es un proceso ampliamente utilizado en muchas industrias, incluido el procesamiento de semiconductores, la óptica de precisión y el acabado de superficies. Las películas delgadas producidas con esta técnica tienen una uniformidad, densidad y adhesión excelentes, lo que las hace ideales para múltiples aplicaciones [37]. Por mencionar algunos ejemplos muy específicos de aplicaciones [38] (ver figura 3.10) se tienen los siguientes

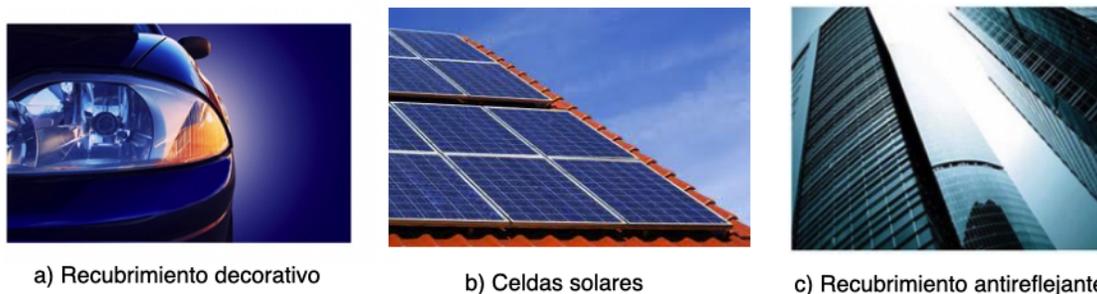
Revestimientos decorativos y funcionales. Hay muchos avances en los diseños de magnetrón para hacer este tipo de revestimientos. Los campos magnéticos más fuertes permiten no solo blancos más gruesos sino también presiones operativas más bajas, lo que puede aumentar la distancia de proyección y mejorar la uniformidad del recubrimiento de sustratos tridimensionales. Los magnetrones también están disponibles con una variedad de ángulos de pulverización catódica que permite al usuario la máxima flexibilidad al recubrir formas complejas.

Celdas solares basadas en silicio. Las celdas basadas en silicio fueron los primeros productos fotovoltaicos desarrollados comercialmente y mantienen una participación de mercado dominante en la actualidad. Aunque se utilizan otros procesos para la producción de silicio, el *sputtering* se usa ampliamente para producir una capa reflectora trasera hecha predominantemente de aluminio.

Vidrio arquitectónico y antirreflectante. Para crear revestimientos de vidrio de gran superficie se utilizan magnetrones rotatorios de gran tamaño. Al depositar revestimientos de dimensio-

nes considerables el proceso pueden durar desde una semana hasta más de un mes, es por ello que se requieren de técnicas de gran precisión.

Celdas CIGS y CdTe. Estos dos tipos de materiales se utilizan generalmente en sustratos flexibles como el acero inoxidable fino, aunque todavía se utilizan sustratos rígidos como el vidrio. Además de los revestimientos tradicionales de aluminio y TCO, estas tecnologías emplean capas adicionales, como molibdeno y óxido de zinc que también se puede producir utilizando sputtering.



a) Recubrimiento decorativo

b) Celdas solares

c) Recubrimiento antirreflejante

Figura 3.10: Ejemplos concretos de aplicaciones del proceso de Sputtering para el recubrimiento de objetos de uso cotidiano tales como a) Recubrimientos decorativos en la industria automotriz, b) Celdas solares, c) Ventanal antirreflejante de una estructura arquitectónica[38].

3.4.1. Crecimiento de películas delgadas

Las partículas cargadas y neutras, como iones, electrones, radicales, moléculas y átomos, dan lugar a diversas reacciones físicas y químicas al interactuar con superficies sólidas [39].

El estado de energía en la superficie de un sólido siempre es mayor que la energía en el interior, es decir, existe un exceso de energía libre que permanece en la superficie. Las moléculas de gas se adhieren a la superficie sólida, reduciendo así la energía libre; el proceso de adhesión de partículas siempre va acompañado de generación de calor [40].

En el proceso de *sputtering* existe una diferencia de potencial entre las moléculas del gas y la superficie, por lo que a medida que una molécula se acerca a la superficie, se somete a una fuerza de atracción, con el consiguiente aumento de su velocidad. El número de moléculas de gas Z que se implantan por unidad de superficie de un sólido a temperatura T y presión de gas p viene dado por la ecuación de Hertz-Knudsen[18]:

$$Z = p(2\pi mk_B T)^{-1/2}, \quad (3.15)$$

donde m es la masa de la molécula gaseosa y k_B es la constante de Boltzmann. La molécula capturada aún puede estar en un estado excitado. Si es así, posteriormente hará transiciones a estados de vibración más bajos para que se pueda lograr la distribución de energía de las moléculas capturadas sobre la temperatura de la superficie[39], además aún pueden retener componentes de energía cinética a lo largo de la superficie por lo que podrán moverse lateralmente; las moléculas se moverán a lo largo de la superficie hasta que su energía de migración se pierda en las redes cristalinas

en un sitio de *adsorción* desocupado. La eficiencia de captura se relaciona con la captura de una molécula a través de *fisisorción*.

La *probabilidad de adherencia* s se define en [18] como la relación entre la velocidad de captura de las moléculas k_a a través de *quimisorción* y el número de moléculas del gas que colisionan con la superficie Z , es decir

$$s = \frac{k_a}{Z}. \quad (3.16)$$

Los efectos de la temperatura sobre la probabilidad de adherencia se muestran en la figura 3.11, se puede notar que las probabilidades de adherencia son independientes de la temperatura cuando estas son suficientemente bajas. A medida que aumenta la temperatura, la probabilidad de *desorción* aumenta rápidamente al aumentar la cobertura. Por lo tanto, la probabilidad de adherencia disminuye a medida que aumenta la temperatura.

La figura 3.12 muestra un diagrama generalizado de probabilidad de adherencia o probabilidad de atrapamiento en función de la energía cinética para los iones del proyectil que son más ligeros que los átomos objetivo. El proceso de implantación se vuelve muy eficiente para energías $> 10^6$ eV y la probabilidad de captura se aproxima a la unidad [18].

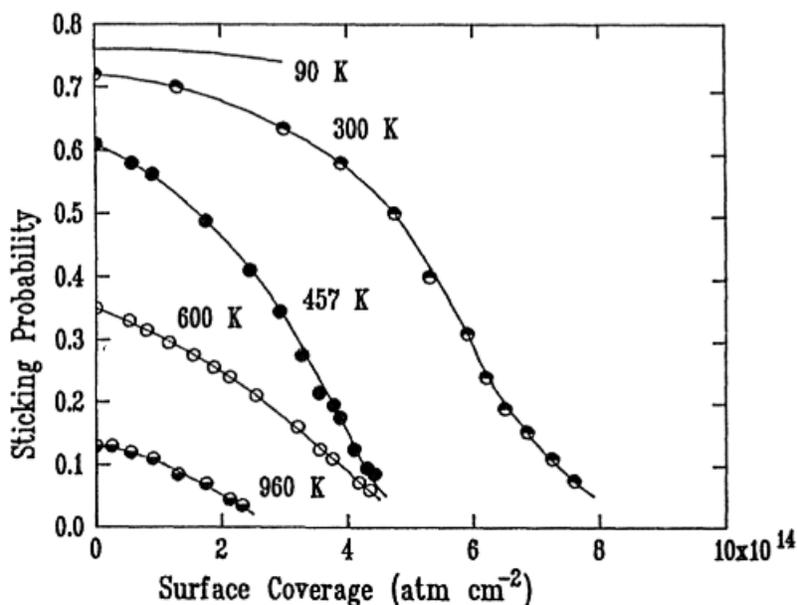


Figura 3.11: Variación de la probabilidad de adherencia en una superficie de N_2 a diferentes temperaturas[18].

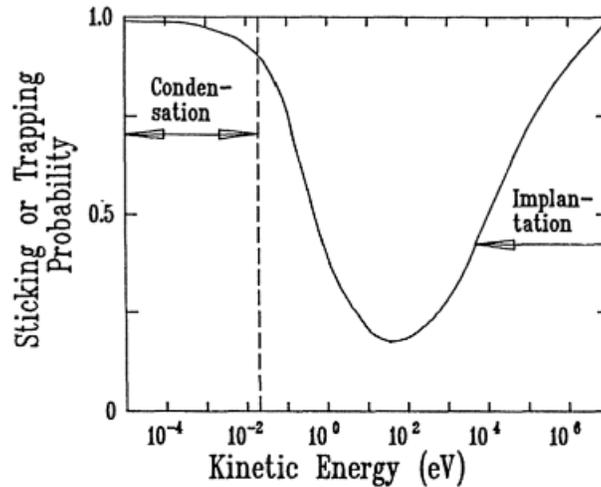


Figura 3.12: Gráfica generalizada de la probabilidad de atrapamiento como función de la energía cinética de la partícula [18].

Cualquier proceso de depósito de películas delgadas implica tres pasos principales que son la producción de las especies atómicas, moleculares o iónicas apropiadas, el transporte de estas especies al sustrato a través de un medio, y la condensación en el sustrato, ya sea directamente o mediante una reacción química y / o electroquímica, para formar un depósito sólido. La formación de una película delgada tiene lugar mediante procesos de nucleación y crecimiento. La imagen general del proceso de crecimiento paso a paso que surge de los diversos estudios experimentales y teóricos se puede presentar de la siguiente manera [29]:

1. Las especies unitarias, al impactar el sustrato, pierden su componente de velocidad normal al sustrato (siempre que la energía incidente no sea demasiado alta) y se adsorben físicamente en la superficie del sustrato.
2. Las especies adsorbidas no están en equilibrio térmico con el sustrato inicialmente y se mueven sobre la superficie del sustrato. En este proceso interactúan entre sí, formando grupos más grandes.
3. Los racimos o núcleos, como se les llama, son termodinámicamente inestables y pueden tender a desorberse con el tiempo dependiendo de los parámetros de depósito. Si dichos parámetros son tales que un grupo choca con otras especies adsorbidas antes de ser expulsado, comienza a crecer en tamaño. Después de alcanzar un cierto tamaño crítico, el grupo se vuelve termodinámicamente estable y se dice que se ha superado la barrera de nucleación. Este paso que implica la formación de núcleos estables, quimisorbidos y de tamaño crítico se denomina etapa de nucleación.
4. Los núcleos críticos crecen tanto en número como en tamaño hasta que se alcanza una densidad de nucleación de saturación. La densidad de nucleación y el tamaño medio del núcleo dependen de varios parámetros, como la energía de las especies implantadas, la tasa de impacto, las energías de activación de adsorción, desorción, difusión térmica, la temperatura,

topografía y naturaleza química del sustrato. Un núcleo puede crecer tanto paralelo al sustrato por difusión superficial de las especies adsorbidas, como perpendicular a este por impacto directo de la especie incidente. En general, sin embargo, la tasa de crecimiento lateral en esta etapa es mucho más alta que el crecimiento perpendicular. Los núcleos crecidos se llaman islas.

5. La siguiente etapa en el proceso de formación de la película es la etapa de coalescencia, en la que las pequeñas islas comienzan a fusionarse entre sí en un intento de reducir el área de la superficie. Esta tendencia a formar islas más grandes se denomina aglomeración y se potencia aumentando la movilidad superficial de las especies adsorbidas, como, por ejemplo, aumentando la temperatura del sustrato. En algunos casos, la formación de nuevos núcleos puede ocurrir en áreas recién expuestas como consecuencia de la coalescencia.
6. Las islas más grandes crecen juntas, dejando canales y huecos de sustrato descubiertos. La estructura de las películas en esta etapa cambia del tipo de isla discontinua al tipo de red porosa. Se forma una película completamente continua rellenando los canales y orificios. Por tanto, el proceso de crecimiento puede resumirse en un proceso estadístico de nucleación, crecimiento controlado por difusión superficial de los núcleos tridimensionales y formación de una estructura de red y su posterior llenado para dar una película continua. Como se observa en la figura 3.13, dependiendo de los parámetros termodinámicos del depósito y la superficie del sustrato, las etapas iniciales de nucleación y crecimiento pueden describirse como de (a) tipo de isla (llamado tipo Volmer-Weber), (b) tipo de capa (llamado Frank-van der Merwetype), y (c) tipo mixto (llamado tipo Stranski-Krastanov). En casi todos los casos prácticos, el crecimiento se produce por formación de islas [29].

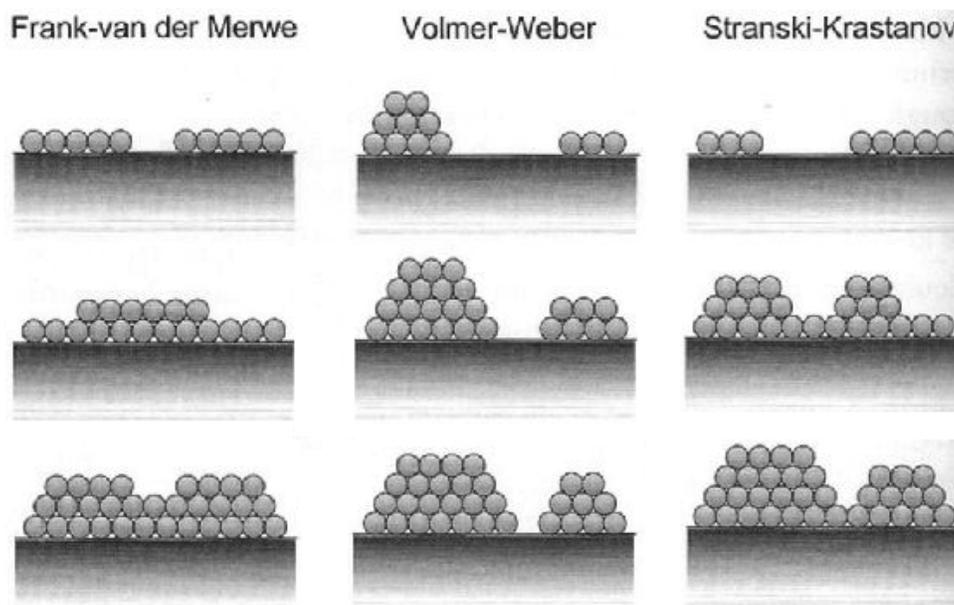


Figura 3.13: Tres modos del proceso de crecimiento de películas delgadas [41].

3.5. Tipos de sistemas de sputtering

3.5.1. Sistemas sin campo magnético

Diodo Planar

Es el sistema de pulverización catódica (sputtering) más simple. Esta configuración consiste en una cámara donde el cátodo (blanco) y el ánodo se encuentran uno frente al otro (Fig. 3.14). El sustrato se coloca sobre el ánodo, a una cierta distancia d (que suele ser de unos 5 a 10 cm. [42]) se encuentra el material objetivo; la cámara se llena con un gas inerte la que se le hará pasar una corriente de descarga para generar el plasma, dicha corriente aumenta con el voltaje aplicado lo que conlleva a un aumento de la tasa de Sputtering. Sin embargo, la corriente de descarga no aumenta linealmente con el voltaje aplicado ya que la sección eficaz de ionización disminuye al aumentar la energía de los electrones (ver figura 2.2).

La tasa de depósito está determinada principalmente por la densidad de potencia en la superficie objetivo, el tamaño del área de erosión, la distancia de la fuente al sustrato, el material fuente y la presión del gas de trabajo. Algunos de estos factores están interrelacionados, como la presión y la densidad de potencia. Por lo tanto, la condición de funcionamiento óptima se obtiene controlando los parámetros para obtener la máxima potencia que se puede aplicar al objetivo sin causar agrietamiento, sublimación o fusión. El límite de potencia máxima se puede aumentar si se aumenta la velocidad de enfriamiento del objetivo mediante el diseño adecuado de los canales de flujo de refrigerante y la mejora de la conductancia térmica entre el objetivo y la placa de respaldo del objetivo.

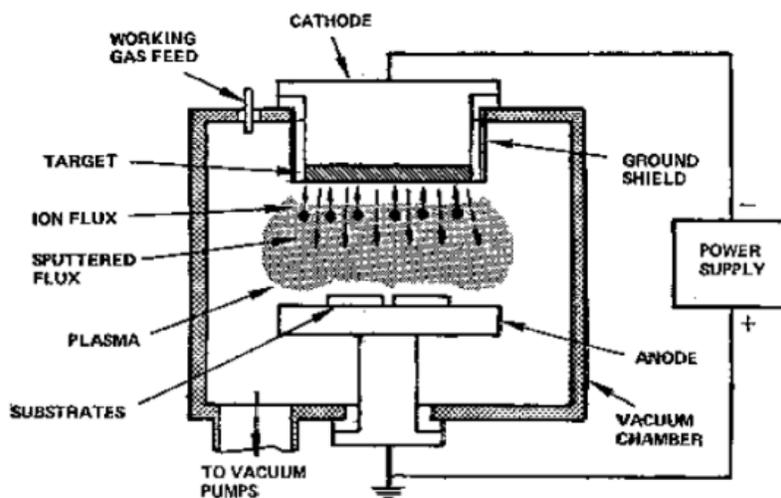


Figura 3.14: Depósito por erosión catódica de diodo planar [42].

Ablación por haz de iones

El depósito por haz de iones es una variación relativamente reciente de Sputtering que proporciona excelente adhesión, además de un depósito de alta pureza gracias a las presiones operativas bajas (aproximadamente 0,1 mtorr), y muy bajos efectos de calentamiento ya que el sustrato no está en

contacto con el plasma [43]. En esta técnica, un haz de iones de alta energía (cientos a miles de electronvolts) extraído de la fuente de iones se dirige a un blanco de pulverización catódica del material deseado. Se utiliza un gas inerte o reactivo para la fuente del haz de iones. El sustrato está situado de forma adecuada para recoger las especies pulverizadas del objetivo de pulverización catódica, como se muestra en la Fig. 3.15

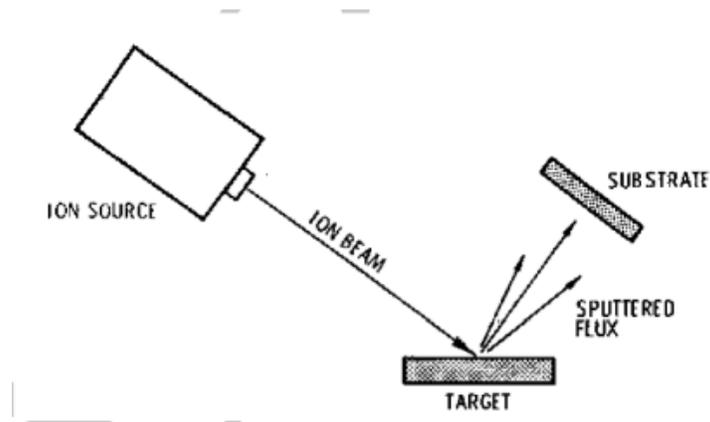


Figura 3.15: Haz de Iones [42].

Dado que el sustrato puede aislarse de la fuente de generación de plasma, esto permite un control independiente sobre la temperatura del sustrato, la presión del gas y el tipo de bombardeo de partículas de la película en crecimiento. Además, es posible controlar la energía y la densidad de corriente del blanco de forma independiente en esta técnica, mientras que solo se puede hacer variando la presión del gas de trabajo en la tecnología de pulverización catódica con descarga luminiscente. La tasa de depósito en la pulverización catódica con haz de iones es menor que en la pulverización catódica convencional.

3.5.2. Sistemas con campo magnético

Sputtering con magnetrón

Otro tipo de *sputtering* es el magnetrón, en el cual mediante el empleo de campos magnéticos en el proceso de pulverización catódica, la eficiencia de ionización cerca del objetivo se puede incrementar considerablemente. En el proceso de diodo plano convencional, los iones se generan relativamente lejos del objetivo y la probabilidad de que los iones pierdan su energía en las paredes de la cámara es grande. Además, el número de electrones primarios que golpean el ánodo a altas energías sin experimentar colisiones aumenta a medida que disminuye la presión, reduciendo así la eficiencia de ionización. Estas pérdidas de electrones no se compensan con la emisión secundaria inducida por impacto. Por lo tanto, las eficiencias de ionización son bajas y la descarga no puede sostenerse en diodos planos a presiones por debajo de aproximadamente 20 mtorr [42].

En el proceso de *sputtering* con magnetrón, un campo magnético aplicado paralelo a la superficie del cátodo forma trampas de electrones y restringe el movimiento de electrones primarios a la vecindad del cátodo. La intensidad del campo magnético está en el rango de unos pocos cientos

de gauss y, por lo tanto, puede influir en los electrones del plasma pero no en los iones. Los electrones atrapados en una línea de campo determinada logran hacer numerosas colisiones antes de abandonar la zona de atrapamiento y dirigirse hasta el ánodo o a las paredes, por lo que aumenta la eficiencia del mecanismo de ionización; Así, el proceso se puede operar a presiones de alrededor de 1 mtorr con altas densidades de corriente a bajos voltajes, proporcionando así altas tasas de pulverización catódica.

Hay varias configuraciones utilizadas para hacer *sputtering* con magnetrón. Las figuras 3.16 y 3.17 muestran el magnetrón cilíndrico y el magnetrón plano, respectivamente. La técnica de depósito con configuración cilíndrica es muy útil para preparar recubrimientos uniformes sobre grandes áreas, ya que regularmente se emplean cátodos largos. Además, una variación que consiste en un magnetrón hueco cilíndrico es eficaz para revestir objetos de forma compleja; se puede utilizar para disminuir sustancialmente el bombardeo del sustrato por partículas energéticas, minimizando así el calor en el mismo.

Las películas metálicas y las películas dieléctricas se pueden depositar con altas tasas de depósito utilizando la pulverización catódica con magnetrón plano, en comparación con la pulverización catódica con diodos. Aunque las técnicas de *sputtering* con magnetrón tienen las ventajas de una alta tasa de pulverización catódica y bajas tasas de bombardeo de partículas energéticas sobre el sustrato, la utilización de esta técnica se ve obstaculizada por las limitaciones en la elección de los materiales objetivo y las dificultades en la fabricación del objetivo. Por ejemplo, si se utilizan materiales ferromagnéticos como blanco de pulverización catódica, su espesor debe ser lo suficientemente delgado como para ser saturado por el campo magnético. Dado que la alta potencia se localiza en un área seleccionada en el proceso de pulverización catódica con magnetrón, los objetivos deben prepararse sin vacíos ni burbujas para evitar fenómenos indeseados.

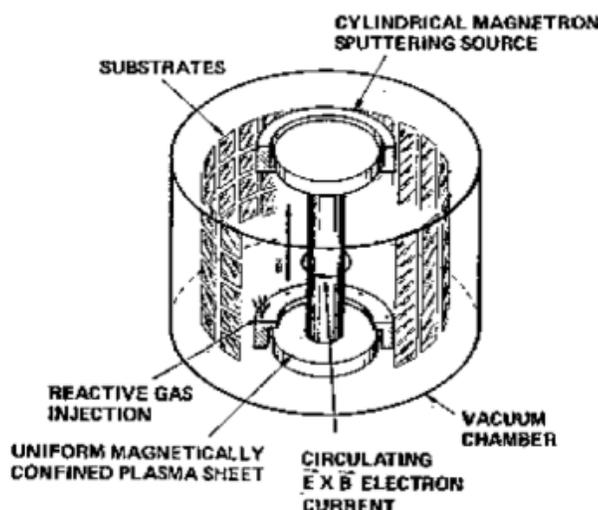


Figura 3.16: Magnetron cilíndrico [42].

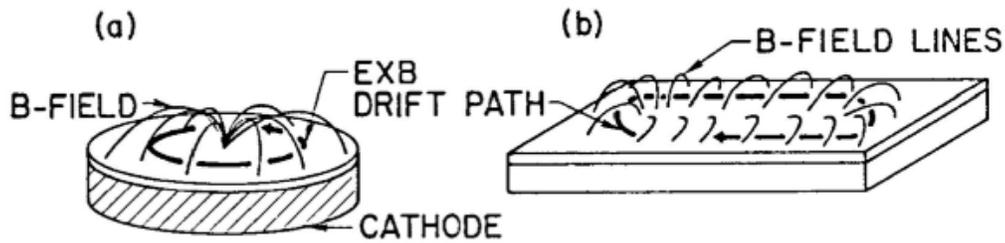


Figura 3.17: a) Magnetrón plano circular, b) magnetrón plano rectangular [44].

