

Étude multi-niveau de la croissance colonnaire de couches minces de TiN, ZrN et HfN déposées par pulvérisation magnétron réactive en incidence oblique

R. Mareus^{a,b*}, F. Nita^{a,c}, C. Mastail^a, A. Michel^a et G. Abadias^a

- Institut P', Département Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346, CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, TSA 41123, 86073, Poitiers cedex 9, France ;
- Département Physique, Université d'État d'Haïti-Ecole Normale Supérieure, Laboratoire des Sciences pour l'Environnement et l'Énergie (LS2E), HT6115 Canapé-Vert, Port-au-Prince, Haïti ;
- Institut national de recherche et de développement en microtechnologies - 126A, rue Erou Iancu Nicolae, 077190, Voluntari, Ilfov, Roumanie

* email : rubenson.mareus@univ-poitiers.fr

De nos jours, la synthèse de couches minces fonctionnelles à partir d'un dépôt en incidence oblique (OAD) jouit d'une popularité croissante, car elle permet de façonner l'architecture des films et de contrôler leurs propriétés, telles que la microstructure, la texture, la porosité et l'anisotropie. Dans le cas des nitrures de métaux de transition, le dépôt par pulvérisation cathodique conduit à la formation de films minces colonnaires, mais l'évolution des propriétés microstructurales, en fonction des paramètres de dépôt reste difficile à prédire.

Dans ce cadre, une étude multi-niveau couplant expérience, simulation numérique par Monte Carlo cinétique (kMC) et calculs ab initio (DFT) a été réalisée afin de mieux comprendre et maîtriser les processus spécifiques de la croissance de nitrures métalliques du groupe 4 (TiN, ZrN et HfN).

Les films minces ont été déposés par pulvérisation magnétron réactive à 0.3 Pa et à 300°C sur des substrats Si (001) inclinés selon différents angles d'inclinaison $\alpha=5^\circ, 35^\circ, 65^\circ, 75^\circ$ et 85° par rapport à la normale à la surface du matériau cible.

L'évolution morphologique des films, en particulier l'évolution de l'angle d'inclinaison des colonnes β par rapport à α , sera discutée pour ces trois systèmes et comparée aux lois empiriques existantes et à celle simulée par kMC en utilisant le code MODENA [1]. Ce dernier a été spécifiquement développé pour simuler la croissance de couches minces de nitrures de métaux de transition déposées par pulvérisation magnétron réactive. L'importance de la distribution angulaire du flux de particules incidentes et de la diffusion de surface sera illustrée, en fonction des conditions de dépôts (pression de travail et température du substrat). Les résultats issus des simulations kMC reproduisent fidèlement les tendances expérimentales, voir Figure 1.). L'évolution de l'inclinaison des colonnes présente un phénomène de saturation pour $\alpha > 65^\circ$ dans le cas de TiN, et une augmentation de $+10^\circ$ est observée lorsque la température augmente de 25° à 500°C . Enfin, une étude DFT des paysages énergétiques que rencontrent les particules incidentes (métal et azote) lors de leur adsorption sur les surfaces de ces matériaux a été réalisée pour trois orientations différentes – (001), (110) et (111) afin de prendre en compte l'anisotropie de diffusion de surface dans le code MODENA.

[1] B. Bouaouina, C. Mastail, A. Besnard, R. Mareus, F. Nita, A. Michel, G. Abadias. Nanocolumnar TiN thin film growth by oblique angle sputter-deposition: Experiments vs. simulations. *Material and Design*. **160** 338–349 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2018.09.023>

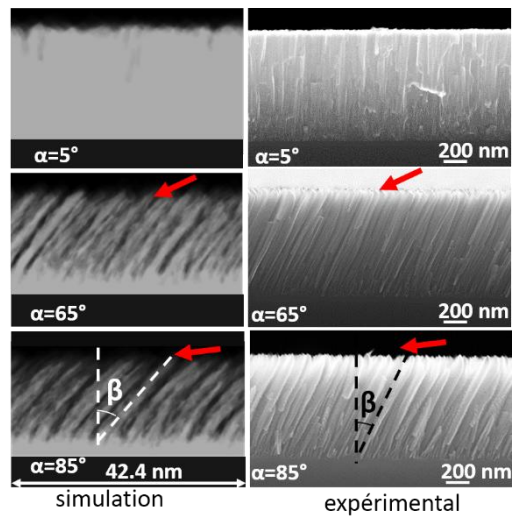


Figure 1 : Comparaison des morphologies de croissance de films minces de TiN déposés à 0.3 Pa et à $T=300^{\circ}\text{C}$ obtenues par simulation kMC (à gauche) et par microscopie électronique à balayage (à droite).