DC sputtering con magnetrón

En un sistema tradicional de DC sputtering, los electrones abandonan el cátodo y son atraídos por el ánodo, lo cual es muy ineficiente para mantener la descarga. Es por ello que se agrega un campo magnético, con la finalidad de mantener los electrones cerca de la superficie generando más iones y sostener así la descarga.

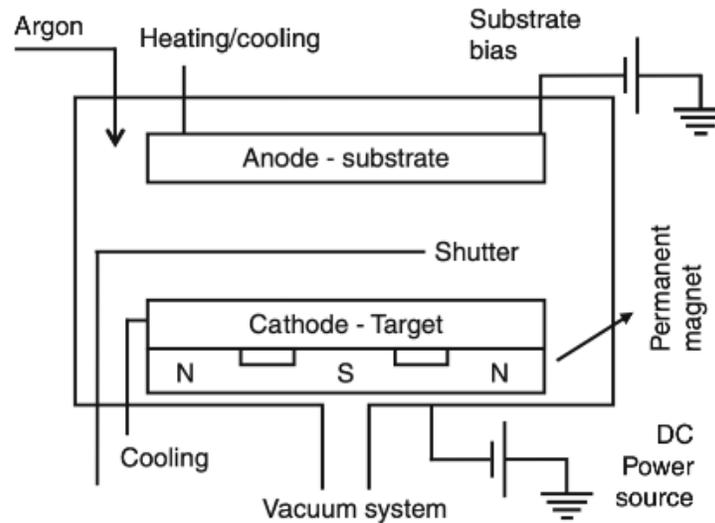


Figura 3.18: Esquema de un sistema de DC sputtering con magnetrón [45].

Los electrones se confinan en la zona del cátodo gracias al campo magnético generado por el arreglo de imanes que se colocan como muestra la figura 3.18, que esquematiza un sistema simple de DC sputtering con magnetrón. Este arreglo produce gran flujo de electrones y por tanto alta densidad en el plasma [45].

Sputtering con radiofrecuencia

Otro método de erosión catódica es aquella asistida por radiofrecuencia (RF), su desarrollo hizo posible depositar películas de materiales no conductores que no pueden pulverizarse mediante

otros métodos debido a la acumulación de carga en la superficie del blanco. La mayoría de los iones son casi inmóviles, en comparación con los electrones que pueden seguir las variaciones temporales del potencial aplicado a las frecuencias de RF típicas utilizadas para la pulverización catódica (5–30 MHz)[42]. Cuando el electrodo está acoplado a un generador de RF, se desarrolla un voltaje negativo en el electrodo debido a la diferencia de movilidad entre electrones y iones. Dado que el electrodo objetivo aislante constituye un condensador en el circuito eléctrico, no debería haber ningún flujo de corriente. Por lo tanto, se requiere que el voltaje en la superficie del electrodo esté polarizado en sí mismo negativamente para compensar la diferencia en la movilidad de electrones y iones, y para satisfacer en promedio la condición de corriente neta cero. La magnitud de la polarización negativa resultante es casi la misma que el voltaje de cero a pico de la señal de RF. El período para que el electrodo actúe como ánodo es muy corto y el electrodo actúa principalmente como cátodo durante el ciclo de RF. Por lo tanto, se puede esperar que el objetivo sea bombardeado como en el caso de corriente directa. Un número significativo de iones no se acumula en la superficie objetivo mientras el electrodo actúa como un cátodo, debido a la alta frecuencia empleada en la pulverización catódica de RF (normalmente 13.56 MHz) [46]. El depósito se puede realizar a presiones considerablemente más bajas, como 5 a 15 m torr, ya que los electrones que oscilan a alta frecuencia pueden obtener suficiente energía para causar colisiones ionizantes y la cantidad de electrones perdidos (sin hacer colisiones) se puede reducir.

SPUTTERING CON MAGNETRÓN

La pulverización catódica con magnetrón o *sputtering* con magnetrón, se ha desarrollado rápidamente durante la última década hasta el punto en que se ha establecido como el proceso por excelencia para el depósito de una amplia gama de revestimientos de importancia industrial [1]. La fuerza impulsora detrás de este desarrollo ha sido la creciente demanda de películas funcionales de alta calidad en varios sectores de diversos mercados. En muchos casos, las películas depositadas con magnetrón superan las películas depositadas por otros procesos de depósito físico en fase de vapor (PVD) y pueden ofrecer la misma funcionalidad que las películas mucho más gruesas producidas por otras técnicas de revestimiento de superficies [38]. En consecuencia, la pulverización catódica con magnetrón ahora tiene un impacto significativo en áreas de aplicación que incluyen recubrimientos duros resistentes al desgaste, recubrimientos de baja fricción, resistentes a la corrosión, decorativos y con propiedades ópticas o eléctricas específicas [47].

En una descarga convencional de *sputtering* con magnetrón, los iones positivos generados en el plasma se aceleran hacia el blanco el cuál también es el cátodo, con lo que se genera un vapor de átomos y moléculas desde la superficie del blanco. En esta descarga se generan electrones secundarios sobre la superficie del cátodo que posteriormente son acelerados por la diferencia de potencial entre el cátodo y el plasma.

La principal ventaja en un sistema planar es que el material bombardeado fluye en la dirección normal al plano del cátodo [47]. Las fuentes convencionales se operan comúnmente utilizando argón como gas de trabajo en el rango de presión desde 0.1 hasta 1.5 Pa y un voltaje de cátodo aplicado en el rango de 300 a 700 V, mientras que la fuerza del campo magnético de confinamiento en la superficie objetivo está en el rango de 20 a 60 mT. Esto conduce a densidades de corriente del orden de 4 a 60 mA/cm² y densidades de potencia de varias decenas de W/cm² [48].

La tasa de depósito está limitada por la diferencia de potencial entre los electrodos, y los átomos pulverizados casi mantienen su energía de unos pocos eV obtenidos del evento de pulverización catódica. La densidad de electrones en la vecindad del sustrato está típicamente en el rango de 10¹⁵ - 10¹⁷ partículas por m³. La mayoría de los iones que bombardean el sustrato son iones del gas noble con el que se trabaja y su densidad es mucho mayor que la de las partículas pulverizadas. El camino libre medio para el material pulverizado con respecto a la ionización por impacto de electrones es de más de 50 cm [32].

4.1. Configuraciones de sputtering con magnetrón

Esta técnica se puede aplicar a una gran variedad de materiales y es fácilmente escalable a grandes áreas, los recubrimientos logrados con esta técnica son altamente uniformes. Durante las últimas décadas, el proceso de sputtering con magnetrón se ha convertido en una tecnología extremadamente importante para el depósito de películas delgadas en una amplia gama de aplicaciones industriales [1]. Según la aplicación, el voltaje empleado puede ser constante, de radiofrecuencia o pulsado. La configuración puede ser plana, cilíndrica con campo magnético axial o giratoria alrededor de un conjunto magnético fijo. Gran parte de los fenómenos de pulverización catódica del magnetrón que comenzaron a explorarse se realizaron en configuraciones de magnetrón cilíndrico con campo magnético axial, con el cilindro interior como objetivo del cátodo, o en el hueco cilíndrico (magnetron invertido). En este tipo de sistemas, las trayectorias de deriva $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ recorren el cilindro, ya sea por dentro o por fuera, según la configuración. Estas configuraciones no se usan mucho hoy en día, excepto la configuración de magnetron de cátodo hueco, que es muy adecuada para recubrir cables o fibras que pueden pasar a través de él.

4.1.1. Magnetron plano

En 1967, Wasa y Hayakawa propusieron un prototipo del magnetron planar y en 1974 Chapin produjo un sistema práctico de magnetron plano [29]. En estos sistemas de descarga luminiscente, las películas producidas son irradiadas por moléculas de gas pulverizadas durante el crecimiento de la película delgada e incluso puede haber moléculas de gas en las películas formadas.

Un magnetron plano usa un cátodo planar con imanes permanentes fijados en la parte posterior, dicha configuración genera una especie de túnel magnético sobre la superficie del blanco (ver figura 4.1), lo que genera que los electrones queden confinados en esta zona de campo[49].

Las líneas de flujo magnético forman un patrón semicircular en el plano perpendicular a la superficie del blanco, dichas líneas entran al espacio sobre la superficie de forma casi perpendicular a ella, se curvan en un camino semicircular y luego regresan hacia la superficie nuevamente de forma perpendicular. Los electrones se quedan atrapados en la zona donde el campo eléctrico es perpendicular al campo magnético.

Una de las ventajas de un magnetron plano es que el diseño es muy simple, especialmente cuando se usan imanes permanentes para restringir las regiones del plasma cerca del cátodo además de que se pueden adaptar fácilmente para ser utilizados con fuentes de radiofrecuencia [50].

El blanco puede ser rectangular (figura 4.1) o circular (figura 3.17 a)); en este trabajo se estudiará el caso de un magnetron plano rectangular balanceado, es decir que el campo magnético en el centro del blanco es igual que en la orilla. Otra ventaja del magnetron plano es que su requerimiento de energía es tres veces menor que la de un sistema tradicional de sputtering, también se opera a baja presión y tiene un alta tasa de depósito [51]. Sin embargo, para obtener depósitos uniformes, es necesario mover el sustrato respecto al blanco, además el patrón de erosión resultante del blanco es inhomogéneo en la configuración planar, usando sólo un 30% del mismo. Para aprovechar más el material del blanco, se usan campos magnéticos que cambian de posición.

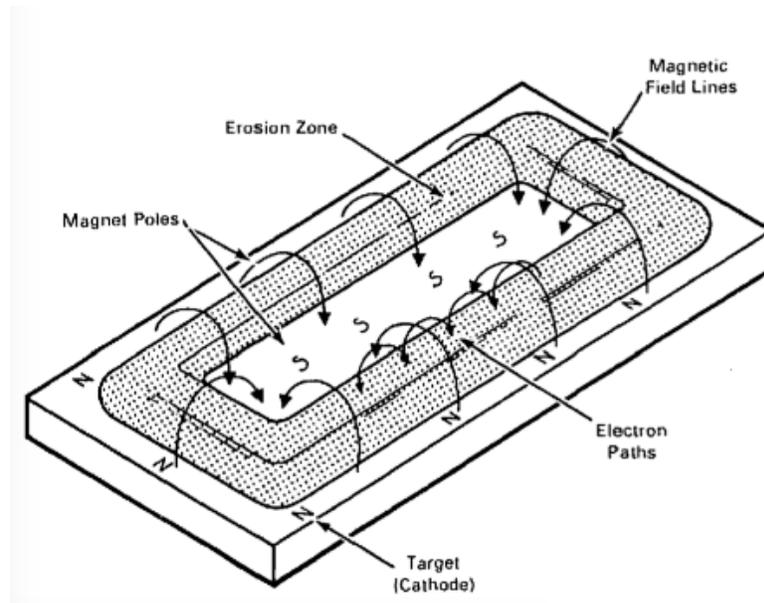


Figura 4.1: Blanco plano rectangular para sistema de *sputtering* con magnetron mostrando las líneas de campo magnético y la zona de erosión [50].

4.2. Campo magnético del sistema

Como ya se menciona, el sistema de *sputtering* más simple es mediante una descarga luminiscente de corriente directa de diodo (*DC diode*); en dicho sistema, las trayectorias de los electrones sólo están definidas por el campo eléctrico entre el cátodo y el ánodo. Por lo tanto, los electrones se aceleran sobre la región del cátodo y se mueven con alta velocidad hacia el ánodo.

Para asegurar que los electrones produzcan suficientes iones para sostener la descarga, la presión debe ser adecuada, es decir, del orden de unos pocos Pa [13], ya que una menor presión implica que el camino libre medio de los electrones es mayor, lo que implica que adquieren mayor energía pero a su vez una mayor presión implica mayor número de colisiones.

Al poseer carga negativa, los electrones generados en la zona del cátodo (negativo) tenderán a ser expulsados y a ser atraídos por el ánodo (positivo); para evitar la pérdida rápida de estos electrones, se emplea un campo magnético que servirá para atraparlos en la zona del cátodo aumentando la ionización del plasma y por tanto el bombardeo del objetivo mediante iones positivos acelerados hacia él.

Eventualmente un electrón secundario saldrá de la zona de confinamiento y continuará su viaje hacia el ánodo, pero al aplicar un campo magnético durante el depósito, se pueden atrapar los electrones en el plasma durante más tiempo en la región del cátodo (ver figura 4.2) y, por lo tanto, para la misma densidad de electrones se producen más iones, aumentando así la probabilidad de ionizar un átomo de gas y con ello expulsar un átomo de la superficie del blanco. Esto permite una reducción en la presión de descarga, por lo que los iones pueden alcanzar el cátodo con casi todo el voltaje de descarga y los átomos expulsados pueden alcanzar el sustrato con solo unas pocas colisiones; así, la tasa de depósito aumentará drásticamente en comparación con los sistemas

simples.

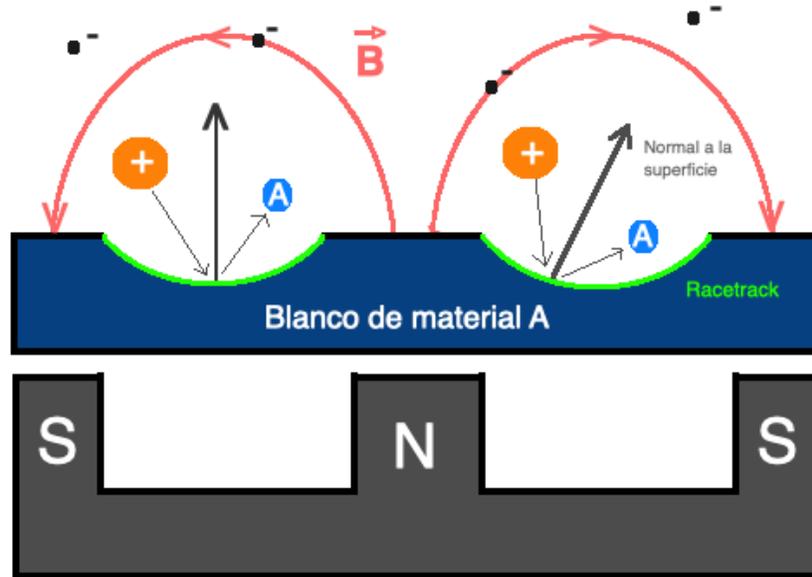


Figura 4.2: Representación simplificada de un sistema de *sputtering* con magnetron con un blanco de material A (cátodo), los electrones que son atrapados por el campo magnético producen ionización del gas de trabajo que al ser acelerados hacia el cátodo expulsan átomos del blanco.

La trayectoria de los electrones en un sistema de *sputtering* con magnetron es relativamente complicada debido a la presencia tanto del campo magnético \mathbf{B} como del campo eléctrico \mathbf{E} . Como se ve en la figura 4.2, el campo magnético se arquea y los electrones se mantienen atrapados hasta que ocurre una colisión. La mayoría de los eventos de ionización ocurren en esta región donde quedan atrapados los electrones energéticos. Por eso a veces se la denomina región de ionización. En ausencia de un campo eléctrico, un electrón girará en el campo magnético con la frecuencia de ciclotrón dada por la ecuación 2.22 y con el radio de Larmor dado por la ecuación 2.21.

Para los electrones, los valores típicos para r_{Le} (radio de Larmor del electrón) son 1 a 10 mm [7] [22]. Esto significa que los electrones en la vecindad del objetivo tienen un radio de giro mucho más pequeño que el tamaño característico de la estructura del campo magnético de confinamiento. Como comparación, los iones tienen un radio de giro r_{Li} del orden de 1 m [15], que es mayor que el tamaño característico del sistema y, por lo tanto, los iones son débilmente influenciados por el campo magnético. En presencia de un campo eléctrico, el electrón exhibe una deriva neta perpendicular a los vectores de campo \mathbf{B} y \mathbf{E} , a menudo denominada deriva $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$, que viene dada por la ecuación 2.26. Para una descarga de magnetron plano, esta deriva es en dirección azimutal, con velocidades de deriva típicas de alrededor de 10^4 m/s dentro de la región de ionización. Existe otra deriva impulsada por el gradiente de presión de electrones (o deriva diamagnética) [15] escrita como

$$v_{\nabla p} = \frac{\nabla p_e \times \mathbf{B}}{en_e B^2}. \quad (4.1)$$

La deriva 2.26 y la deriva 4.1 dan como resultado una corriente azimutal que fluye por encima de la zona de erosión del objetivo [32].

4.2.1. Patrón de erosión

Una de las principales desventajas del magnetron es que los materiales objetivos no se erosionan uniformemente, sino que se forma en ellos un patrón de erosión conocido como *racetrack* por su nombre en inglés, que en español significa pista de carreras; como su nombre lo indica, es un patrón que va rodeando la figura del blanco (ver figura 4.1). La formación de este patrón de erosión implica un desperdicio del material circundante, por ejemplo, para un blanco circular el material no aprovechado llega a ser hasta del 75 % [52] El patrón es el resultado de la distribución no uniforme de los iones sobre el blanco, ya que apenas son influenciados por el campo magnético; la forma del perfil de erosión varía con el tiempo de Sputtering y con la presión de trabajo [53].

Cuando se está produciendo el bombardeo en el blanco, algunos de los iones quedan implantados en la superficie, es por ello que el *racetrack* se forma tanto por el fenómeno de erosión como por el de implantación.

Medir la forma del patrón de erosión experimentalmente mediante un perfilómetro, puede ayudar a tener una aproximación de las posiciones en que las partículas abandonan el blanco [54], es decir, tomando el inverso del perfil de erosión se puede generar una distribución radial de las partículas expulsadas.

4.3. Física del plasma en un sistema de sputtering con magnetron

Como ya se mencionó en la sección 2.2, las trayectorias de los electrones se pueden describir mediante la ecuación de la fuerza de Lorentz, una primera inspección de dicha ecuación hace pensar que las trayectorias son helicoidales al rededor de las líneas de campo, pero en este trabajo se demostrará que no es así. Los electrones emitidos por el blanco debido al impacto de los iones son acelerados por el potencial sobre la región del cátodo. La presencia del campo magnético influye en el movimiento de los electrones, y los mantiene en trayectorias que los lleva de regreso al cátodo, a menos que hagan una colisión. Aunque los magnetrones cilíndricos y planos tienen geometrías diferentes, los principios básicos de funcionamiento son los mismos. Sin embargo, en este trabajo se estudió el caso de un magnetron plano debido a que se utilizan mas ampliamente ya que son los más convenientes en muchos aspectos.

En un diseño de magnetron plano rectangular, los imanes permanentes generalmente se colocan detrás del blanco; para uno rectangular la configuración de los imanes es como en la figura 4.3 para que las líneas del campo magnético entre los polos tengan una simetría circular.

Tener un campo magnético de esta geometría genera ciertas implicaciones. Primero, la fuerza del campo magnético varía sobre la superficie del blanco, disminuyendo en magnitud cuanto más lejos se encuentre de ella y también su dirección va cambiando siendo perpendicular a la superficie en el punto más bajo y paralelo a ella en el punto más alejado. Por lo tanto, el campo magnético solo es

paralelo a la superficie del blanco en puntos únicos. La componente vertical del campo magnético también es importante, ya que evita que los electrones escapen del objetivo.

Sabiendo que las partículas cargadas del plasma producido en el sistema de *sputtering* con magnetrón son susceptibles a los campos eléctrico y magnético. Para describir las trayectorias de los electrones, se comienza considerando a la fuerza que experimenta una carga q , es decir, la fuerza de Lorentz:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}), \quad (4.2)$$

donde m es la masa de la partícula cargada, q su carga y \mathbf{B} el campo magnético. En un campo magnético como el de la figura 4.4 se tiene que $B_y = 0$, $B_x \neq 0$ y $B_z \neq 0$ excepto en los bordes.

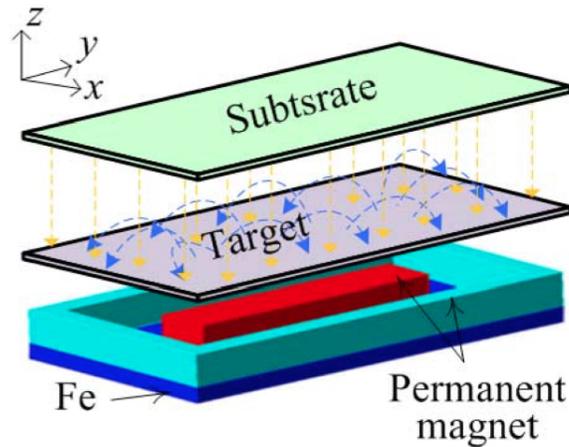


Figura 4.3: Esquema de los imanes de un magnetrón rectangular plano [55].

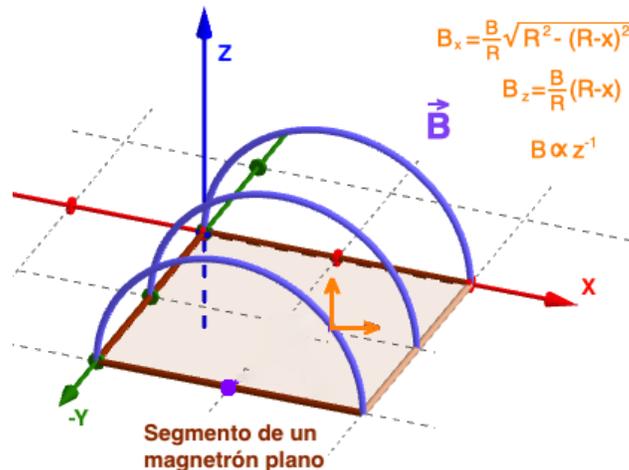


Figura 4.4: Esquema del campo magnético de un magnetrón rectangular plano. Se muestra únicamente la sección en la que las líneas de campo se encuentran en planos consecutivos paralelos al plano XZ. Sobre la línea de campo se esquematizan las componentes B_x y B_z parametrizadas por R y la magnitud del campo magnético que disminuye conforme la altura z aumenta.

Por otra parte si se considera un campo eléctrico aplicado de la forma $E = E_z$, las ecuaciones de Lorentz para cada coordenada serán las siguientes:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = qv_y B_z, \quad (4.3)$$

$$m \frac{d^2y}{dt^2} = -q(v_x B_z - v_z B_x), \quad (4.4)$$

$$m \frac{d^2z}{dt^2} = q(E - v_y B_x). \quad (4.5)$$

La geometría del campo magnético que muestra la figura 4.2 se puede aproximar en algún punto¹² a un semicírculo como se muestra en la figura 4.5. En cualquier punto se cumple que $B_x = B \cos \theta$ y $B_z = B \sin \theta$, si se parametriza el campo magnético como función de un parámetro R relacionado con la distancia de separación entre imanes¹³ (que a su vez está relacionado con la zona de Sputtering) se obtiene

$$\cos \theta = \frac{\sqrt{\rho^2 - (\rho - x)^2}}{\rho}, \quad (4.6)$$

$$\sin \theta = \frac{(\rho - x)}{\rho}. \quad (4.7)$$

Sabemos que $\theta = \tan^{-1}(B_z/B_x)$, suponiendo que la relación entre B_z y B_x se mantiene constante en todas las líneas de campo, en particular para el semicírculo (donde se cumple que $\rho = R$), las componentes del campo magnético se pueden escribir como

$$B_x = B'(z) \frac{\sqrt{R^2 - (R - x)^2}}{R}, \quad (4.8)$$

$$B_z = B'(z) \frac{(R - x)}{R}, \quad (4.9)$$

donde $B'(z)$ es una función que indica como disminuye la magnitud del campo magnético con la altura z ¹⁴ dada por

$$B'(z) = A_1 e^{-kz} + A_2, \quad (4.10)$$

con A_1 , A_2 y k constantes determinadas experimentalmente¹⁵.

¹²No se requiere especificar en qué punto esta aproximación es válida ya que de ella sólo se extraen las relaciones entre las componentes B_x y B_z , sin embargo no se está considerando que todas las líneas de campo sean semicirculares

¹³La distancia total de separación entre los imanes es $2R$

¹⁴Se utiliza B' en lugar de B para distinguir que el campo magnético depende tanto de x como de z .

¹⁵La forma de esta función se obtuvo gracias a las mediciones experimentales realizadas por el grupo PlasNaMat del IIM de la UNAM, para más detalles consultar el apéndice A.

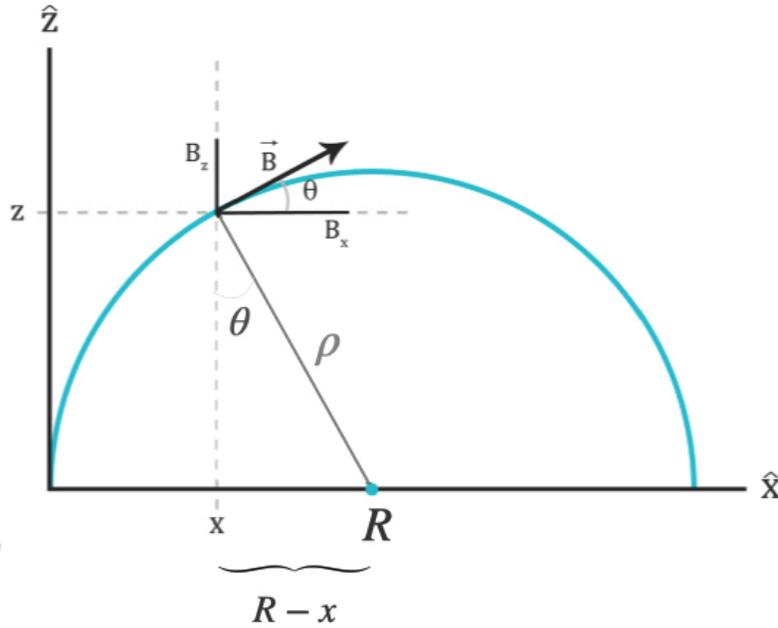


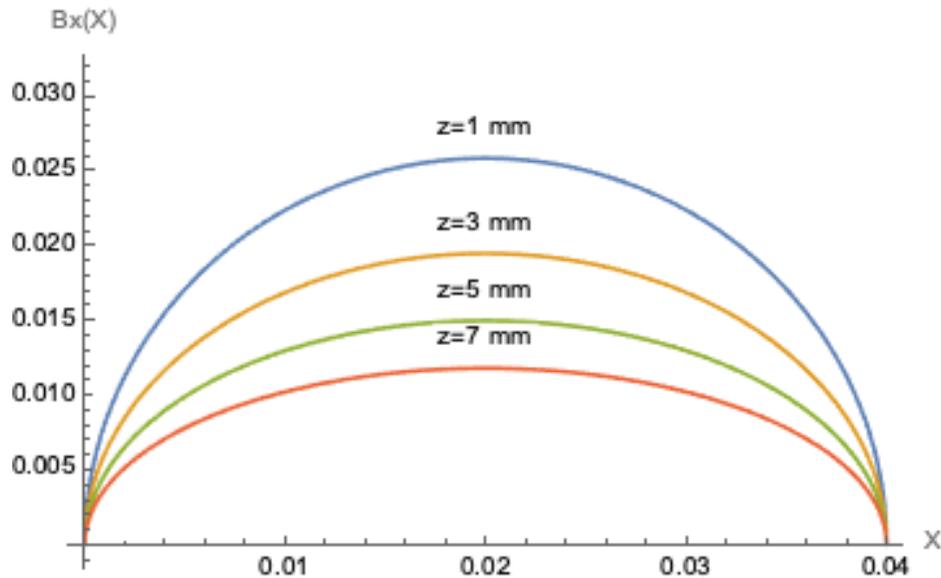
Figura 4.5: Parametrización de las coordenadas del campo magnético como función del radio de Sputtering.

El comportamiento de las ecuaciones 4.8 y 4.9 que modelan las componentes del campo magnético se muestra en la figura 4.6. Se observa que justo sobre el primer imán ($x = 0$) el campo magnético es completamente perpendicular a la superficie y sale de ella ($B_x = 0, B_z > 0$), en el centro ($x = R$) el campo magnético es totalmente paralelo a la superficie ($B_z = 0$) y finalmente justo sobre el segundo imán ($x = 2R$) se tiene que el campo vuelve a ser completamente perpendicular a la superficie y entra hacia ella ($B_x = 0, B_z < 0$).

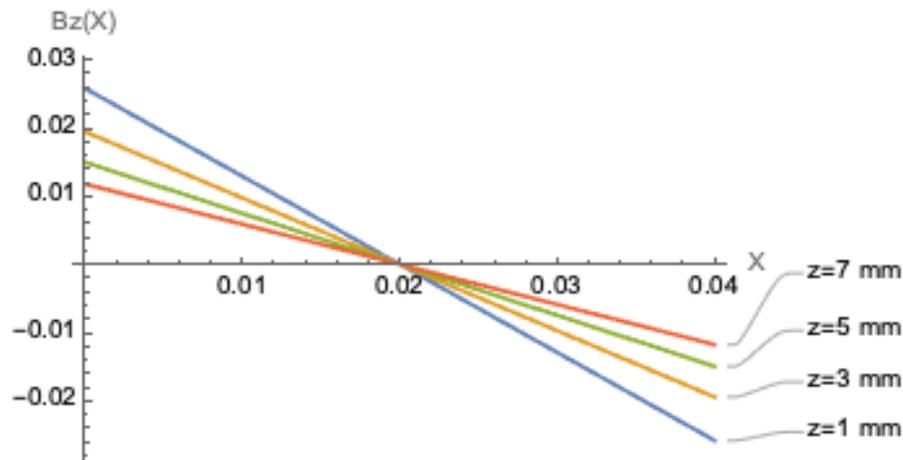
Insertando 4.8 y 4.9 en las ecuaciones 4.5 y despejando las segundas derivadas se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d^2x}{dt^2} &= \frac{qB'(z)}{mR} v_y (R-x) , \\ \frac{d^2y}{dt^2} &= \frac{qB'(z)}{mR} \left[v_z \sqrt{R^2 - (R-x)^2} - v_x (R-x) \right] , \\ \frac{d^2z}{dt^2} &= \frac{qE}{m} - \frac{qB'(z)}{mR} v_y \sqrt{R^2 - (R-x)^2} . \end{aligned}$$

Al resolver este sistema de tres ecuaciones diferenciales acopladas de segundo orden con las condiciones iniciales apropiadas, es posible conocer la evolución en el tiempo de la posición de cierta partícula cargada, es decir la trayectoria.



(a) Componente B_x del campo magnético como función de x para diferentes valores de z



(b) Componente B_z del campo magnético como función de x para diferentes valores de z

Figura 4.6: Comportamiento de las componentes del campo magnético modelado por las ecuaciones 4.8 y 4.9.

4.3.1. Trayectorias de partículas cargadas

Hay algunos puntos a considerar cuando se utilizan campos magnéticos en sistemas de procesamiento de plasma. Primero, se requiere que el radio de giro sea pequeño en comparación con el tamaño del aparato, como las dimensiones de la cámara, las separaciones de los electrodos o la ubicación del sustrato [54]. De la ecuación (2.21) se observa que el radio depende directamente de la masa de la partícula y, por lo tanto, se requieren campos magnéticos mucho más grandes para influir en los movimientos de los iones del plasma en comparación con los electrones. Para partículas de la misma velocidad sujetas a un campo dado, el radio del giro de iones será al menos tres órdenes de magnitud mayor que el radio del giro de electrones.

Teniendo esto en cuenta, los campos magnéticos generalmente se eligen para que sean lo suficiente-

mente fuertes como para influir en los electrones del plasma, pero no en los iones. Las intensidades de campo magnético entre 0.02 y 0.03 Teslas son comunes en los magnetrones [13].

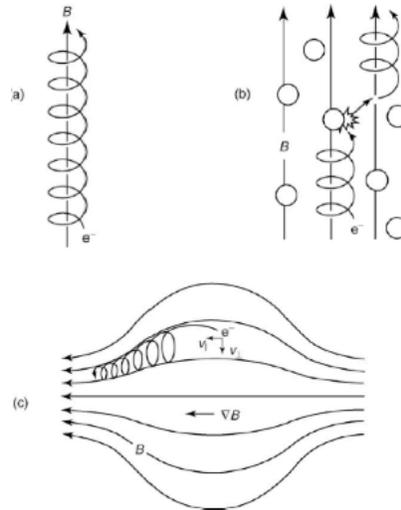


Figura 4.7: Posibles movimientos de un electrón en campos magnéticos estáticos [13].

Un electrón atrapado en una línea de campo magnético dada puede avanzar a una línea de campo adyacente después de chocar con una especie más grande, como se indica esquemáticamente en la Figura 4.7 (b). La difusión por colisión de electrones a través de las líneas del campo magnético es una consideración importante en muchos dispositivos de descarga. La deriva de electrones a lo largo de una línea de campo magnético también puede verse influenciada por gradientes en el campo magnético. Un ejemplo de este comportamiento se muestra en la Figura 4.7 (c), para una configuración de botella magnética que se usa a menudo en dispositivos de descarga. En esta configuración, la intensidad del campo aumenta a medida que las líneas de campo se acercan entre sí.

5

TRES MÉTODOS PARA MODELAR EL ATRAPAMIENTO DE LOS ELECTRONES SOBRE UN MAGNETRÓN

5.1. Descripción del modelo

En un magnetrón, el plasma está concentrado en un área adyacente a la superficie del cátodo, esta es la zona de ionización y excitación, que se encuentra acotada por una o más regiones de captura de electrones limitadas por el campo magnético en forma de túnel [56].

En el proceso convencional de sputtering, los electrones secundarios emitidos por el cátodo se aceleran hacia el ánodo en donde se encuentra el sustrato y, a menos que esté protegido de alguna manera, los electrones lo bombardearán con casi toda la energía del potencial del cátodo.

En un magnetrón plano, los electrones secundarios se aceleran debido a la diferencia de potencial entre el cátodo y el plasma, pero aquellos electrones bajo la influencia del campo magnético transversal, no pueden bombardear el sustrato directamente ya que se encuentran atrapados la zona del cátodo.

Por procesos de ionización y colisión, el plasma se llena de energía térmica que está relacionada a su vez con la energía cinética mediante la expresión para la velocidad térmica¹⁶:

$$v_{th} \propto \sqrt{\frac{k_B T}{m}} \quad (5.1)$$

Los electrones secundarios son recogidos fácilmente por un ánodo adyacente a la región donde las líneas del campo magnético entran en la superficie del cátodo, pero estos pueden escapar como muestra la figura 5.1, cuando un electrón viaja sobre una línea de campo magnético que emergen completamente perpendicular al cátodo. Estos electrones pueden incidir directamente sobre el sustrato.

¹⁶La expresión para la velocidad térmica varía dependiendo si se trata de átomos o moléculas y de los grados de libertad, pero se encuentra en el rango $v_{th} = (1.6 \pm 0.2) \sqrt{\frac{k_B T}{m}}$ [9].

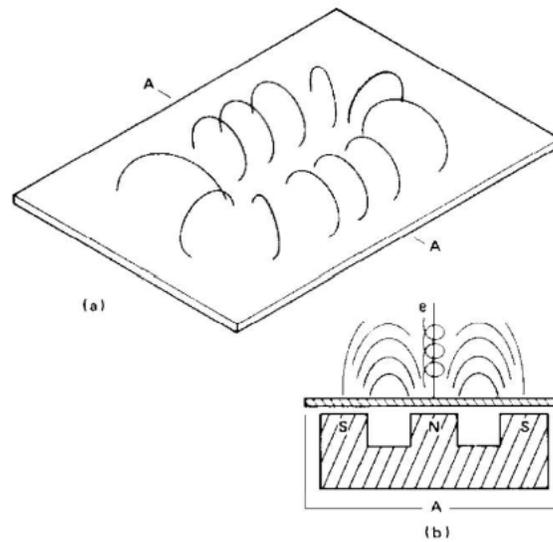


Figura 5.1: Cátodo rectangular de un magnetrón. (a) líneas de campo magnético y región del plasma, (b) sección transversal (que une los puntos A-A de la primera figura) que muestra líneas de campo y trayectorias de escape de electrones.[56].

5.2. Arreglo experimental

Un sistema típico de magnetrón plano rectangular consta de un cátodo, que es el blanco de pulverización catódica, paralelo a una superficie de ánodo, generalmente conectada a tierra, que sirve como soporte o portador del sustrato (ver figura 5.2).

Otra geometría simple es un cátodo en forma de disco (magnetrón circular) que tiene un anillo de plasma paralelo a un soporte de sustrato plano.

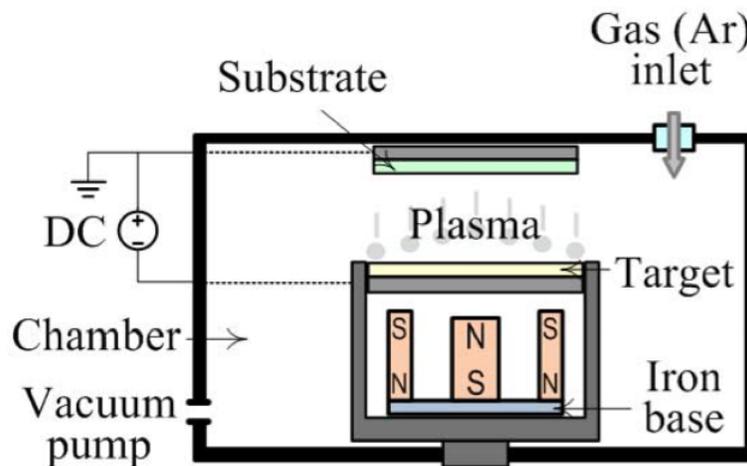


Figura 5.2: Sección transversal de un dispositivo de *sputtering* con magnetrón rectangular.[55].

Las disposiciones de los imanes pueden variar sustancialmente, siendo la única restricción que haya al menos un camino cerrado donde en algún punto las líneas del campo magnético sean paralelas a la superficie del cátodo [56]. El conjunto del cátodo consta del material blanco, de varios milímetros de espesor, unido a una placa de respaldo que a su vez forma una pared de cámara de refrigeración. El conjunto de imanes puede estar dentro o fuera del canal de refrigerante. Todo esto se encuentra dentro de una cámara con conexiones de vacío a través de las cuales se conectan bombas de vacío y entradas para diferentes gases de trabajo.

El material y las técnicas de fabricación de objetivos son similares a las utilizadas para los objetivos de pulverización catódica convencionales. El enfriamiento del cátodo en el sistema es crítico debido a la alta disipación de potencia en el cátodo ya que las limitaciones de enfriamiento generalmente determinarán la potencia operativa máxima del cátodo.

5.3. Modelado de las trayectorias de los electrones con métodos numéricos

Conforme a la metodología descrita en la primera sección de esta tesis, se siguió el modelo teórico establecido en la sección 4.3 que obedece a las ecuaciones de Lorentz en un campo magnético de un sistema de *sputtering* con magnetrón. Para modelar las trayectorias de los electrones las ecuaciones fueron normalizadas al parámetro R que se describió en dicha sección, es decir, con los siguientes cambios de variable:

$$\begin{aligned} X &= \frac{x}{R} \implies \ddot{X} = \frac{\ddot{x}}{R}, \\ Y &= \frac{y}{R} \implies \ddot{Y} = \frac{\ddot{y}}{R}, \\ Z &= \frac{z}{R} \implies \ddot{Z} = \frac{\ddot{z}}{R}, \end{aligned}$$

El sistema (4.11-4.11) se transforma en

$$\ddot{X} = \frac{qB'(Z)}{m} \dot{Y}(1-X), \quad (5.2)$$

$$\ddot{Y} = \frac{qB'(Z)}{m} \left[\dot{Z} \sqrt{1-(1-X)^2} - \dot{X}(1-X) \right], \quad (5.3)$$

$$\ddot{Z} = \frac{qE}{Rm} - \frac{qB'(Z)}{m} \dot{Y} \sqrt{1-(1-X)^2}. \quad (5.4)$$

La zona de cálculo se delimitó conforme a la figura 5.3, ya que evita los bordes en donde el campo magnético ya no obedece la forma propuesta. Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, se requiere que se establezcan ciertas dimensiones de espacio y tiempo al problema, constantes y condiciones iniciales. Como condiciones espacio-temporales, se establecen el valor de la longitud del ancho del blanco L_b y la escala de tiempo en la que se quieren calcular las trayectorias. El ancho del blanco se eligió $L_b = 8$ cm, pero ya que el análisis se realiza para la mitad de dicha longitud como muestra la figura 5.3, el parámetro utilizado será $L = 4$ cm, además $L = 2R$, donde R es el

CAPÍTULO 5. TRES MÉTODOS PARA MODELAR EL ATRAPAMIENTO DE LOS ELECTRONES SOBRE UN MAGNETRÓN

valor que sirve de parámetro para el campo magnético, por lo que en el estudio del atrapamiento de electrones se utilizará el valor $R = 2 \times 10^{-2}$ m.

Se emplea una escala de tiempo del orden de cientos de nanosegundos, ya que los fenómenos de interés ocurren en dicho lapso de tiempo [14] [13] [32].

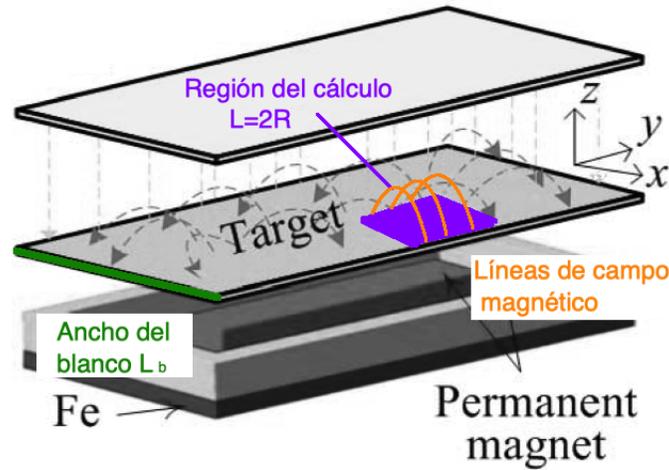


Figura 5.3: Esquema de la región empleada para el cálculo y las dimensiones del sistema. Adaptada de [55].

Otros valores que deben fijarse son las constantes físicas y las condiciones iniciales, dependiendo del gas de trabajo del estudio, se tendrán los valores de la carga y la masa, siendo la masa del electrón $m_e = 9.1094 \times 10^{-31}$ kg, mientras que para los iones de helio $m_{\text{He}^+} = 6.6463E \times 10^{-27}$ kg y argón $m_{\text{Ar}^+} = 6.6327E \times 10^{-26}$ kg.

Se utilizó $B = 0.03T$ como la magnitud del campo magnético sobre la superficie del blanco ya que este fue resultado de una medición experimental del grupo Plasnamat en uno de sus aparatos (ver apéndice A).

Los magnetrones planos se caracterizan por voltajes de cátodo de 300 a 700 V [56], por lo que se utilizará el valor promedio $V_c = -500$ V como el voltaje del cátodo, así, la magnitud del campo eléctrico es $E = 62500$ V/m.

5.3.1. Modelo 1: programación con aceleración constante

Una vez calculada la fuerza de Lorentz para una partícula de carga q se tiene que cada componente es

$$\begin{aligned} m \frac{d^2x}{dt^2} &= qv_y B_z, \\ m \frac{d^2y}{dt^2} &= -q(v_x B_z - v_z B_x), \\ m \frac{d^2z}{dt^2} &= q(E - v_y B_x), \end{aligned}$$

CAPÍTULO 5. TRES MÉTODOS PARA MODELAR EL ATRAPAMIENTO DE LOS
ELECTRONES SOBRE UN MAGNETRÓN

ahora, considerando la segunda ley de Newton que indica que $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$

$$ma_x = qv_y B_z, \quad (5.5)$$

$$ma_y = -q(v_x B_z - v_z B_x), \quad (5.6)$$

$$ma_z = q(E - v_y B_x). \quad (5.7)$$

por otra parte, sabemos que las ecuaciones unidimensionales de movimiento para cuerpos cuya aceleración es constante son

$$x_j = x_{oj} + v_{oj}t + \frac{1}{2}a_j t^2,$$

$$v_j = v_{oj} + a_j t,$$

$$a_j = \frac{v_j - v_{oj}}{t},$$

$$x_j = x_{oj} + \frac{1}{2}(v_j + v_{oj})t.$$

Donde el subíndice j corresponde a la coordenada del movimiento. Considerando que el intervalo de tiempo Δt es suficientemente corto de tal manera que $\Delta a_j / \Delta t \sim 0$, la aceleración puede considerarse una constante en las ecuaciones 5.6 - 5.7, por lo que el sistema se transforma en

$$m \left(\frac{v_x - v_{ox}}{\Delta t} \right) = qv_y B_z, \quad (5.8)$$

$$m \left(\frac{v_y - v_{oy}}{\Delta t} \right) = -q(v_x B_z - v_z B_x), \quad (5.9)$$

$$m \left(\frac{v_z - v_{oz}}{\Delta t} \right) = q(E - v_y B_x), \quad (5.10)$$

los términos del lado derecho representan las componentes de la fuerza magnética y la fuerza eléctrica cuyas componentes se conocen en cada punto gracias a la parametrización que se mencionó en el capítulo anterior, obteniendo

$$B_x = \frac{B'(z)}{R} \sqrt{R^2 - (R-x)^2},$$

$$B_z = \frac{B'(z)}{R} (R-x),$$

$$B'(z) = A_1 e^{-kz} + A_2,$$

donde $R = 2 \times 10^{-2}$ m.

Con ello se puede obtener un modelo iterativo para conocer la velocidad y posición en cada instante de tiempo:

$$x_i = x_{oi} + \frac{1}{2}(v_{oi} + v_i)\Delta t, \quad (5.11)$$

$$v_i = v_{oi} + \frac{F_{oi}}{m}\Delta t, \quad (5.12)$$

donde F_{oi} corresponde a la fuerza que actúa sobre dicha coordenada.

Es posible realizar los cálculos para diferentes posiciones iniciales x_{ox} sobre el blanco, lo que dará como resultado diferentes trayectorias, con lo que es posible analizar el comportamiento general de las partículas del plasma que se deseen estudiar (iones o electrones) mediante un barrido de valores de x_o comprendidos en el intervalo $[0, 2R]$, dada la forma de las ecuaciones de movimiento con aceleración constante (5.8), en este modelo no es necesario emplear la normalización de las ecuaciones diferenciales.

5.3.2. Modelo 2: programación con ecuaciones íntegras

En este modelo no se hace la suposición de la aceleración constante sino que se resuelve el sistema de ecuaciones diferenciales 5.2-5.4 mediante cálculo numérico; para ello, se programó un código en lenguaje C donde se utilizó el método RK4 (ver apéndice B) con el que se dio solución al sistema, estableciendo las condiciones mencionadas en la sección 5.3 .

De igual forma que en el modelo anterior, el programa está diseñado para que el cálculo lo haga a diferentes posiciones iniciales del blanco (x_o). Una vez obtenidas las soluciones del sistema, es posible graficar las trayectorias en el espacio tridimensional para diferentes valores de x_o y obtener así un comportamiento general de las trayectorias de las partículas. Además para cada intervalo de tiempo se calculan las componentes de la velocidad instantánea, con lo que la energía cinética del electrón se puede calcular como

$$K_e = \frac{1}{2}m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) . \quad (5.13)$$

Tanto el modelo 1 como el modelo 2 arrojan información sobre el ángulo de incidencia de las partículas, ya que a partir de sus coordenadas en el eje Y y el eje Z¹⁷ es posible realizar el cálculo como se muestra en la figura 5.4.

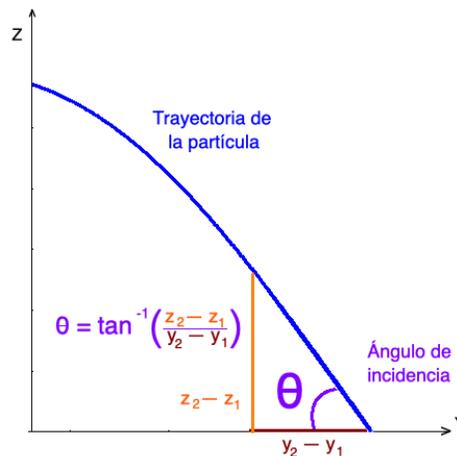


Figura 5.4: Estimación del ángulo de incidencia de una partícula teniendo los datos sobre su trayectoria.

¹⁷Se hace el cálculo como si la trayectoria de la partícula se encontrara únicamente en el plano YZ ya que como se mostrará más adelante en los resultados, para cantidades infinitesimales el cambio en la coordenada en el eje X es despreciable

Dado que el lenguaje de programación C es muy poderoso, en este modelo se pueden realizar cálculos adicionales de gran importancia, como la densidad. Ya que estableciendo una malla sobre el espacio en diferentes lapsos de tiempo, es posible realizar un cálculo del número de partículas por unidad de volumen.

5.3.3. Modelo 3: usando software especializado

El software **Mathematica**®, es ampliamente utilizado en ciencias gracias a que su interfaz es muy amigable con el usuario, además de que incorpora poderosas herramientas para cálculos avanzados.

En este modelo se utilizó **Mathematica**®, bajo la licencia otorgada por la UNAM para resolver directamente el sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden 5.2-5.4 a través de la función `PARAMETRICNDSOLVE` cuyo parámetro establecido fue la posición inicial x_0 como en los anteriores modelos. Cabe mencionar que el software es caja negra, por lo que los métodos numéricos que emplea para resolver el sistema de ecuaciones son desconocidos para el usuario. El código completo se muestra en el apéndice C

CAPÍTULO 5. TRES MÉTODOS PARA MODELAR EL ATRAPAMIENTO DE LOS
ELECTRONES SOBRE UN MAGNETRÓN

6

RESULTADOS

6.1. Cálculos realizados para electrones

Como se describió en el capítulo anterior, es necesario establecer condiciones iniciales y diferentes constantes físicas para los cálculos; en todos los diferentes modelos se utilizaron los mismos parámetros que se enlistan en la tabla siguiente.

Parámetros para el cálculo		
Parámetro	Nombre de la variable	Valor
Carga	q	$-1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa	m	$9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Campo Eléctrico	E	$-62500 \frac{\text{V}}{\text{m}}$
Campo magnético sobre la superficie	B	0.03 T
Parámetro del campo magnético	R	$2 \times 10^{-2} \text{ m}$
Escala de tiempo	$\Delta\tau$	10^{-9} s
Altura inicial	z_o	10^{-9} m
Energía cinética inicial	K_o	3 eV

Tabla 6.1: Tabla de valores empleados para obtener los resultados de los cálculos realizados para electrones

La energía inicial de los electrones se escogió para un sistema típico de *sputtering* con magnetrón, donde los electrones secundarios poseen energía de unos cuantos eV [14]. Mientras que la altura inicial del orden de nanómetros implica que los electrones se están generando sobre la superficie del cátodo¹⁸.

¹⁸Aunque los electrones se generen sobre la superficie, en los modelos no se puede establecer la altura inicial $z_o = 0$ ya que eso anula el sistema

6.1.1. Modelo 1

Se obtuvieron las gráficas de las trayectorias de los electrones secundarios producidos en el plasma con las condiciones y constantes físicas mostradas en la tabla 6.1. Con la finalidad de estudiar mejor el comportamiento de la trayectoria de los electrones se graficaron dos vistas, en la figura 6.2a se observa como se curvan hacia abajo más rápidamente las trayectorias de los electrones cuya posición inicial es más cercana al blanco; mientras que la figura 6.2b muestra como esas mismas trayectorias vuelven a dirigirse hacia arriba formando un giro pronunciado para poder cambiar de dirección.

Como el modelo calcula la posición y la velocidad en cada paso de la iteración, a partir de la ecuación 5.13, es posible calcular la energía cinética en cada intervalo de tiempo Δt , por lo que al graficar los datos, se obtiene el cambio de la energía cinética de los electrones con diferentes posiciones iniciales x_0 , dado que las trayectorias son simétricas respecto al centro del blanco, también lo son las energías cinéticas, es por ello que solo se graficaron las posiciones iniciales en el intervalo $[0, 2R]$ como se muestra en la figura 6.1.

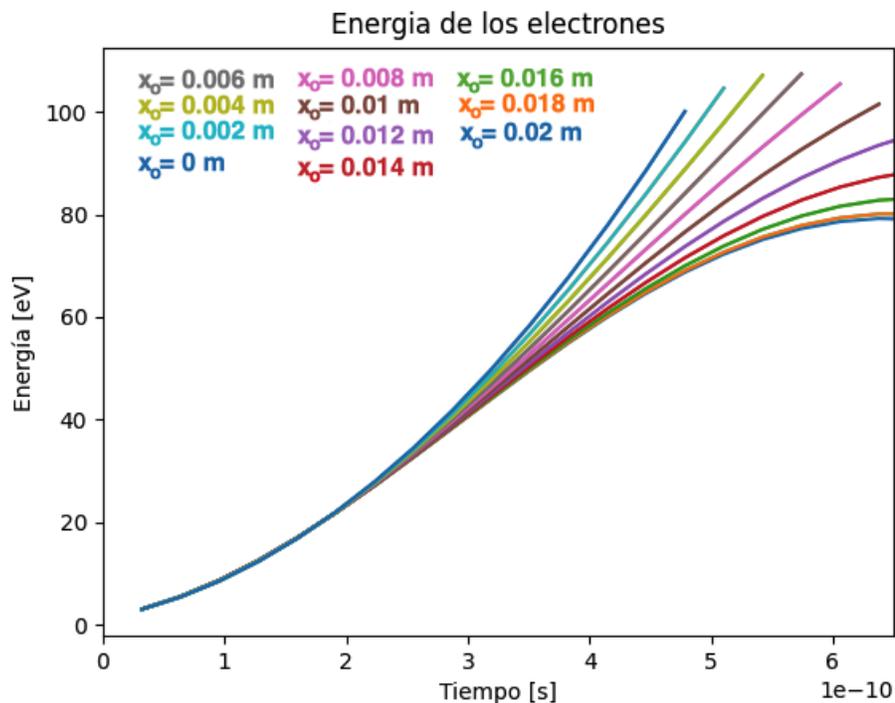
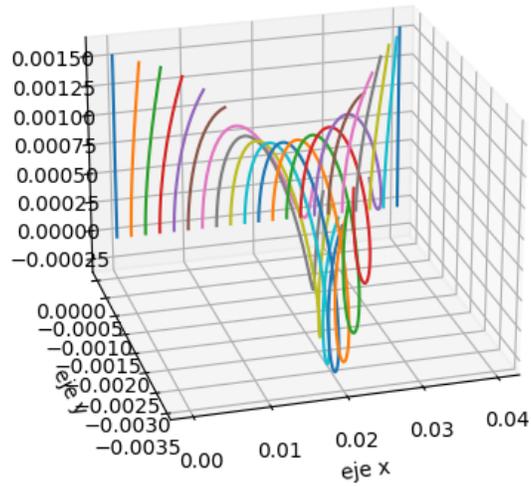


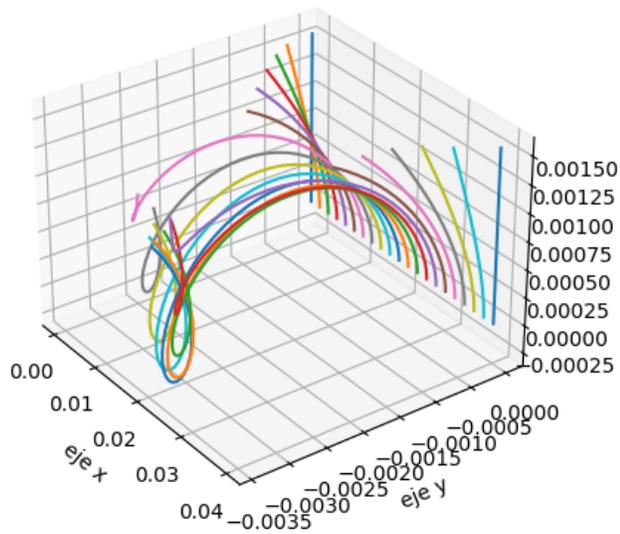
Figura 6.1: Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, el eje vertical es el de la energía medida en eV y el horizontal la evolución temporal (en segundos). Cada curva corresponde a una diferente posición inicial en el blanco. Gráfica obtenida con el modelo 1

Trayectorias de los electrones



(a) Vista desde el plano XZ

Trayectorias de los electrones



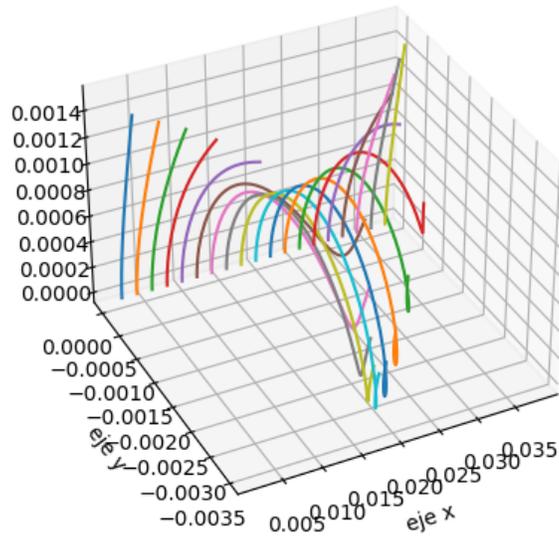
(b) Vista desde el plano YZ

Figura 6.2: Gráficas de las trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, con diferente posición inicial en el blanco, obtenidas con el modelo 1.

6.1.2. Modelo 2

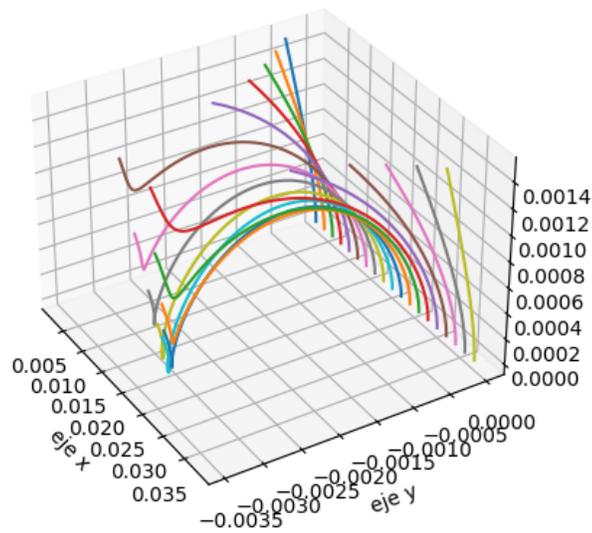
Con las constantes físicas mostradas en la tabla 6.1, se obtuvieron las gráficas de la figura 6.3 de las trayectorias de los electrones a través del modelo 2.

Trayectorias de los electrones



(a) Vista desde el plano XZ

Trayectorias de los electrones



(b) Vista desde el plano YZ

Figura 6.3: Gráficas de las trayectorias de los electrones (obtenidas con el modelo 2) con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, con diferente posición inicial en el blanco.

Con la finalidad de facilitar la programación y el despliegue de datos, todas las variables fueron normalizadas al radio de *sputtering*, con lo que el intervalo del eje X queda como $[0, 2]$ en lugar de $[0, 2R]$. De la misma manera que con el modelo anterior, para un mejor estudio del comportamiento de la trayectoria de los electrones se graficaron dos vistas, en la figura 6.3a se observa un comportamiento muy similar a la figura 6.2a, de igual manera primero se curvan hacia abajo las trayectorias de los electrones cuya posición inicial es más cercana al blanco; así mismo en la figura 6.3b se muestra como esas mismas trayectorias vuelven a dirigirse hacia arriba pero esta vez se observa un cambio de dirección más abrupto.

Dado que el programa obtiene las velocidades como paso intermedio para llegar de la aceleración a la posición, es posible calcular la energía en cada instante de tiempo gracias a la ecuación 5.13 y así de manera análoga al modelo 1, graficar la evolución temporal de la energía cinética de los electrones como se muestra en la figura 6.4.

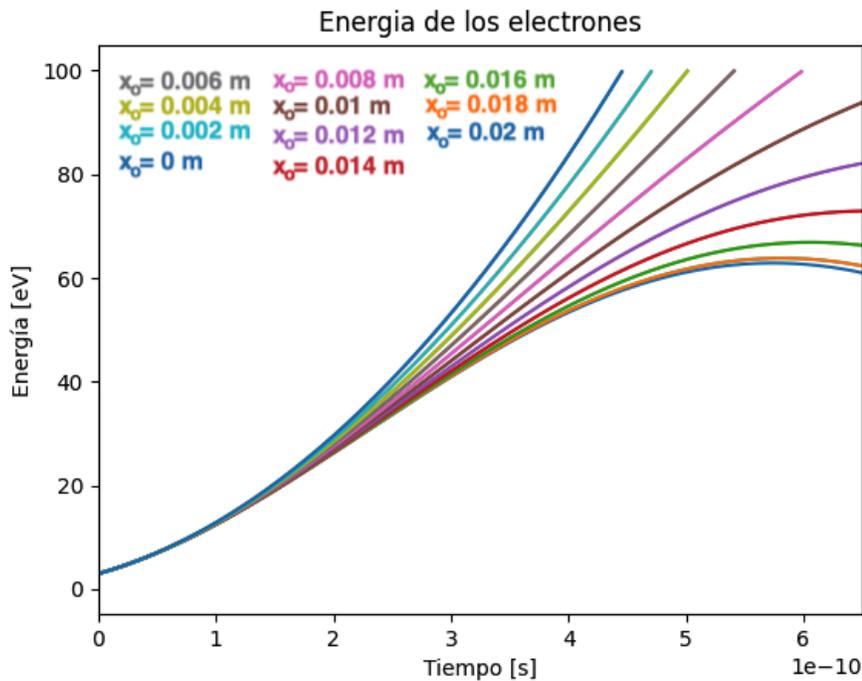


Figura 6.4: Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm, el eje vertical es el de la energía medida en eV y el horizontal la evolución temporal (en segundos). Cada curva corresponde a una diferente posición inicial en el blanco. Gráfica obtenida con el modelo 2

Un resultado importante es el de la densidad de los electrones sobre el blanco. Una primera aproximación para visualizar la densidad es la gráfica de la figura 6.5, en donde se observa la evolución temporal de las trayectorias en el plano XZ , se puede ver cómo los electrones se desvían hacia el centro del blanco, lo que origina el característico blanco de los sistemas de *sputtering* con magnetrón.

La gráfica 6.5 no nos dice cuáles electrones llegan primero al centro del blanco, es por ello que para hacer debidamente el cálculo de la densidad, es necesario analizar en cada tiempo cuáles son los electrones que se encuentran en ciertas regiones del plano XZ.

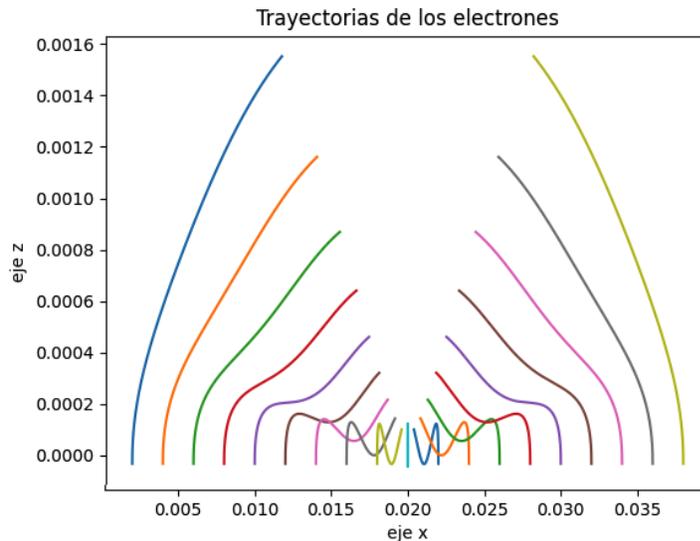


Figura 6.5: Cambio en las componentes x y z de las trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm a diferentes posiciones iniciales sobre el blanco x . El lapso de tiempo de este cambio es de 1 ns.

Usando el método descrito en el apéndice B.3 se obtuvieron las gráficas de contorno de la figura 6.6, el cálculo se hizo de tal forma que se simularan una cantidad de 150×10^2 electrones colocados en diferentes posiciones iniciales x_0 sobre el blanco.

Dada la condición de cuasineutralidad del plasma, hacer el cálculo de la densidad para los electrones es equivalente a hacer el cálculo de la densidad de los iones y por tanto de todo el plasma. La similitud entre estas dos cantidades es meramente cuantitativa puesto que cualitativamente, se espera que los iones no se vean afectados de la misma manera que los electrones por el campo magnético.

Dado que los electrones secundarios en diversos puntos del blanco se mueven a diferentes velocidades, con diferentes aceleraciones, la densidad en el plano XZ varía con cada tiempo como se muestra en la figura 6.6, entonces la densidad en el tiempo transcurrido desde 0 s hasta 0.88×10^{-9} s no es la de la figura 6.6d si no una suma de las densidades en cada intervalo de tiempo como se muestra en la figura 6.7.

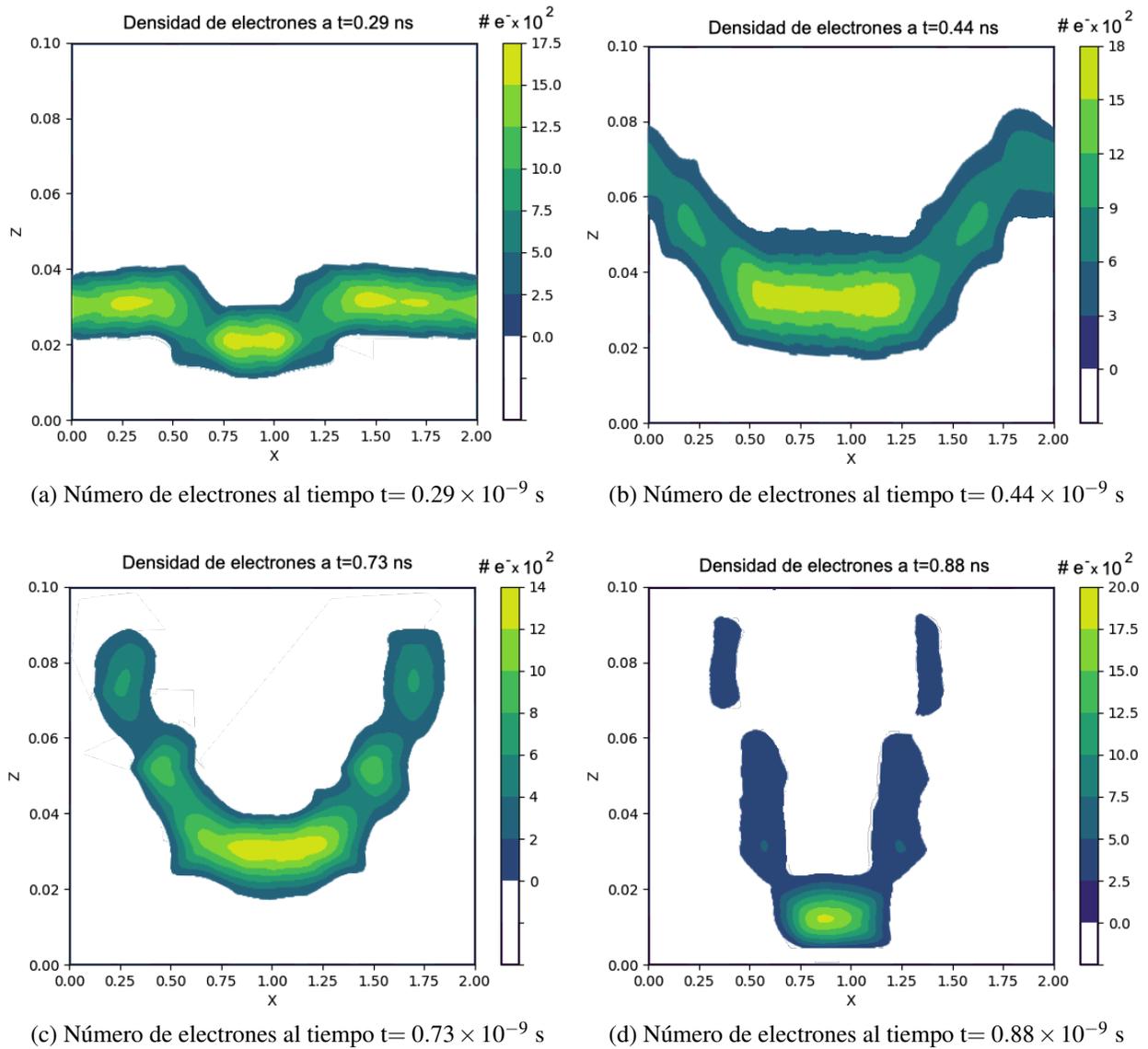


Figura 6.6: Gráficas del cambio de la densidad de los electrones a diferentes tiempos sobre el plano XZ , ambos ejes se encuentran normalizados a $R= 0.02$ m.

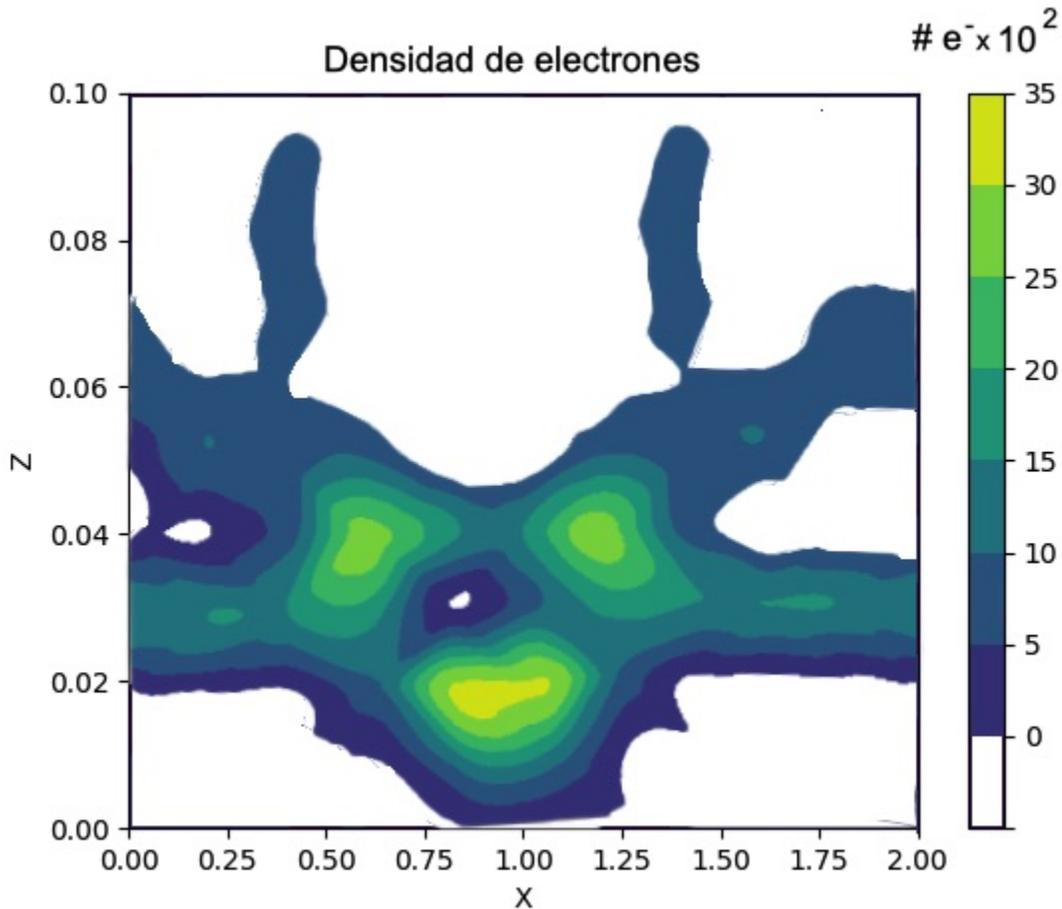
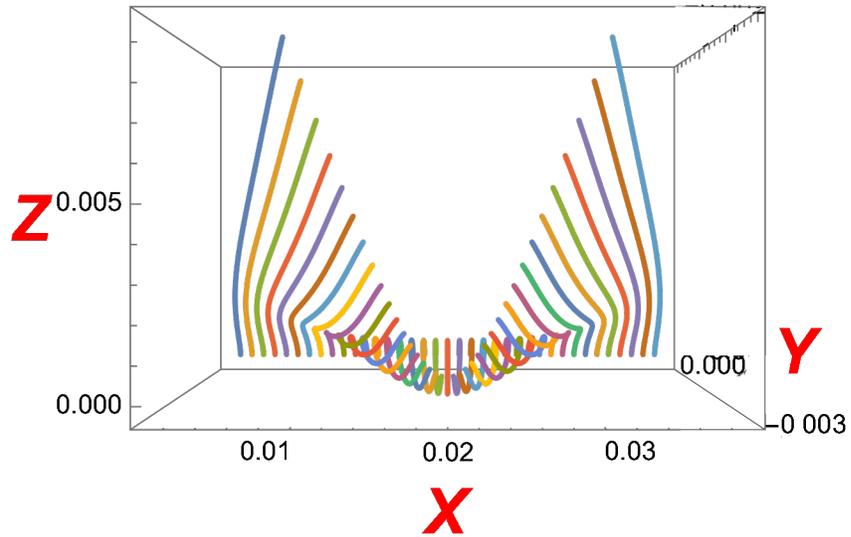


Figura 6.7: Densidad de electrones durante los primeros 8.8 ns, los ejes X y Z se encuentran normalizados a $R=0.02$ m.

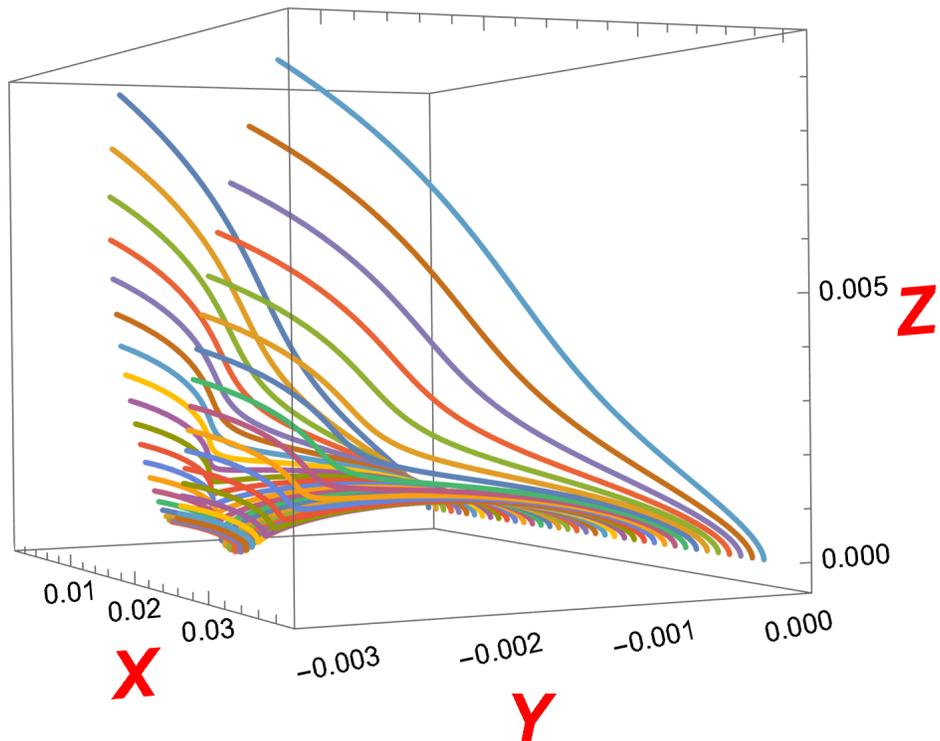
6.1.3. Modelo 3

Con los valores de los parámetros de la tabla 6.1 se resolvió el sistema de ecuaciones diferenciales con ayuda de **Mathematica**, de tal forma que las soluciones se dieran en diversas posiciones iniciales x_0 en el intervalo $[0, 2R]$. Además, el software permite la realización de la gráfica con los resultados obtenidos.

La figura 6.8 muestra el resultado del sistema de ecuaciones diferenciales para diferentes valores de x_0 , se observa que el comportamiento de las trayectorias más próximas al centro del blanco es más o menos el esperado, aunque las curvaturas de las trayectorias son menos pronunciadas. Esto puede deberse al algoritmo que utiliza el software o bien a la dificultad de imponer restricciones físicas adicionales al cálculo.



(a) Vista desde el plano XZ



(b) Vista desde el plano YZ

Figura 6.8: Trayectorias de los electrones con energía inicial de 3 eV a una altura inicial de 1 nm. Imagen obtenida con **Mathematica**

6.2. Cálculos realizados para iones

Dado que en cualquier sistema de sputtering los iones son de gran importancia, es necesario incluirlos en el estudio. Al ser de carga positiva los iones se aceleran hacia el cátodo, además al tener una masa mayor que la de los electrones, apenas se verán afectados por el campo magnético. Los parámetros utilizados en todos los cálculos fueron descritos en el capítulo anterior y se enlistan en la tabla 6.2

Parámetros para el cálculo		
Parámetro	Nombre de la variable	Valor
Carga He ⁺	q_{He^+}	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa He ⁺	m_{He^+}	$6.6463 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Carga Ar ⁺	q_{Ar^+}	$1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$
Masa Ar ⁺	m_{Ar^+}	$6.6327 \times 10^{-26} \text{ kg}$
Campo Eléctrico	E	$-62500 \frac{\text{V}}{\text{m}}$
Campo magnético sobre la superficie	B	0.03 T
Parámetro del campo magnético	R	$2 \times 10^{-2} \text{ m}$
Escala de tiempo	$\Delta\tau$	10^{-9} s
Altura inicial	z_o	10^{-2} m
Energía cinética inicial	K_o	100 meV

Tabla 6.2: Tabla de valores empleados para obtener los resultados de los cálculos realizados para iones de Helio y Argón

6.2.1. Modelo 1

Se obtuvieron las gráficas de las trayectorias de los iones de Helio y Argón producidos en el plasma con las condiciones y constantes físicas mostradas en la tabla 6.2. En la gráfica 6.9 se muestran la trayectorias de los iones de He⁺ con diferentes posiciones iniciales x_o a una altura de 1 cm por encima del blanco, mientras que con esas mismas características, la figura 6.10 muestra las trayectorias para los iones de Argón.

Esta simulación representa como se mueven las partículas producidas por la ionización del plasma que son aceleradas gracias a la diferencia de potencial hacia el cátodo. Si bien el comportamiento de los dos tipos de iones es el mismo, es posible notar una diferencia fundamental y es que los iones inciden en ángulos diferentes sobre el plano que representa a la superficie del blanco.

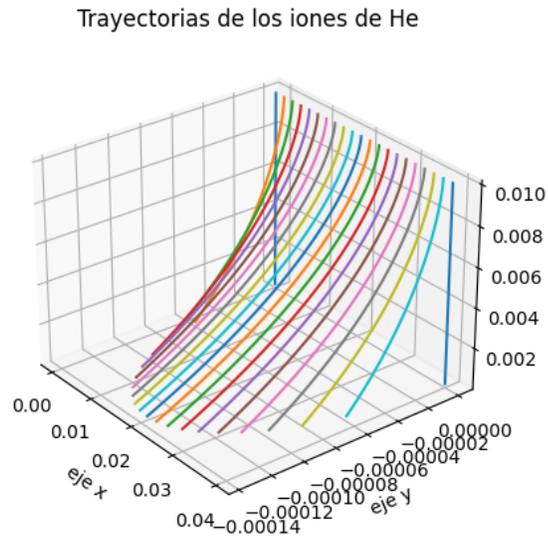


Figura 6.9: Trayectorias de los iones de He^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 1

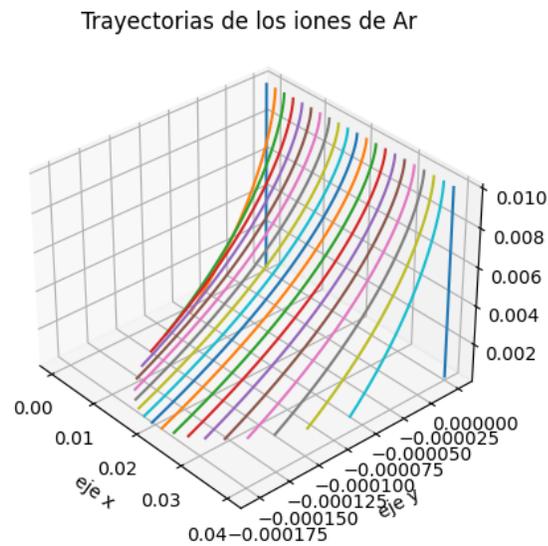


Figura 6.10: Trayectorias de los iones de Ar^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 1

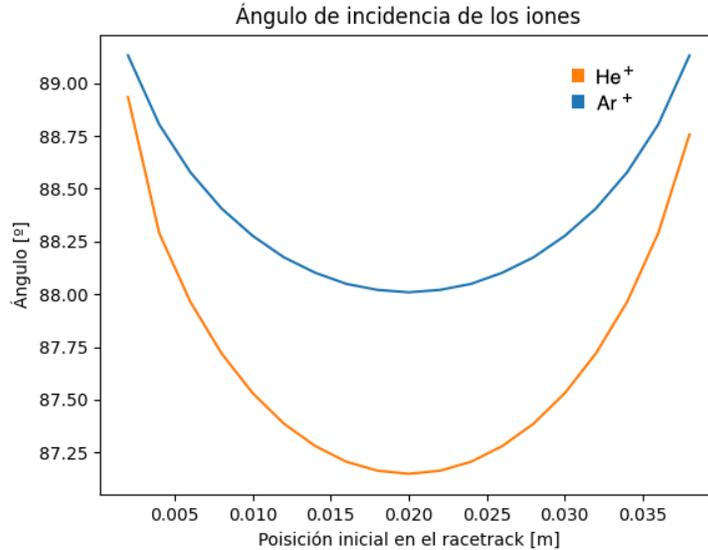


Figura 6.11: Ángulo de incidencia (eje vertical) de los iones de He⁺ y Ar⁺ con diferentes posiciones iniciales (eje horizontal) con una energía de 100 meV a una altura inicial de 1 cm. Gráfica obtenida con el modelo 1

Como se describió en el capítulo anterior, las trayectorias poseen la forma de la figura 5.4, por lo que ese método fue el aplicado para obtener el ángulo de incidencia de los iones.

Este cálculo se realizó para ambos iones en diferentes posiciones iniciales x_0 sobre el blanco. En la figura 6.11 se observa como cambia el ángulo para diferentes posiciones iniciales, además se nota una diferencia entre los dos iones.

6.2.2. Modelo 2

De manera análoga al modelo anterior, esta simulación representa las trayectorias de las partículas producidas por la ionización del plasma. Se obtuvieron las gráficas de la evolución del movimiento de los iones de Helio y Argón producidos en el plasma con las condiciones y constantes físicas mostradas en la tabla 6.2. En la gráfica 6.12 se muestran las trayectorias de los iones de He⁺ con diferentes posiciones iniciales x_0 a una altura de 1 cm por encima del blanco, la figura 6.13 muestra las trayectorias para los iones de Argón con esas mismas características.

Nuevamente, la diferencia entre las trayectorias de ambos tipos de iones, es el ángulo de incidencia sobre el plano que representa la superficie del blanco. La figura 6.14 muestra la diferencia entre los ángulos de incidencia para los iones de Helio y de Argón con diferentes posiciones iniciales x_0 sobre el blanco.

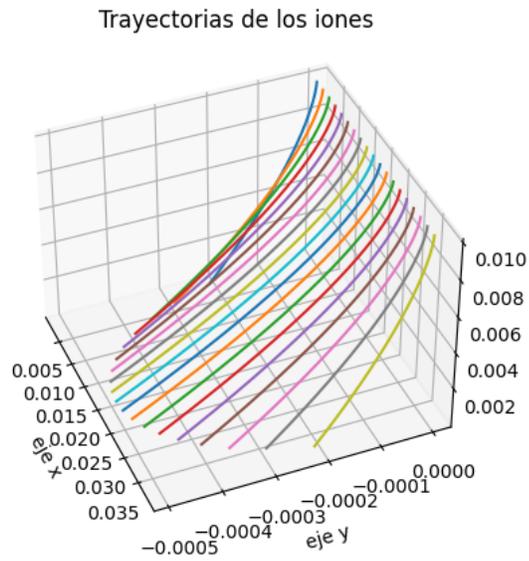


Figura 6.12: Trayectorias de los iones de He^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 2

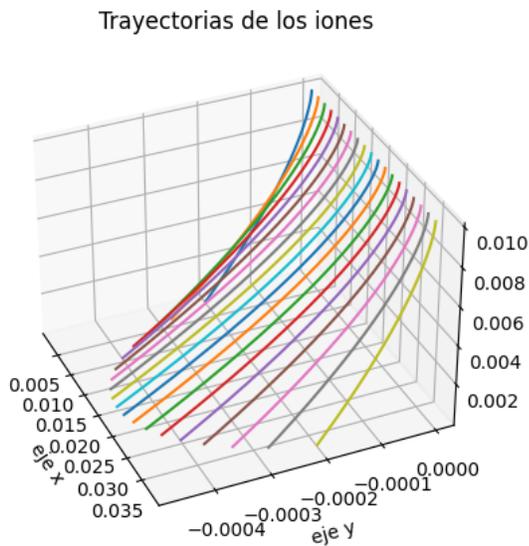


Figura 6.13: Trayectorias de los iones de Ar^+ con energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^{-9}$ s. Gráfica obtenida con el modelo 2

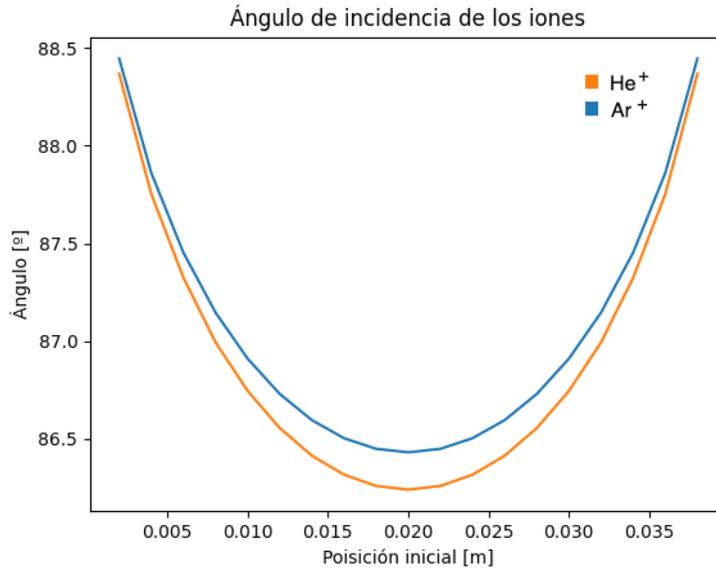


Figura 6.14: Ángulo de incidencia (sobre el blanco) de los iones de He^+ y Ar^+ con diferentes posiciones iniciales sobre el blanco, con una energía de 100 meV a una altura inicial de 1 cm. El eje vertical representa el ángulo medido en grados y el eje horizontal representa la posición inicial medida en metros. Gráfica obtenida con el modelo 2

Otro resultado importante del modelo es la evolución temporal de la energía cinética de los iones, ya que muestra como éstos son acelerados debido al potencial del cátodo, adquiriendo una mayor velocidad y por tanto una mayor energía. La figura 6.15 muestra el cambio en el tiempo de la energía cinética de los iones de Helio, mientras que la figura 6.16, representa el cambio para los iones de Argón.

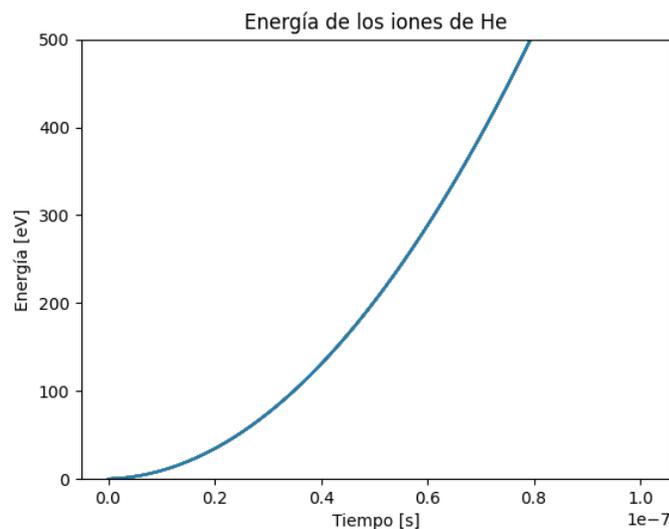


Figura 6.15: Gráfica de la energía cinética de los iones de He^+ como función del tiempo, el eje vertical es la energía cinética en eV, el eje horizontal es el tiempo medido en s.

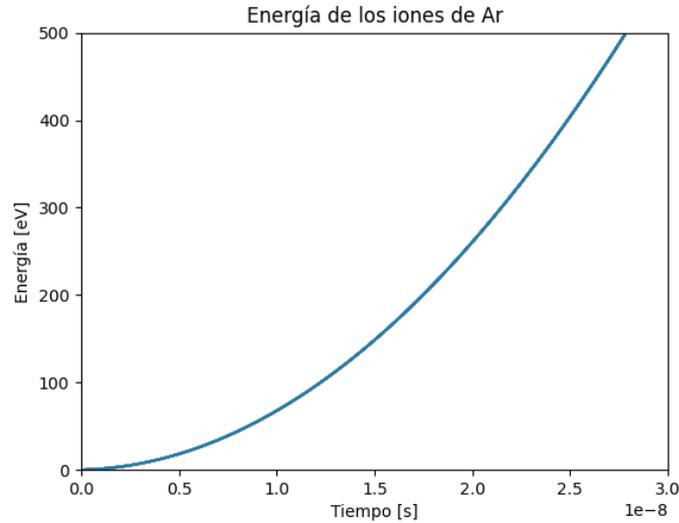


Figura 6.16: Gráficas de la energía cinética de los iones de Ar^+ como función del tiempo, el eje vertical es la energía cinética en eV, el eje horizontal es el tiempo medido en s.

6.2.3. Modelo 3

Con el software **Mathematica** también se obtuvieron las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales pero con los parámetros de la tabla 6.2 para obtener las soluciones de las trayectorias de los iones de las figuras 6.17 y 6.18.

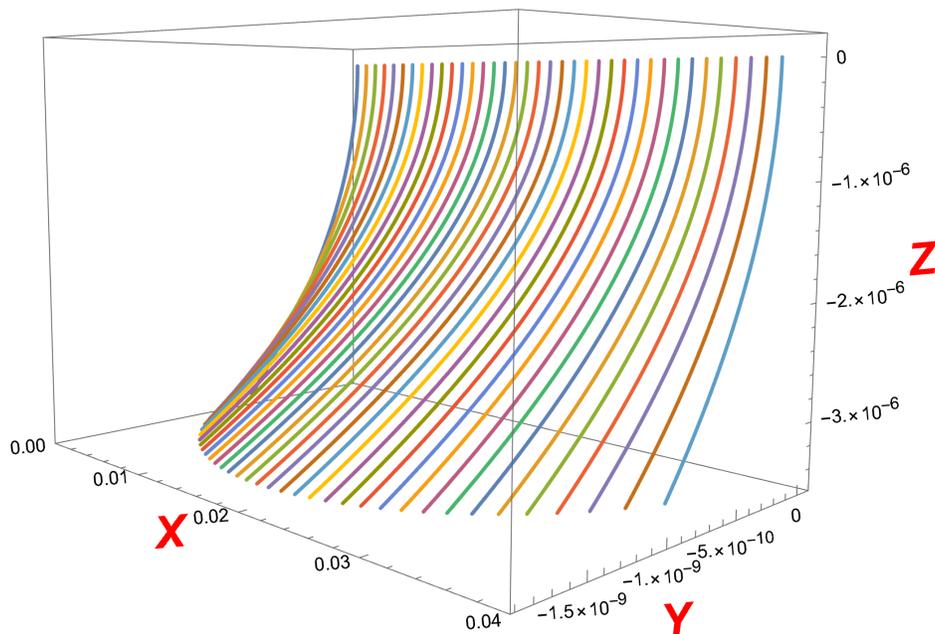


Figura 6.17: Trayectorias de los iones de He^+ con diferentes posiciones iniciales x_0 y energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^8$ s. Gráfica obtenida con **Mathematica**

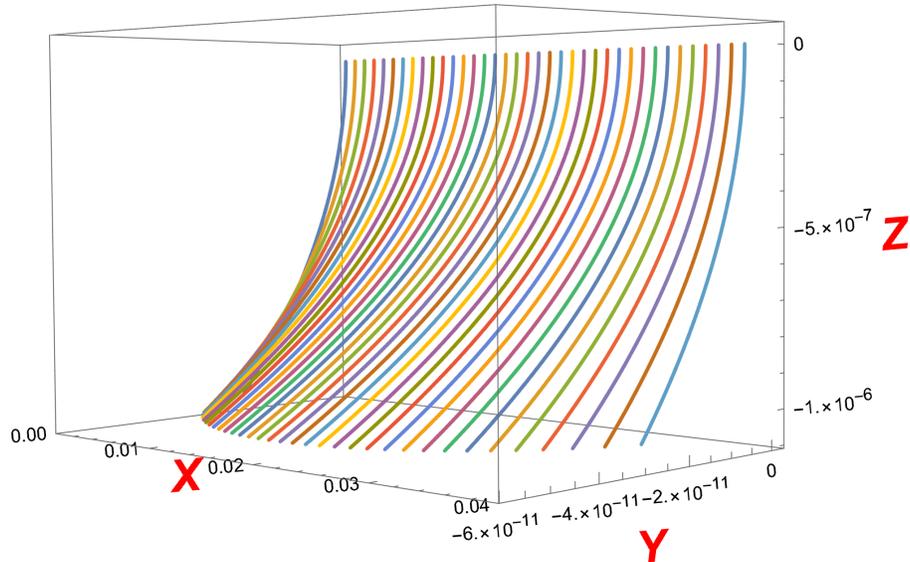


Figura 6.18: Trayectorias de los iones de Ar^+ con diferentes posiciones iniciales x_0 y energía cinética inicial de 100 meV a una altura inicial de 1 cm, en el instante de tiempo $\Delta t = 1 \times 10^8$ s. Gráfica obtenida con **Mathematica**

La figura 6.17 muestra las trayectorias de los iones de Helio, mientras que la figura 6.18 muestra las trayectorias de los iones de Argón. De nueva cuenta los resultados cualitativamente son los mismos, pero se puede observar una diferencia entre el alcance sobre el eje Y de ambos conjuntos de trayectorias. Siendo mayor el de los iones de Helio, lo cual implica que poseen un ángulo de incidencia menor al de los iones de Argón.

6.3. Comparación entre modelos

Con el fin de establecer las fortalezas de cada modelo es necesario compararlos entre sí. Comenzaremos por comparar cuantitativamente entre los modelos 1 y 2 ya que de estos se obtienen listas de datos que permiten tal análisis.

La figura 6.19 incorpora las gráficas de las trayectorias de los electrones obtenidas con los modelos 1 y 2 en una sola. Si bien el comportamiento del movimiento es muy similar, se observan ciertas diferencias entre ambos. El modelo 1 considera la aceleración constante, razón por la cual tiene una limitación para representar cambios abruptos en el movimiento, a diferencia del modelo 2. Por otra parte, el modelo 3 captura la principal característica de las trayectorias de los electrones, que es curvarse de manera más pronunciada conforme se acerca al centro del blanco. Aunque como ya se mencionó, el algoritmo le está dando demasiado peso a este fenómeno haciendo que crucen hacia el otro lado del centro.

También se comparó la evolución temporal de la energía cinética de los electrones en una selección de tres posiciones iniciales (en los extremos y en el centro del blanco). La figura 6.20 muestra la dependencia temporal de la energía cinética obtenida con los dos modelos en distintos valores de x_0 . Además de observar un comportamiento muy parecido, los valores cuantitativos también son

similares.

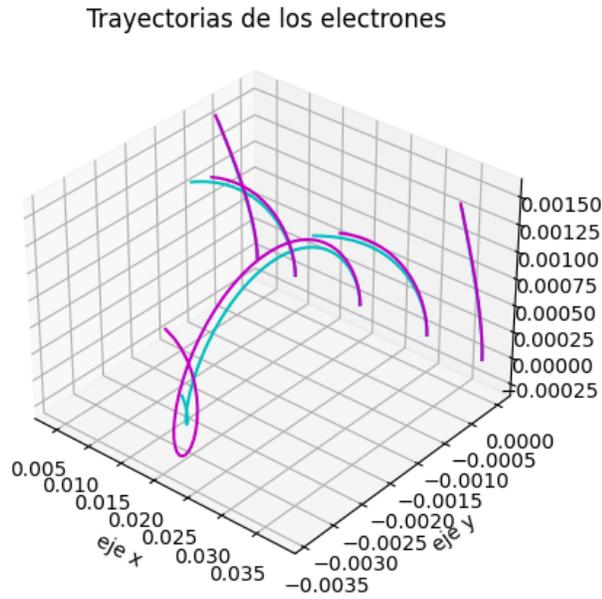


Figura 6.19: Trayectorias de electrones emitidos en diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).

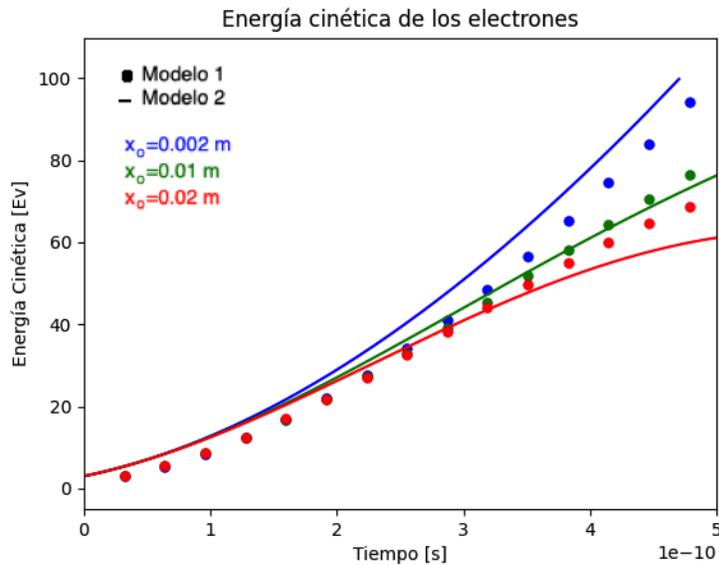


Figura 6.20: Evolución temporal de la energía cinética de los electrones con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.

Otro cotejo importante es el de las trayectorias de los iones. Las figuras 6.21 y 6.22 muestran las gráficas comparativas entre los modelos 1 y 2 de las trayectorias de los iones de Helio y Argón respectivamente, se puede ver que para los dos casos, la mayor diferencia entre los modelos se encuentra en el centro del blanco. Estos resultados son la base para verificar la comparación entre el ángulo de incidencia de los iones obtenido por los dos modelos.

La figura 6.23 muestra las gráficas del ángulo de incidencia de los iones de Helio obtenido a diferentes posiciones iniciales tanto del modelo 1 como del modelo 2. De manera análoga la gráfica 6.24 muestra la misma comparación pero para los iones de Argón. En ambos casos, la diferencia es más notoria en el centro del blanco al igual que en el análisis de las trayectorias de los iones.

Se comparó la evolución temporal de la energía cinética de ambos iones, dado que esta no depende de la posición sobre el blanco, en las figuras 6.25 y 6.26 se muestra una sola curva para cada modelo. Mientras que en la gráfica para los iones de Helio se observa una diferencia sustancial entre ambos modelos, para los iones de argón se tiene un comportamiento perfectamente compatible.

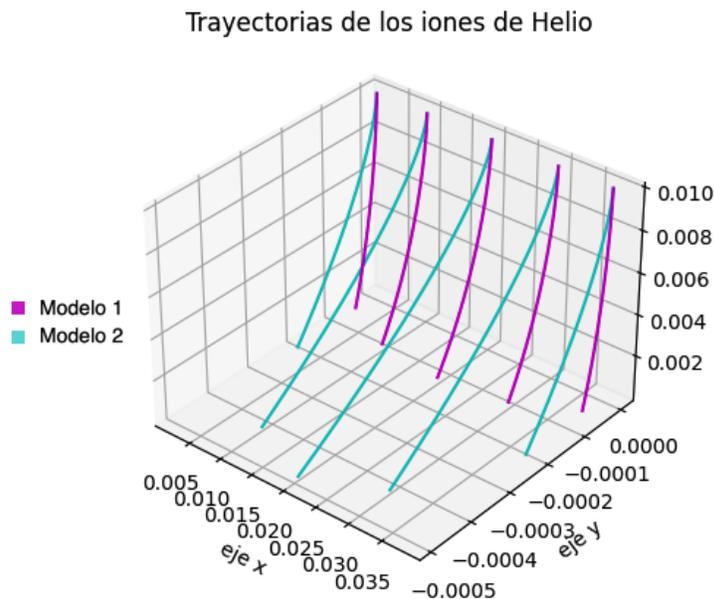


Figura 6.21: Trayectorias de los iones incidentes de He con diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).

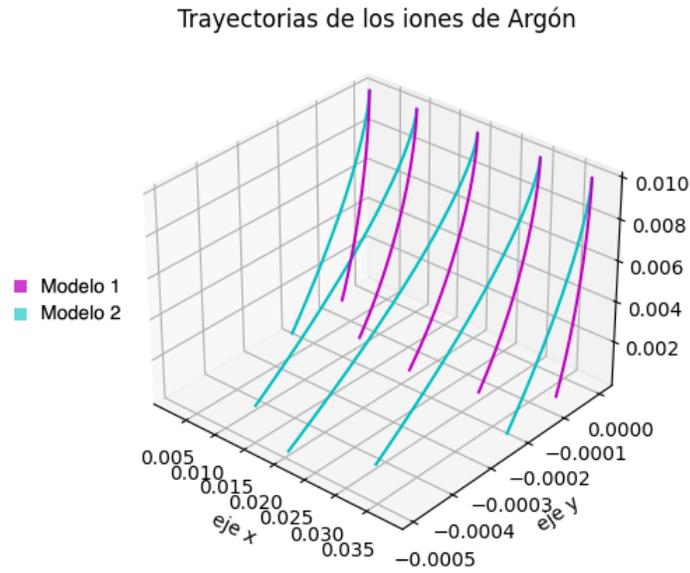


Figura 6.22: Trayectorias de los iones incidentes de Ar con diferentes posiciones iniciales, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 (magenta) y el modelo 2 (cian).

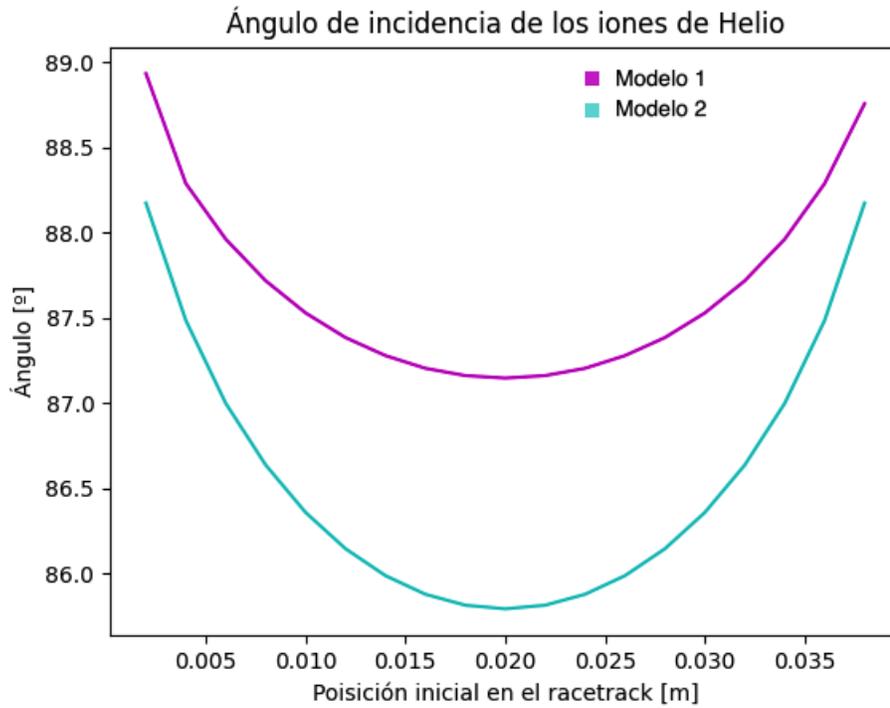
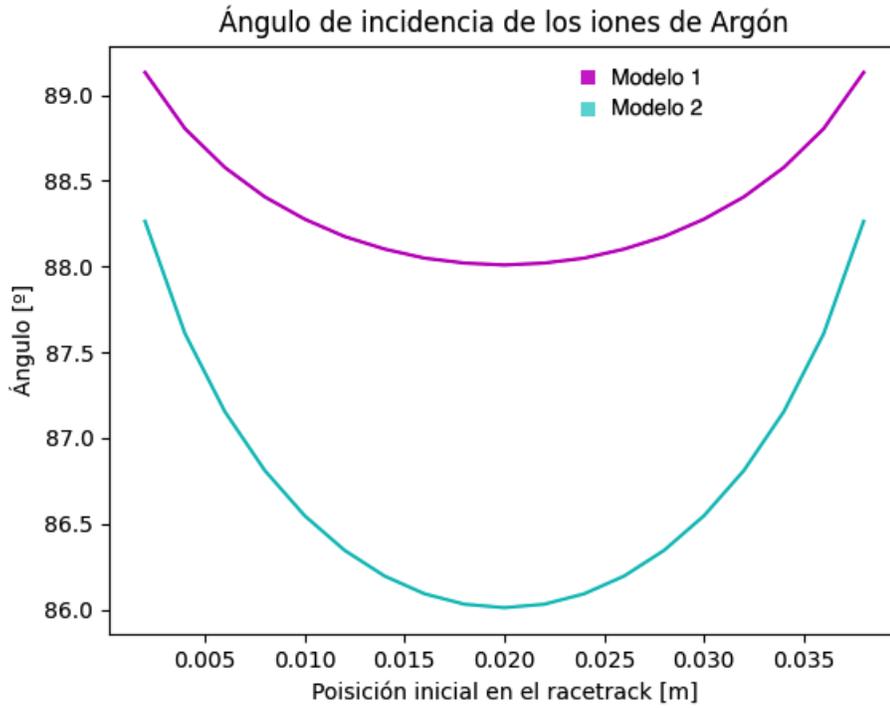


Figura 6.23: Ángulo de incidencia de los iones de He con diferentes posiciones iniciales en el blanco, comparación entre los modelos 1 y 2



[H]

Figura 6.24: Ángulo de incidencia de los iones de Ar con diferentes posiciones iniciales en el blanco, comparación entre los modelos 1 y 2

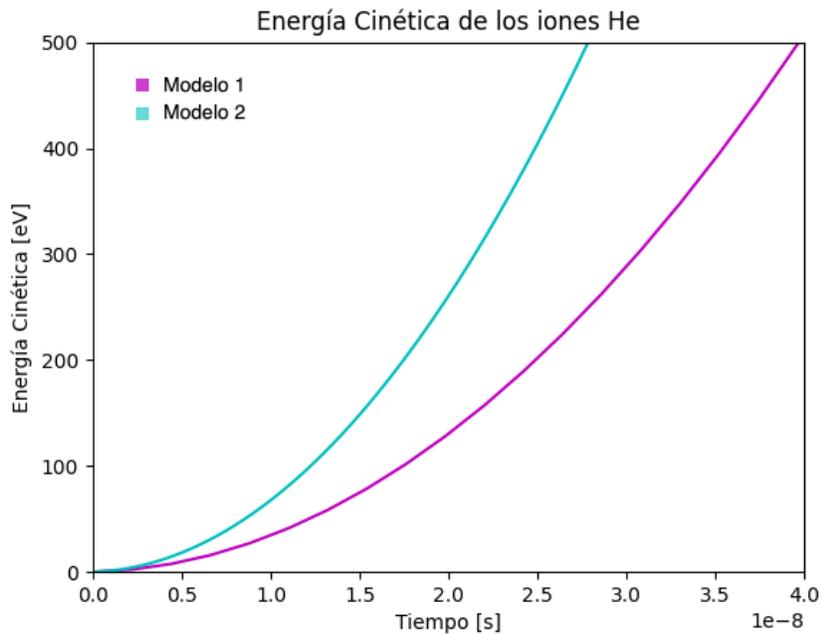


Figura 6.25: Evolución temporal de la energía cinética de los iones incidentes de He con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.

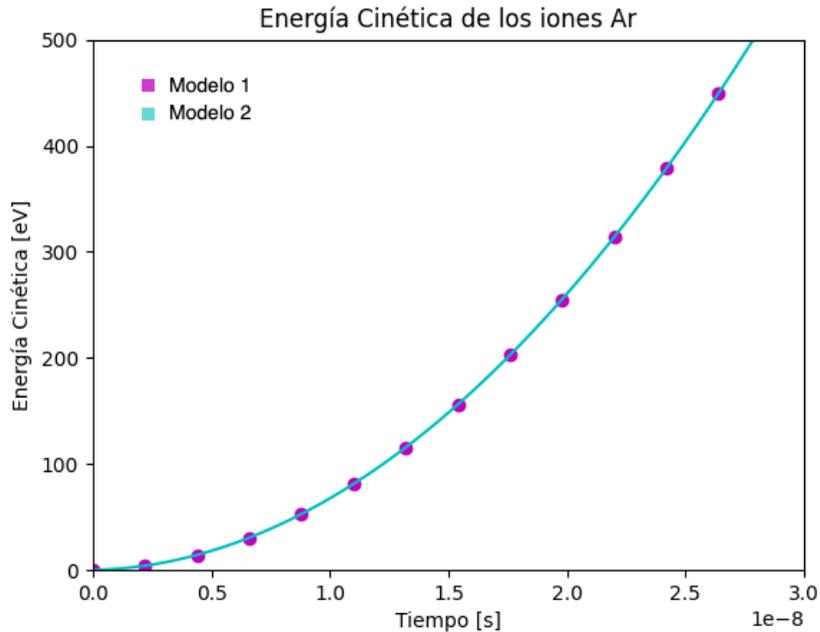


Figura 6.26: Evolución temporal de la energía cinética de los iones incidentes de Ar con diferente posición inicial, comparación entre los datos obtenidos con el modelo 1 y el modelo 2.

6.4. Discusión de resultados

Si bien la mayor cantidad de resultados se obtuvieron con el modelo 2, gracias a que se trata de la herramienta más poderosa para realizar cálculos, el haber implementado los tres modelos dio la pauta para poder comparar tres formas distintas de abordar el fenómeno y aún así obtener resultados similares al menos cualitativamente. Es interesante como un modelo simplificado en el que se evita resolver un sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden arroja resultados análogos al modelo más robusto pero que debido a su complejidad debe resolverse numéricamente.

En el cálculo de las trayectorias de los electrones, el modelo 3 muestra un comportamiento similar a los otros dos modelos al menos cualitativamente, sin embargo las diferencias cuantitativas son más notorias y abre interrogantes respecto a los métodos numéricos empleados por las funciones del programa. Es posible que se requieran comandos auxiliares para refinar la solución obtenida con este método y así aprovechar al máximo las herramientas que brinda **Mathematica** ya que es un programa ampliamente usado en cálculos científicos.

En cuanto a los iones, la diferencia máxima entre el ángulo de incidencia calculada con ambos modelos (figuras 6.23 y 6.24) de aproximadamente 2° es representativa, ya que como se puede ver en la figura 6.27 tomada de [57] en donde calculan el rendimiento de *sputtering* como función del ángulo, en la región entre 80° y 90° el rendimiento baja considerablemente en comparación a los demás ángulos. Por lo que es necesario mejorar el algoritmo de ambos modelos para obtener resultados más precisos y que no varíen tanto entre sí.

En cambio las gráficas de la energía de los iones de argón resultaron idénticas en ambos modelos,

además si bien podría suponerse que la distancia inicial de los iones al blanco (1 cm) es grande en comparación al sistema, que adquieran en un tiempo muy corto la energía de 500 eV indica que sí pueden bombardear el blanco y que es una distancia válida la que se utilizó para el cálculo.

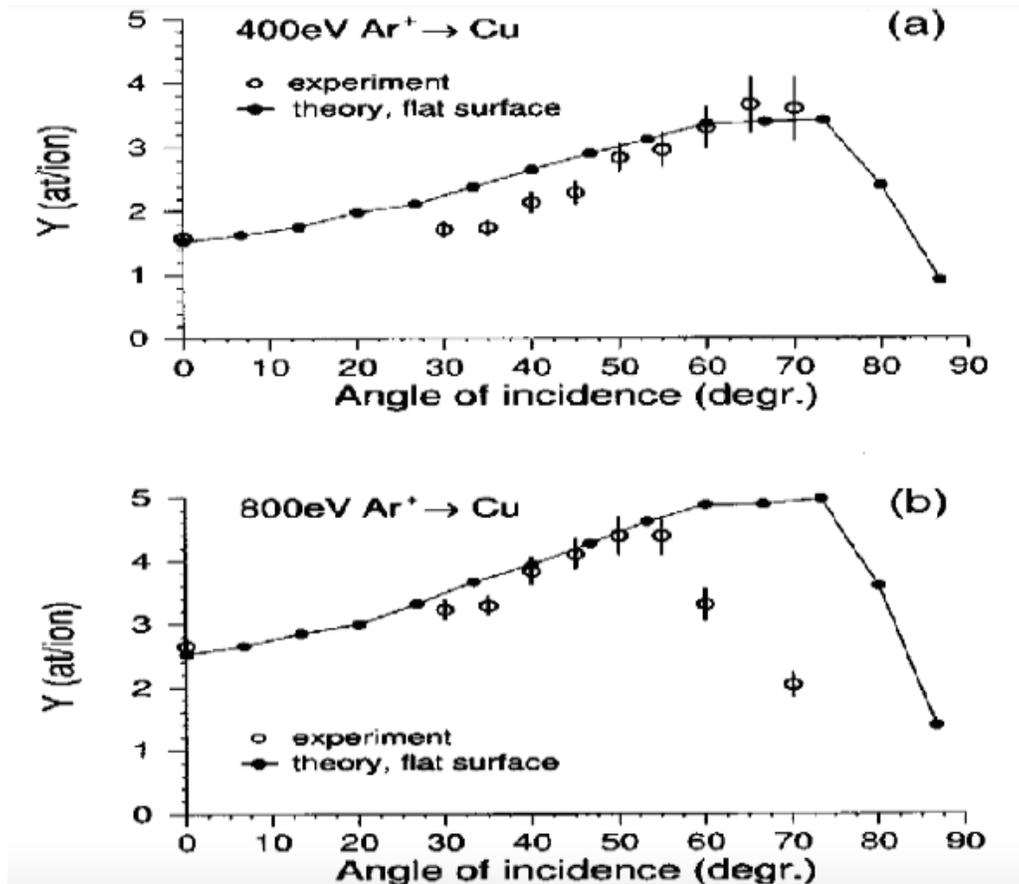


Figura 6.27: Dependencia del rendimiento de *sputtering* con el ángulo de incidencia sobre la superficie para iones de argón con energías de 400 eV (a) y 800 eV (b) sobre un blanco de cobre [57].

Las gráficas más importantes de este trabajo son las de la densidad, ya que brindan mucha información acerca del atrapamiento de los electrones en el sistema. En [58] midieron experimentalmente la densidad de plasma en un sistema de *sputtering* con magnetrón mediante una sonda de Langmuir; la figura 6.28 muestra sus resultados. Si bien en dicho experimento utilizan una fuente de alto voltaje pulsado, es posible observar que se origina la zona de atrapamiento de los electrones sobre el centro del blanco, lo cuál representa la misma física que en el modelo propuesto. La presión de operación mínima en un sistema de *sputtering* con magnetrón está directamente relacionada con el *racetrack* formado en el objetivo, ya que cuanto más grande es, mayor es la ionización del gas, por lo tanto, se pueden lograr valores más bajos de la presión. Como se demostró en este trabajo los electrones viajan en trayectorias azimutales, es decir a lo largo de una línea más larga en el centro del túnel creado por las líneas de campo magnético \mathbf{B} por encima de la zona de erosión, con esto pueden realizar más colisiones antes de abandonar el plasma confinado magnéticamente.

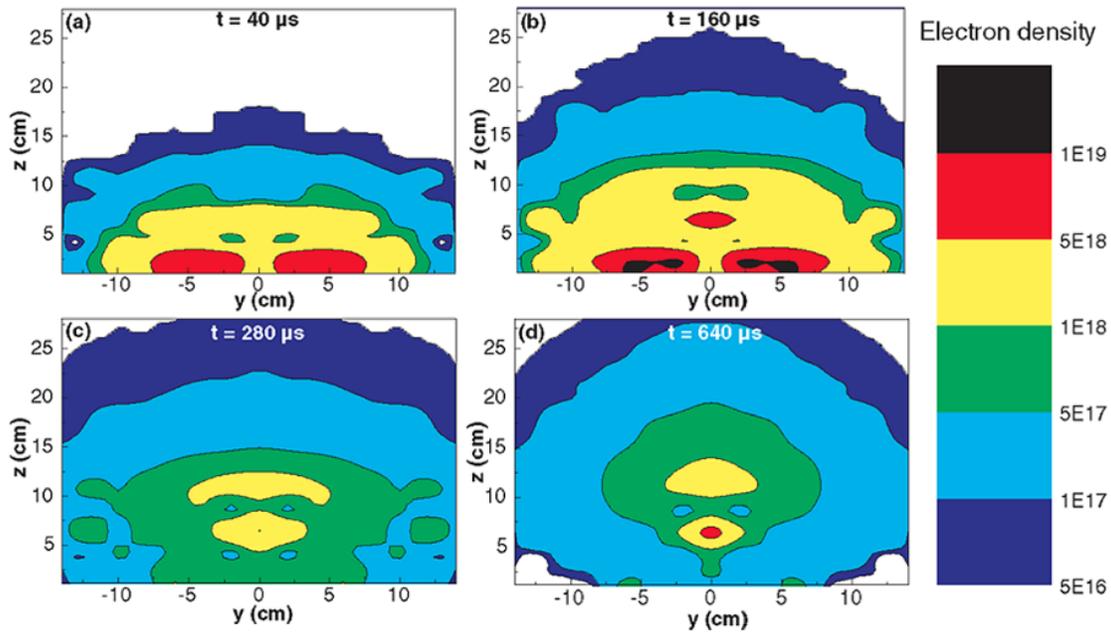


Figura 6.28: Variación temporal y espacial de la densidad de electrones sobre el objetivo. Los datos que se muestran en los gráficos (a)–(d) se tomaron 40, 160, 280 y 640 μs después del encendido por pulso, respectivamente. Se registró un plasma de alta densidad en forma de rosquilla que se expande desde el blanco del magnetrón en una etapa temprana de la descarga. Más tarde, en el resplandor del plasma, observaron electrones capturados por la botella magnética formada por el magnetrón desequilibrado. [58]

Existen numerosos estudios sobre la distribución del depósito producido por *sputtering* con magnetrón. En [59] realizaron mediciones experimentales del espesor de una película de MgO producida por *sputtering* con magnetrón, encontraron que la uniformidad del campo magnético y el gas de trabajo son los dos factores más importantes para que el depósito sea uniforme, ya que cuanto más fuerte es el campo magnético, más gruesa es la película.

Un campo magnético intenso puede controlar más electrones a su alrededor, y esto provoca más colisiones con el átomo de Ar, lo que da como resultado una tasa de pulverización más alta. Además el campo magnético mantiene atrapados a los electrones en el centro, lo que origina el *racetrack* y esto a su vez influye en el ángulo en el que las partículas abandonan el sustrato.

En [60] hicieron un estudio teórico-experimental de la distribución del depósito para diferentes blancos con patrones de erosión con la misma profundidad pero diferente geometría y diferente área utilizable del mismo. El patrón de erosión con el área más amplia de uso dio como resultado una distribución muy poco uniforme de la película. También encontraron que la distribución del depósito para un mismo blanco se ve modificada por la distancia blanco-sustrato, encontrando que cuanto más corta sea, el grosor de la película será mayor pero menos uniforme; por el contrario, mientras más larga la distancia del blanco al sustrato, la película será más delgada pero más uniforme.

Con ello vemos la importancia del campo magnético en el sistema, pero manipularlo de manera experimental es tardado y a menudo complicado por lo que contar con una herramienta no invasiva es de suma importancia a la hora de diseñar experimentos.

CONCLUSIONES

7.1. Conclusiones del trabajo

Los modelos 1 y 2 logran representar a través únicamente de la ecuación de la fuerza de Lorentz el atrapamiento de los electrones en el sistema de *sputtering* con magnetrón, si bien las gráficas de la densidad sólo se obtuvieron con el modelo 2, las trayectorias obtenidas con el modelo 1 son completamente compatibles, lo que indica resultados semejantes para la densidad. Sin embargo, implementar estos modelos en un programa de cómputo requiere tiempo; es por ello que puede realizarse un estudio rápido mediante el uso de **Mathematica** ya que se sabe cuáles son sus limitaciones.

Los resultados obtenidos son una buena base para entender cómo influye la densidad del plasma en el proceso de *sputtering* y la importancia del confinamiento magnético en la producción de depósitos con esta técnica, ya que se puede realizar un estudio teórico de la forma del campo magnético y su influencia en la densidad del plasma a través del atrapamiento de los electrones. Una de las grandes limitantes del proceso de *sputtering* con magnetrón es el bajo aprovechamiento de los blancos (menor al 30%), además los materiales llegan a ser muy costosos al ser altamente puros, por lo que es sumamente útil emplear el estudio para buscar una configuración magnética adecuada que permita un mayor aprovechamiento del blanco. Es decir, cambiando la geometría e intensidad del campo magnético en el modelo 2 se puede buscar atrapar a los electrones en una zona mayor del blanco, con ello se evita manipular físicamente el aparato y teniendo una idea preconcebida de la configuración experimental pueden recudirse los tiempos de experimentación.

De igual forma, al modificar el atrapamiento de los electrones en el sistema que está directamente relacionado con el patrón de erosión que se formará en el blanco, este a su vez influye en el depósito, la forma de la erosión del blanco repercute en el ángulo de incidencia de los iones con la superficie y necesariamente cambia el rendimiento de *sputtering*, lo que a su vez afectará la cantidad y distribución del depósito.

Un mejor conocimiento de los fenómenos físicos involucrados en el proceso son las bases para reconocer las limitaciones y las fortalezas del *sputtering* con magnetrón y son fundamentales para

la mejora continua no sólo del proceso sino del diseño y por consiguiente de sus productos. Así mismo una buena comprensión del fenómeno de la ionización del plasma y de como influye en características tales como la presión de trabajo y rendimiento de Sputtering ayudarán a que los procesos de fabricación de películas delgadas mediante esta técnica sean mucho más eficientes. Por otra parte, este trabajo abre muchas opciones de estudio para el futuro, pues como ya se mencionó, la programación de los primeros dos modelos es laboriosa por lo que una vez listos dan pie a hacer una exploración de diversas condiciones experimentales posibles dentro de un modelo teórico.

7.2. Trabajo futuro

En [61] estudian características del plasma de descarga, como la temperatura de los electrones, la densidad de los mismos y su variación con el voltaje aplicado y la presión de trabajo del gas dentro de la cámara de vacío. Como resultado, reportan que la densidad de los electrones disminuye con el aumento del voltaje aplicado a presión constante. Según [61] esto se atribuye al aumento de la colisión de los electrones con el átomo de argón, lo que conduce a una disminución de la energía de los electrones. Es posible comparar dicho resultado con el modelo propuesto en esta tesis, ya que el programa permite variar el voltaje y verificar si se obtiene el mismo resultado.

Por otra parte, el código programado puede ser mejorado e incorporar la geometría del magnetrón circular e incluso hacerlo más robusto incluyendo más física involucrada en el proceso que no sea sólo la fuerza de Lorentz. Será posible explorar diversas condiciones iniciales, y configuraciones e incluso combinarlo con mediciones experimentales par tal vez poder llegar a un modelo que prediga las características físicas del depósito y hacer más eficiente el proceso.

A

CAMPO MAGNÉTICO

El campo magnético formado por la configuración de imanes de la figura 4.2 varía conforme a la distancia a los imanes, tanto en el plano paralelo a la superficie como en el perpendicular a ella. El grupo Plasmat del IIM, realizó experimentalmente la medición del campo magnético con un magnetómetro. Fueron registrando la intensidad de campo magnético en diferentes posiciones sobre la superficie del blanco, para después a una cierta altura repetir el procedimiento, obteniendo así la variación sobre la superficie del blanco cada 2 mm de altura. Los puntos sobresalientes de las mediciones experimentales del campo magnético de hasta 5 diferentes magnetrones reportados por el grupo son: se observaron diferencias en como cambia el campo desde $x = 0$ hasta $x = 2R$ para cada magnetrón, pero todos compartían que en las posiciones $x = 0$ y $x = 2R$ la componente $B_x = 0$ y $B_z = B_{\max}(z)$, para $x = R$ $B_x = B_{\max}(z)$ y $B_z = 0$, el máximo valor del campo variaba lentamente con z

Con los datos registrados realizaron un ajuste estadístico de las curvas resultantes al graficar los datos, con lo que las ecuaciones generadas para el campo paralelo a la superficie

$$B_{\parallel} = (721.5 - 127.5z + 7.2z^2)(-0.64 + 23.79x - 0.57x^2 + 0.07x^3 - 0.004x^4 + 7.6 \times 10^{-5}x^5 - 5.06 \times 10^{-7}x^6) \quad (\text{A.1})$$

donde x es la coordenada paralela a la superficie y z la coordenada perpendicular. Por otra parte, la componente perpendicular del campo cambia como

$$B_{\perp} = \sqrt{B_{\max}^2 - B_{\parallel}^2} \frac{(x - 25)}{|x - 25 + 1 \times 10^{-20}|} \quad (\text{A.2})$$

Donde B_{\max} es el campo magnético medido sobre la superficie. El comportamiento de estas ecuaciones se encuentra representado en la gráfica A.1a para la componente paralela y A.1b para la componente perpendicular.

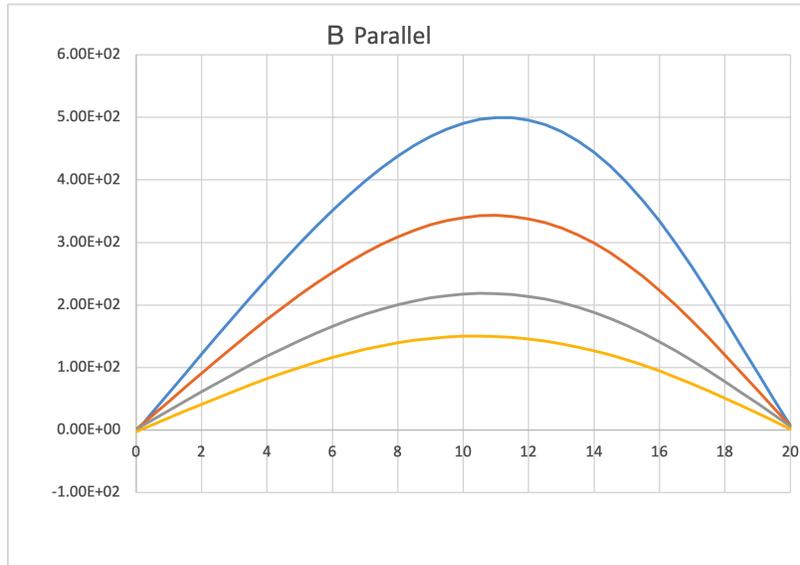
Al realizar un ajuste estadístico de sus datos experimentales, encontraron que la componente del campo magnético perpendicular a la superficie disminuye con la altura conforme a la expresión

$$B'(z) = \frac{0.03[0.0231 \exp\{-z/0.00575\} + 0.0037]}{0.02681} \quad (\text{A.3})$$

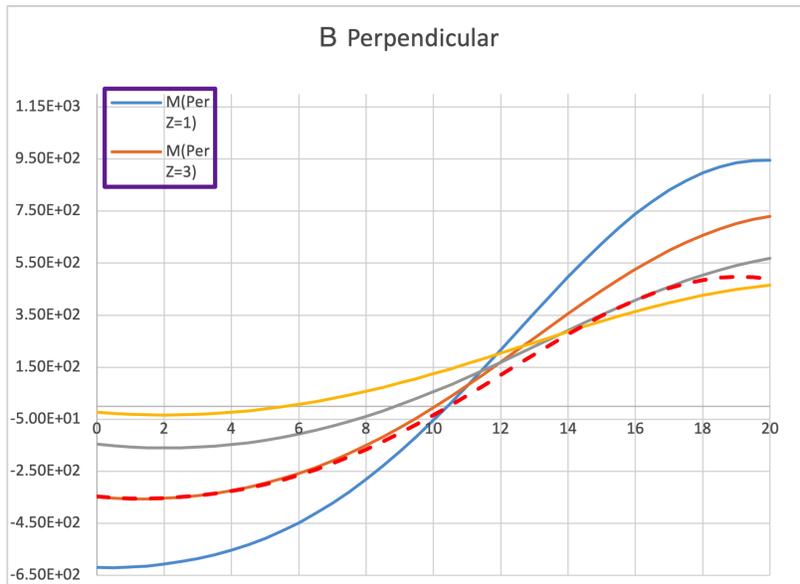
que puede ser escrita como

$$B'(z) = A_1 e^{-kz} + A_2 \quad (\text{A.4})$$

con A_1 , A_2 y k constantes.



(a) B_x vs x



(b) B_z vs x

Figura A.1: Gráficas a) de la componente del campo magnético paralela a la superficie a diferentes alturas Z , b) del campo magnético perpendicular a la superficie a diferentes alturas Z ; el eje horizontal representa la posición en X sobre la superficie (en mm) y el eje vertical el campo magnético medido en G. Realizadas por el grupo Plasmat del IIM, facilitada por el Dr. Stephen Muhl.

B

SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

B.1. Métodos de Runge-Kutta

Un ejemplo de métodos poderosos para resolver ecuaciones diferenciales son los de Runge-Kutta. La solución numérica de una ecuación diferencial ordinaria de la forma $y' = f(x, y)$ se obtiene a través de una secuencia de términos, en donde cada uno de ellos tiene la forma general

$$y_{i+1} = y_i + \phi h, \quad (\text{B.1})$$

donde ϕ es una pendiente estimada que se usa para extrapolar desde un valor anterior y_i a un nuevo valor y_{i+1} en un cierto intervalo (incremento) h (ver figura B.1). Como cada paso a calcular requiere del valor anterior, esto forma una relación de recurrencia y se pueden obtener tantos valores como se deseen. En la ecuación B.1 la variable ϕ es en realidad una función que se conoce como función incremento [62], y puede interpretarse como una pendiente representativa en el intervalo. Se puede escribir de la forma general

$$\phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n, \quad (\text{B.2})$$

donde las a_i son constantes y las k con de la forma

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_i, y_i) \\ k_2 &= f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h) \\ k_3 &= f(x_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h) \\ &\cdot \\ &\cdot \\ &\cdot \\ k_n &= f(x_i + p_{n-1} h, y_i + q_{n-1,1} k_1 h + q_{n-1,2} k_2 h + \dots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h) \end{aligned}$$

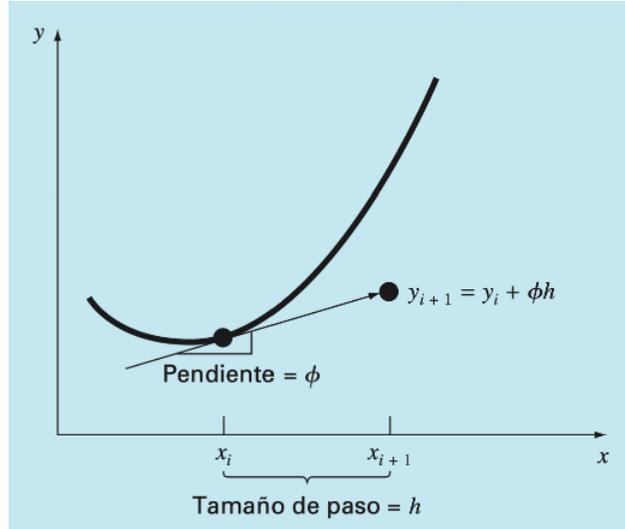


Figura B.1: Ilustración gráfica del método de un paso.[62].

Donde las p_i y las q_{ij} son constantes. Dependiendo del número de términos n en la función incremento, será el orden del método de Runge-Kutta. Una vez decidido el orden del método R-K con el que se va a trabajar, se iguala la ecuación B.1 a la expansión en serie de Taylor y se obtienen los valores para las constantes a_i , p_i y q_{ij} .

B.1.1. Método de Runge-Kutta de cuarto orden (RK4)

El método de Runge-Kutta de cuarto orden es uno de los más ampliamente utilizados para resolver ecuaciones diferenciales, en él se emplea la pendiente representativa ϕ como un promedio ponderado de cuatro pendientes k_i con $i = 1, 2, 3, 4$ como se muestra en la figura B.2 Existen muchas versiones del método RK4, una de las más comúnmente empleadas (y que fue utilizada en este trabajo) es la siguiente:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h, \quad (\text{B.3})$$

donde

$$k_1 = f(x_i, y_i) \quad (\text{B.4})$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right) \quad (\text{B.5})$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right) \quad (\text{B.6})$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + h) \quad (\text{B.7})$$

Es sencillo ver que las condiciones iniciales (x_o, y_o) son el paso inicial, en dónde se obtendrían las constantes k , por ejemplo $k_1 = f(x_o, y_o)$.

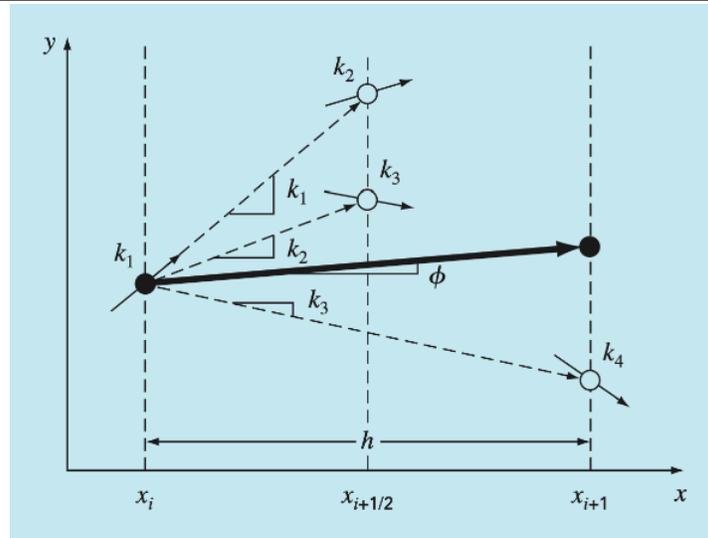


Figura B.2: Representación gráfica de las pendientes estimadas empleadas en el método RK de cuarto orden[62].

B.2. Trayectoria.c

El programa desarrollado en lenguaje C para obtener las trayectorias de los electrones del plasma trabaja con los métodos numéricos descritos en el capítulo anterior. Utilizando el método de Runge-Kutta se escribió la parte del código que resuelve el sistema de tres ecuaciones diferenciales dado por las ecuaciones (5.2-5.3), cuyas condiciones iniciales y constantes físicas se muestran en la tabla 6.1. El código resuelve las ecuaciones diferenciales dando la posición en cada instante de tiempo con incrementos de nanosegundos, dicho incremento puede variarse modificando el intervalo de tiempo y el número de pasos del método numérico.

Una vez obtenidas las soluciones, el código llama al programa Gnuplot para realizar gráficas, sin embargo las gráficas reportadas en esta tesis se hicieron a través de python debido a su mejor apariencia visual.

```
//
// Trayectoria.c
//
// Trayectoria de electrones en un sistema de sputtering con magnetrón
//
// Created by Kassandra Salguero on 16/01/20.

#include <stdio.h>
#include <math.h>

#define n 1000 //numero de pasos
#define ne 20 // numero de partículas
#define f1(t,x,x1,y,y1,z,z1) ((x1)) //función derivada x AUXILIAR
#define f2(t,x,x1,y,y1,z,z1) (w*(y1)*Bz) //función derivada x1 (segunda derivada de x)
#define f3(t,x,x1,y,y1,z,z1) ((y1)) //función derivada y AUXILIAR
#define f4(t,x,x1,y,y1,z,z1) (w*(z1)*Bx-w*(x1)*Bz) //función derivada y1 (segunda derivada de y)
#define f5(t,x,x1,y,y1,z,z1) ((z1)) //función derivada z AUXILIAR
#define f6(t,x,x1,y,y1,z,z1) (qe-w*(y1)*Bx) //función derivada z1 (segunda derivada de z)

int main(){

    /////////////////////////////////////////////////// DECLARACIÓN DE VARIABLES ////////////////////////////////////////

    //variables físicas
```

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

```

double q; //carga de la partícula
double m; //masa de la partícula
double B; //campo magnético sobre la superficie
double BR; //campo entre R
double Bx; //campo en x
double Bz; //campo en z
double Bm; //magnitud variable del campo magnético
double E; //campo eléctrico
double R; //Radio del sheet
double w; //frecuencia de ciclotrón
double V; //magnitud de la velocidad
double Ke; //Energía cinética por trayectoria
double Ei; //energía inicial en eV

//variables principales (normalizadas)

double x[ne+1][n+1]; //posición en x para la partícula ne
double y[ne+1][n+1]; //posición en y
double z[ne+1][n+1]; //posición en z
double t; //tiempo
double x1[ne+1][n+1]; //velocidad en x para la partícula ne
double y1[ne+1][n+1]; //velocidad en y
double z1[ne+1][n+1]; //velocidad en z

//variables no normalizadas

double X;
double Y;
double Z;

//variables auxiliares

double h; //incremento de tiempo
double a; //límite inferior del intervalo de tiempo
double b; //límite superior del intervalo de tiempo
double qe; //variable auxiliar que contiene carga, campo eléctrico y masa
double mR; //producto de la masa por el radio
double R2; //radio elevado al cuadrado
double RX;
double zi; //altura inicial en z
double vz; //velocidad inicial en z
double delta; //incremento de la posición inicial en x
double Emax; //energía cinética máxima
double eV; //conversión de Joules a electronVolts
double Jo; //conversión de electronVolts a Joles
double g; //número de partículas para hacer el cálculo

//auxiliares RK4

double k11,k12,k13,k14; //pendientes variables de x
double k21,k22,k23,k24; //pendientes variables de y
double k31,k32,k33,k34; //pendientes variables de z

double m11,m12,m13,m14; //pendientes variables de x1
double m21,m22,m23,m24; //pendientes variables de y1
double m31,m32,m33,m34; //pendientes variables de z1
int i,j,k,l; //variables contadoras

////////////////// VALORES DE LAS CONSTANTES ////////////////////

g=ne;
q=-1.602E-19; //carga en Coulombs DEL ELECTRÓN
m=9.1094E-31; //masa en Kg electron 9.1094E-31 proton 1.6726E-27 //helio 6.64E-27
Ei=3; // Energía inicial en eV
zi=3E-9; // Altura inicial en metros

//valores de las constantes
eV=6.242E18; //Equivalencia en eV de 1 Joule
Jo=1.6022E-19; //Equivalencia en Joules de 1 eV

//condiciones iniciales
B=0.03; //campo magnético en Teslas
E=-62500; //campo eléctrico en V/m
R=0.02;
Emax=100; //energia maxima en eV
//Cálculos

vz=sqrt((2*Jo*Ei)/m); //velocidad inicial en z

//otras variables auxiliares
R2=R*R;
mR=m*R;
w=q/m; // frecuencia de ciclotron entre el campo
qe=q*E/mR;
delta=2/g; //x desde 0 hasta 2R

// intervalo (a,b) (escala de tiempo)
a=3E-11;
b=1.5E-9; //primeros calculos 1E-9

```

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

```

h=(b-a)/n;

//se abre archivo de impresion de datos
char nombre[80]={0}; //almacenar nombre del archivo de trayectorias
char nom[80]={0}; //almacenar nombre del archivo de energías

FILE *par=fopen("CB.txt", "a"); //Se abre un archivo de texto para alojar los parámetros

//diferentes posiciones iniciales (de 0 a 2) pues esta normalizada por la R
for(j=0; j<=g;j++){ //x va de 0 a 2R
//Archivos para las trayectorias
sprintf(nombre, "datx%i.txt",j);
FILE *dat=fopen(nombre,"w");
//Archivos para las energías
sprintf(nom, "datE%i.txt",j);
FILE *data=fopen(nom,"w");
//CONDICIONES INICIALES//
x1[j][0]=0; //velocidad inicial en x para la partícula j
x[j][0]=j*delta; //posición inicial en x para la partícula j
y[j][0]=0;
z[j][0]=zi/R; //altura de un nanometro (normalizada a R)
//velocidades iniciales (en metros sobre segundo)
y1[j][0]=0;
z1[j][0]=vz/R; //normalizada a R
fprintf(par,"Particula %i \n",j);
fprintf(par,"Bx Bz X \n");
//iteraciones
for(i=0; i<=n; i++){
t=i*h; //se asume t=0
//variables no normalizadas para calculo del campo magnetico
X=x[j][i]*R;
Y=y[j][i]*R;
Z=z[j][i]*R;
RX=R-X;
//calculo del campo magnetico para cada x y z
Bm=0.0258*exp(-Z/0.00575)+0.00414;
BR=Bm/R;
Bx=BR*sqrt(R2-pow(RX,2));
Bz=BR*RX;

//////METODO RK4////////
//primera pendiente
k1=h*f1(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
m1=h*f2(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
k2=h*f3(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
m2=h*f4(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
k3=h*f5(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
m3=h*f6(t,x[j][i],x1[j][i],y[j][i],y1[j][i],z[j][i],z1[j][i]);
//segunda pendiente
k12=h*f1(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
m12=h*f2(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
k22=h*f3(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
m22=h*f4(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
k32=h*f5(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
m32=h*f6(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k11,x1[j][i]+0.5*m11,y[j][i]+0.5*k21,y1[j][i]+0.5*m21,z[j][i]+0.5*k31,z1[j][i]+0.5*m31);
//tercera pendiente
k13=h*f1(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
m13=h*f2(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
k23=h*f3(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
m23=h*f4(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
k33=h*f5(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
m33=h*f6(t+0.5*h,x[j][i]+0.5*k12,x1[j][i]+0.5*m12,y[j][i]+0.5*k22,y1[j][i]+0.5*m22,z[j][i]+0.5*k32,z1[j][i]+0.5*m32);
//cuarta pendiente
k14=h*f1(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
m14=h*f2(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
k24=h*f3(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
m24=h*f4(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
k34=h*f5(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
m34=h*f6(t+h,x[j][i]+k13,x1[j][i]+m13,y[j][i]+k23,y1[j][i]+m23,z[j][i]+k33,z1[j][i]+m33);
//posiciones y velocidades
x[j][i+1]=x[j][i]+((k11+2*k12+2*k13+k14)/6);
y[j][i+1]=y[j][i]+((k21+2*k22+2*k23+k24)/6);
z[j][i+1]=z[j][i]+((k31+2*k32+2*k33+k34)/6);
x1[j][i+1]=x1[j][i]+((m11+2*m12+2*m13+m14)/6);
y1[j][i+1]=y1[j][i]+((m21+2*m22+2*m23+m24)/6);
z1[j][i+1]=z1[j][i]+((m31+2*m32+2*m33+m34)/6);

fprintf(par,"%E %E %E \n", Bx, Bz, X);
//Velocidad al cuadrado para el cálculo de la energía cinética
V=(x1[j][i]*x1[j][i])+(y1[j][i]*y1[j][i])+(z1[j][i]*z1[j][i]);
Ke=0.5*m*R2*vVv;

if(Ke<=Emax){
fprintf(dat, "%E %E %E \n",t,X,Y,Z);
fprintf(data, "%E %E %E \n",t,X,Ke); //solo valores menores a 20ev en la energia
}
else{
break;}
}

```

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

```
}
fclose(dat);
}

fclose(par);

//se cierra el archivo de datos

//graficar

/*FILE *gp=popen("gnuplot","w");
fprintf(gp,"set term png\n");
fprintf(gp,"set output \"Trayectorias.png\"\n");
fprintf(gp,"set xlabel \"Posicion x [m]\"\n");
fprintf(gp,"set ylabel \"Posicion y[m]\"\n");
fprintf(gp,"set zlabel \"Posicion z[m]\"\n");
fprintf(gp,"unset key\n");
fprintf(gp,"set title \"Trayectorias\"\n");
fprintf(gp,"plot for [i=1:%g] \"datx\".i.\".txt\"\n",g1);
fprintf(gp,"q\n");

FILE *gpE=popen("gnuplot","w");
fprintf(gpE,"set term png\n");
fprintf(gpE,"set output \"Energias.png\"\n");
fprintf(gpE,"set xlabel \"Posicion X[m]\"\n");
fprintf(gpE,"set ylabel \"Tiempo [s]\"\n");
fprintf(gpE,"set zlabel \"Energia [eV]\"\n");
fprintf(gpE,"unset key\n");
fprintf(gpE,"set title \"Energias\"\n");
fprintf(gpE,"plot for [i=1:%g] \"datE\".i.\".txt\"\n",g1);
fprintf(gpE,"q\n");

fclose(gp);
fclose(gpE);*/
}
```

B.3. Cálculo de la densidad del plasma

Para poder realizar el cálculo de la densidad del plasma, es necesario dividir el espacio de interés en pequeñas fracciones de volumen $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$ como se muestra en la figura B.3 creando así una malla en cuyos elementos se va a verificar cuántos elementos existen. Mientras más fina sea la partición se tendrá una mayor precisión en el cálculo. Para saber sobre qué volumen es necesario realizar el cálculo, se debe de tomar en cuenta para que fracción de tiempo se desea realizar el mismo. Graficar la evolución temporal de las trayectorias para cada coordenada ayuda a discernir cuáles son los valores adecuados; por ejemplo de la figura B.4 es fácil ver que para $\Delta t = 0.44$ ns no tendría sentido establecer $y \in [-0.14, -0.6]$ o $z \leq 0.04$ ¹⁹

Es por ello que los valores de la frontera de la malla dependen del tiempo en que se quiere hacer el cálculo de la densidad. Delimitar de esta forma el volumen sobre el cuál se hace el análisis implica un mejor rendimiento del tiempo de cómputo puesto que se evita barrer volúmenes en donde ya se sabe que no se encontrará ninguna partícula.

B.4. Subrutina para calcular la densidad del plasma

Una vez teniendo las posiciones de las partículas (trayectorias) y las particiones de los ejes coordenados que darán origen a la malla, es cuestión de implementar una rutina que en cada paso verifique

¹⁹ Ambas cantidades se encuentran normalizadas a $R = 0.02$ m.

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

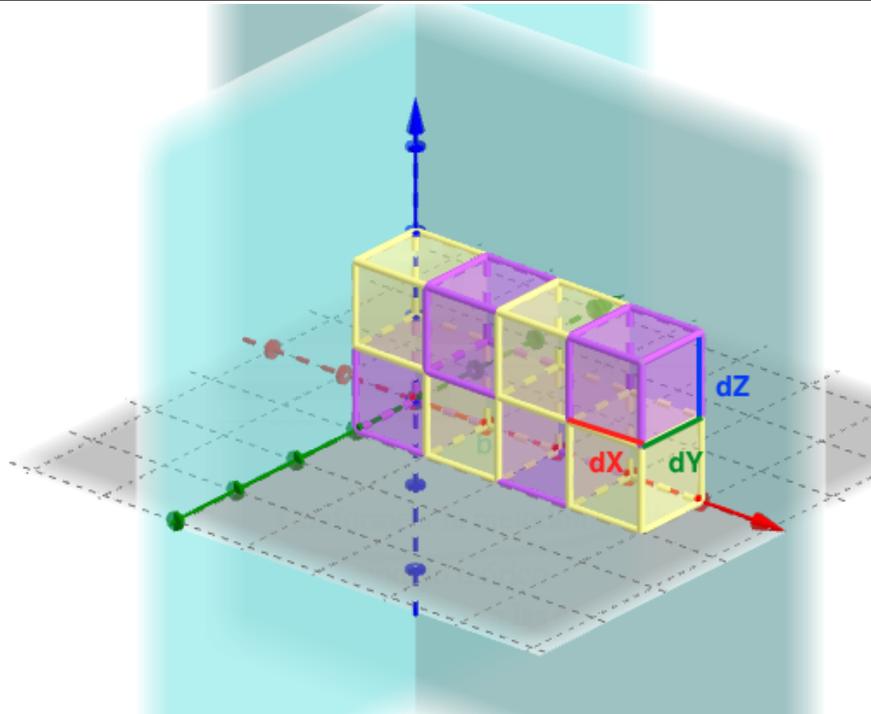


Figura B.3: Representación gráfica de la partición en pequeñas fracciones de volumen para crear una malla para realizar los cálculos de la densidad.

en que lugar de la malla se encuentra la partícula, por lo que únicamente se necesita aplicar comandos condicionales en el que cada vez que se satisfaga la condición sumará 1 a la entrada de la matriz densidad asociada con dicha sección de la malla. La subrutina implementada para lograr este cálculo se muestra a continuación.

```
// se crea la malla para la densidad
az=zi;
bz=z[70][ti];
hz=0.1/m1; //tamaño de partición de la malla en z
for(l=0;l<=m1;l++){
    DX[l]=l*hx;
    DZ[l]=l*hz;
}

for(i=0;i<=g;i++){
    for(j=0;j<=m1;j++){
        for(k=0;k<=m1;k++){
            if(DX[j]<=x[i][ti] && x[i][ti]<=DX[j+1]){
                if(DZ[k]<=z[i][ti] && z[i][ti]<DZ[k+1]){
                    rro[i][j][k]=1;
                }
            }
            else{
                rro[i][j][k]=0;
            }
        }
    }
}
```

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES
DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

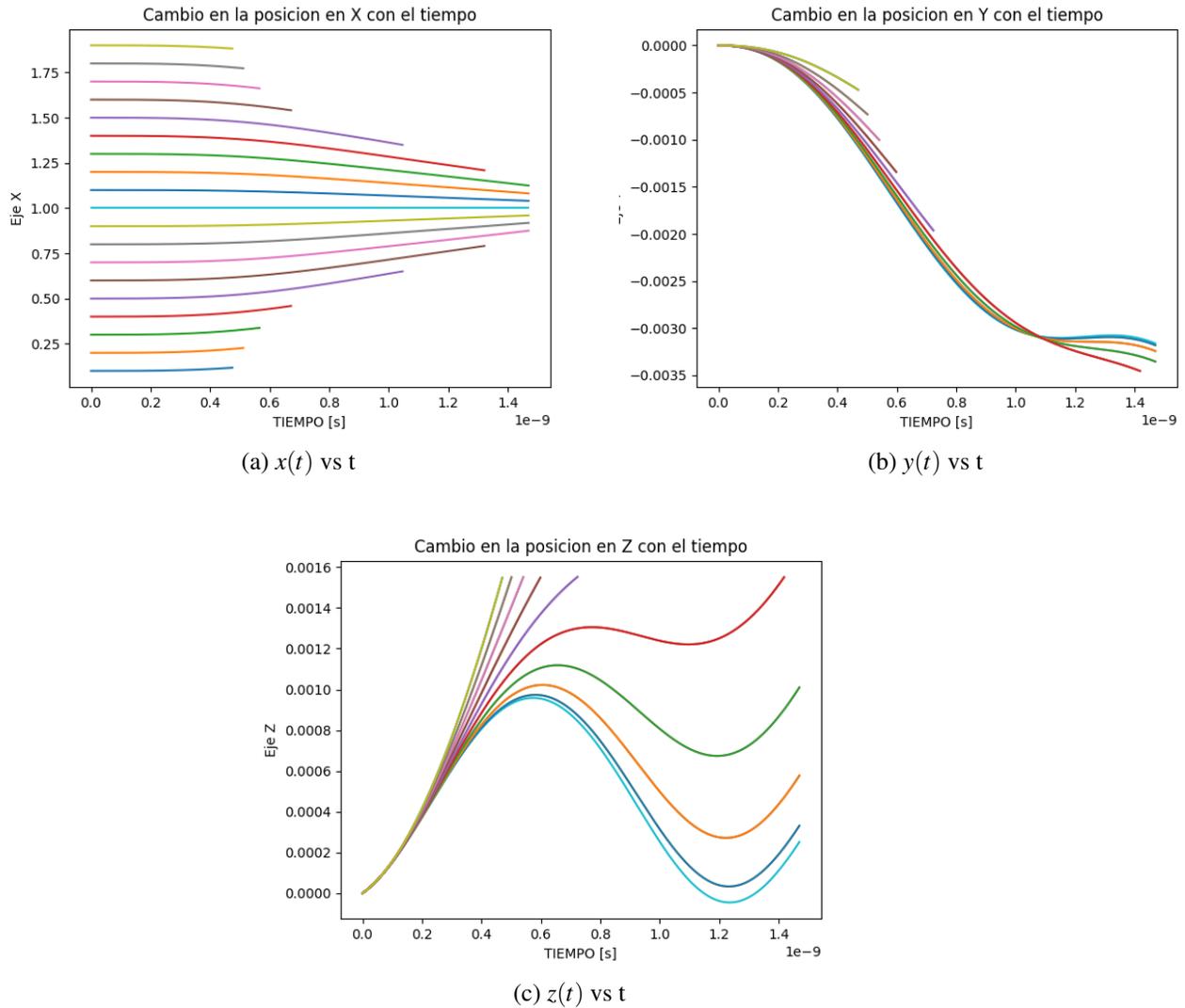


Figura B.4: Gráficas de la evolución temporal de cada coordenada de las trayectorias de los electrones en el intervalo de tiempo $\Delta t = 1.5$ ns, las variables x , y y z se encuentran normalizadas a $R=0.02$ m, en a) se puede observar cuáles son las posiciones iniciales en el blanco, los colores correspondientes a cada posición inicial son los mismos en b) y c).

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES
DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

```
        }
    }
}

//Valores de la matriz de densidad
for(i=0;i<=m1;i++){
    for(j=0;j<=m1;j++){
        for(k=0;k<g;k++){
            ro[i][j]+=rro[k][i][j];
        }
    }
}
for(l=0;l<=m1;l++){
    for(k=0;k<=m1;k++){
        fprintf(mden, "%d ",ro[l][k]);
        fprintf(den, "%E %E %d\n ",DX[l],DZ[k],ro[l][k]);
    }
}
fprintf(den, "\n");
fprintf(mden, "\n");
}
```

APÉNDICE B. SOLUCIÓN NUMÉRICA AL SISTEMA DE ECUACIONES
DIFERENCIALES PARA MODELAR LA TRAYECTORIA DE LOS ELECTRONES

C

CÓDIGO DE MATHEMATICA

Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales en Mathematica, es necesario primero establecer las condiciones iniciales y las constantes necesarias:

```

In[ ]:= q := -1.602189 * 10^-19      In[ ]:= Jo := 1.602189 * 10^-19
In[ ]:= B := 0.03
In[ ]:= m := 9.109534 * 10^-31      In[ ]:= VzIn := Sqrt[2 * Ec * Jo / m]
                                     [raíz cuadrada]
In[ ]:= ω := q/m                    In[ ]:= ZIn := 3 * 10^-9
In[ ]:= R := 0.02                    In[ ]:= tin := 3 * 10^-11
In[ ]:= EL := -62500                 In[ ]:= aB := 0.0258
In[ ]:= tM := 1.5 * 10^-9           In[ ]:= bB := 0.00414
In[ ]:= Ec := 3                      In[ ]:= kk := -0.00575

```

Posteriormente, se procede a llamar el comando ParametricNDSolve cuyo argumento es el sistema que quiere resolverse junto con el incremento de tiempo y la variable que llevará el parámetro de la solución:

```

In[ ]:= sols = ParametricNDSolve[{{x''[t] == ω/R * (aB * (E^(z[t]/kk)) + bB) * (R - x[t]) + y'[t],
                                     [resolvidor diferencial numérico paramétrico] [número e]
                                     y'[t] == ω/R * (aB * (E^(z[t]/kk)) + bB) * (z'[t] * sqrt[R^2 - (R - x[t])^2] - x'[t] * (R - x[t])),
                                     z''[t] == (q + EL/m) - ω/R * (aB * (E^(z[t]/kk)) + bB) * (sqrt[R^2 - (R - x[t])^2] + y'[t]), x[0] == a, y[0] == 0,
                                     z[0] == ZIn, x'[0] == y'[0] == 0, z'[0] == VzIn}, {x, y, z}, {t, 3 * 10^-11, tM}, {a}, MaxSteps -> ∞];
                                     [número e] [máximo de pasos]

```

Por último se alojan los datos en una variable que posteriormente se graficará y se le da el formato deseado de despliegue de la gráfica:

```

In[ ]:= resp = {x[a][t], y[a][t], z[a][t]} /. sols;
In[ ]:= SL[t_, a_] = resp;
In[ ]:= ParametricPlot3D[Evaluate[Table[SL[t, i], {i, 0.002, 0.038, R/20}], {t, 0, tM}], BoxRatios -> {1.5 * 1, 1, 1},
                                     [gráfico paramétrico 3D] [evalúa] [tabla] [cocientes de caja]
                                     AxesLabel -> {Style[X, Large, Bold, Red], Style[Y, Large, Bold, Red], Style[Z, Large, Bold, Red]}, PlotRange -> All]
                                     [etiqueta de ejes] [estilo] [grande] [negrita] [rojo] [estilo] [grande] [negrita] [rojo] [estilo] [grande] [negrita] [rojo] [rango de repr...] [todo]

```


BIBLIOGRAFÍA

- [1] GREENE J. E., *Review Article: Tracing the recorded history of thin-film sputter deposition: From the 1800s to 2017*, Journal of Vacuum Science & Technology A **35**, 05C204 (2017)
- [2] PAREDES, J. L., *El uso de la anodización en materiales*, Casa del tiempo Vol. III, Época IV, número 28, UAM, 2010.
- [3] POOLE C. P., *Encyclopedic Dictionary of Condensed Matter Physics*, Elsevier, 2004.
- [4] MORERA SOLÁ, P., *Tratamientos térmicos de los metales*, MARCOMBO, 1991.
- [5] KUMAR S. and ASWAL D. K., *Recent Advances in Thin Films*, Springer Nature Singapore, 2020.
- [6] CHEN, FRANCIS F. *Introduction to plasma physics*, Plenum Press, 1974.
- [7] RICHARDSON A. S., *NRL Plasma Formulary*, U.S. Naval Research Laboratory, 2019.
- [8] BOYD T. J. M. and SANDERSON J. J. *The physics of plasmas*, Cambridge University Press, 2003.
- [9] FREIDBERG J. P. *Plasma Physics and fusion energy*, Cambridge University Press, 2007.
- [10] INAN U. and GOLKOWSKI M. *Principles of Plasma Physics for Engineers and Scientists*, Cambridge University Press, 2011.
- [11] GEDALIN M., *Lecture notes in Physics, Introduction to Plasma Physics*, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2014.
- [12] AUCIELLO O., GRA-MARTI A., VALLES-ABARCA J. A. and FLAMM D. L. (editors) *Plasma Surface Interaction and Processing of Materials*, NATO Advanced Science Institutes Series, 1988.
- [13] MARTIN P., *Handbook of Deposition Technologies for Film Coatings: Science, Applications and Technology*, Elsevier, 2005.
- [14] CHAPMAN B., *Glow Discharge Processes*, John Wiley & Sons, 1980.
- [15] CHEN, FRANCIS F. *Introduction to plasma physics and controlled fusion*, Plenum Press, 1984.

-
- [16] NICHOLSON, DWIGHT R., *Introduction to Plasma Theory*, John Wiley & Sons, 1983.
- [17] GUADAMUZ BRENES S., *Plasma: ¿Qué es y para qué se utiliza?*, Investiga TEC, Vol. 12, **24**, 2015.
- [18] MITSU HARU KONUMA, *Film deposition by plasma techniques*, Springer Verlag, 1992.
- [19] SANKARAN R. M. (editor), *Plasma Processing of Nanomaterials*, CRC Press, 2012.
- [20] SCHÜTZE, A et. al. *The Atmospheric-Pressure Plasma Jet: A review and Comparison to Other Plasma Sources*, IEEE Transactions on Plasma Science, **26**, 6, 1998.
- [21] OVSYANNIKOV A. A. and ZHUKOV M. F., *Plasma Diagnostics*, Cambridge International Science Publishing, 2000.
- [22] LIEBERMAN M. A. and LICHTENBERG A. J., *Principles of Plasma Discharges and Material Processing*, John Wiley & Sons,
- [23] MERLINO R. L., *Understanding Langmuir probe current-voltage characteristics*, Am. J. Phys., Vol. 75, No. **12** (2007).
- [24] <http://nnp.physik.unifrankfurt.de/msr/langmuir/index.html>, enero 2020
- [25] PIEL A., *Plasma Physics, An Introduction to Laboratory, Space, and Fusion Plasmas*, Springer Verlag, 2010.
- [26] GROVE W. R., *On the electro-chemical polarity of gases*, Phil Trans R Soc. **1852;142:87**.
- [27] STUART A. J., *Vacuum Technology, Thin Films and Sputtering, An Introduction* Academic Press, Inc.. 1983.
- [28] BEHRISHC R., *Sputtering by particle bombardment I*, Springer Verlag, 1981.
- [29] WASA K. and HAYAKAWA S., *Handbook of Sputter Depositions Technology, Principles, Technology and Applications*, Notes Publications, 1992.
- [30] PAULEAU Y. (editor), *Materials Surface Processing by Directed Energy Techniques*, Elsevier 2006.
- [31] CHEN, F. F. and CHANG J. P., *Lecture notes on Principles of Plasma Processing*, Plenum/Kluwer Publishers, 2002.
- [32] LUNDIN. D, MINEA T. and GUDMUNDSSON J. T. *High Power Impulse Magnetron Sputtering: Fundamentals, Technologies, Challenges and Applications*
- [33] SARKAR J.m *Sputtering Materials for VLSI and Thin Film Devices*, Elsevier, 2014.
- [34] KORTSHAGEN U. and TSENDIN L. D. (editors), *Electron Kinetics and Applications of Glow Discharges*, NATO, Advanced Science Institutes Series, 1998.

- [35] R. K. MARCUS, and BROEKAERT J. A. C. (editors), *Glow Discharge Plasmas in Analytical Spectroscopy*, Wiley, 2003.
- [36] ANDERS A. (editor), *Handbook of Plasma Immersion Ion Implantation and Deposition*, Wiley VCH, 2000.
- [37] <https://www.intlvac.com/News-Blog/ArticleID/5/What-is-Sputtering>, junio 2020.
- [38] <https://www.sputteringcomponents.com/applications/> , junio 2020.
- [39] NISHISAWA T. (editor), *Handbook of Crystal Growth Fundamentals: Thermodynamics and Kinetics*, Vol. I, Part. A, Elsevier, 2015.
- [40] MATTOX D. M. *Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing*, Elsevier, 2010.
- [41] <https://warwick.ac.uk/fac/sci/physics/current/postgraduate/regs/mpagswarwick/ex5/strainedlayer/surfgrwth> abril 2021.
- [42] BUNSHAH R. L., *Handbook of Hard Coatings, Deposition Technologies, Properties and Applications*, Noyes Publications, 2001.
- [43] SOM T. and KANJILAL D (editors), *Nanofabrication by Ion-Beam Sputtering, Fundamentals and Applications*, Pan Stanford publishing, 2013.
- [44] ROSSANGEL S. M., CUOMO J. J. and WESTWOOD W. D., *Handbook of plasma processing Technology: Fundamentals, Etching, Deposition and Surface Interactions*, Noyes publications, 1990.
- [45] Q. JANE WANG and YIP-WAH CHUNG, *Encyclopedia of Tribology*, Springer, 2013.
- [46] BARNAT E. V., Lu T-M., *PULSED AND PULSED BIAS SPUTTERING Principles and Applications*, Springer+ Science Bussines Media, 2003.
- [47] KELLY P.J. and ARNELL R.D., *Magnetron sputtering: a review of recent developments and applications*, Vacuum **56** (2000) 159-172
- [48] OHRING M., *Materials Science of Thin Films Deposition and Structure*, Academic Press, 2002.
- [49] SWANN S. *Magnetron sputtering*, Physics in Technology, **19**, 67, 1988.
- [50] BEHRISHC R. and WITTMAACK K, *Sputtering by particle bombardment III*, Springer Verlag, 1991.
- [51] BRAÜER G. et al., *sputtering con magnetrón, Milestones of 30 years*, Vacuum **84**, 2010.
- [52] FRANCOMBE M. H. and VOSSEN J. L. (editors) *Plasma sources for thin film deposition and etching*, Academic Press, 1994.
- [53] NAKANO T. et. al. *Growth of Target Race Track Profile during magnetron sputtering*, J. of Vac. Soc. of Japan, **58**, 7, 2015.

-
- [54] DEPLA D., MAHIEU S. (editors), *Reactive Sputter Deposition*, Springer-Verlag, 2008.
- [55] LIU C-T. et al., *Design Assessments of a Rectangular DC Magnetron Sputter for Extended Target Life and Faster Sputtering* IEEE Transactions on Magnetics, **50**, 1, 2014.
- [56] WAITS R. K., *Planar magnetron sputtering*, J. Vac. Sci. Technol. **15**, 179 (1978).
- [57] WANG L. et. al., *Magnetron Sputtering Yield and Relative Factors*, Advanced Materials Research, Vols 361-363, 2012.
- [58] BOHLMARK J. et. al., *Spatial Electron Density Distribution in a High-Power Pulsed Magnetron Discharge*, IEEE Transactions on Plasma Science, vol. 33, no. 2, April 2005.
- [59] HANG Y. et. al. *Experimental and simulation study of sputtering con magnetron MgO film thickness distribution*, Advanced Materials Research, Vol. 900, 2014.
- [60] SWANN S., *Film thickness distribution in magnetron sputtering*, Vacuum **38**,1988.
- [61] MAZHIR S. N. et. al., *Measurement of plasma electron temperature and density by using different applied voltages and working pressures in a magnetron sputtering system*, International Journal of Engineering & Technology. **7**, 3, 2018.
- [62] CHAPRA S. C. & CANALE R. P., *Métodos numéricos para ingenieros*, Mc Graw Hill, 2007.