### SZAKDOLGOZAT

# Határfelületek kísérleti vizsgálata

RUDOLF ÁDÁM Fizika BSc., fizikus szakirány III. évfolyam



Témavezető:

MENYHÁRD MIKLÓS, DSC. MTA - Műszaki Fizikai és Anyagtudományi kutatóintézet

Belső konzulens:

TICHY GÉZA, DSC. Eötvös Loránd Tudományegyetem, Anyagfizikai Tanszék

## 2011

#### Kivonat

A félvezetőtechnológiában problémát jelent, hogy a vezeték anyaga belediffundál a szilíciumba. Ezt többek között önszerveződő rendszerek által létrehozott diffúziós barrier rétegek akadályozhatják meg. Egy lehetőség a rézmangán rendszerek használata, amiknek fázisviszonyai azonban nanorétegekben nem ismertek. Diplomamunkám során az MTA MFA Vékonyrétegfizikai Osztályán magnetronos porlasztással létrehozott Cu-Mn nanorétegeket vizsgáltam Auger elektronspektroszkópia (Auger electron spetroscopy, AES) módszerével, Menyhárd Miklós vezetése alatt. A kutatócsoport célja volt olyan Cu-Mn rendszereket szilícium-oxid rétegen létrehozni, amikben hőkezelés hatására megfigyelhetünk egy kialakult diffúziós határréteget, ami a réz szilícium-oxidba való beledifundálását akadályozza meg. Munkám során többféle koncentrációjú Cu-Mn keveréket vizsgáltam, többféle hőkezelés után. Meghatároztam a minták mélységi profilját, ahol kellett, faktoranalízist végeztem. A keresett effektust nem sikerült egyértelműen azonosítani, de az eredmények alapján vizsgálatot érdemes folytatni.

#### Köszönetnyilvánítás

Köszönettel tartozom témavezetőmnek, Menyhárd Miklósnak, hogy lehetőséget kaptam bekapcsolódni az MFA egyik munkájába, és hogy sokat tanultam tőle a tudományos munka lefolyásának módjáról, és általában az anyagfizikáról.

Köszönettel tartozom az MFA munkatársainak, köztük is Misják Fanninak, Gurbán Sándornak, Kótis Lászlónak és Sulyok Attilának, akikhez mindig fordulhattam kérdéseimmel, és sokat segítettek a kísérleti, illetve a kiértékelési módszerekben.

Köszönet illeti Zsoldos Balázs barátomat, a programozásban nyújtott segítségéért.

Budapest, 2011. június 6.

# Tartalomjegyzék

1.	Bev	rezetés	1		
2.	Módszerek				
	2.1.	Auger effektus	1		
	2.2.	Auger elektronspektroszkópia és mélységi feltérképezés $\ . \ . \ . \ .$	2		
3.	Mér	rési összeállítás	4		
	3.1.	Magnetronos porlasztás	4		
	3.2.	A mérőrendszer felépítése	4		
		3.2.1. Az energia analizátor	5		
		3.2.2. Atomok gerjesztése, elektronágyú felépítése	5		
		3.2.3. Ionporlasztás	6		
4.	A n	nérés menete	8		
	4.1.	Minták	8		
	4.2.	Levákuumozás, minta behelyezés	10		
	4.3.	A mérés lefolyása	11		
5.	A n	nérés kiértékelése	11		
	5.1.	Auger áram számítása	11		
	5.2.	Koncentrációszámolás	13		
	5.3.	Mélységkalibráció	15		
	5.4.	CM28-as minta	18		
		5.4.1. CM28NH	18		
		5.4.2. CM28H	19		
		5.4.3. CM28H2	20		
	5.5.	CM8-as minta	20		
		5.5.1. CM8NH	20		
		5.5.2. CM8H	21		
	5.6.	CM9-es minta	21		
		5.6.1. CM9NH	21		
		5.6.2. CM9H	21		
	5.7.	CM30-as minta	24		

	5.8. Mangán és oxigén csúcsok dekompozíciója	. 26	
6.	Összegzés	32	
Hivatkozások			
Ny	yilatkozat	34	

# Ábrák jegyzéke

2.1.	Az Auger folyamat sematikus szemléltetése	2
3.1.	Magnetronos porlasztó berendezés sematikus vázlata $\ .\ .\ .\ .$ .	4
3.2.	Elektronnyaláb-anyag kölcsönhatásának termékei	6
4.1.	CM8 minta XTEM felvétele	8
4.2.	CM9 minta XTEM felvétele	8
4.3.	CM28 minta XTEM felvétele	9
4.4.	CM30 minta XTEM felvétele	9
4.5.	${\rm CM28}\text{-}{\rm as}$ minta szekunderemissziós képe. Jól látható a beállításhoz	
	"rajzolt" kör a minta felületén. A skála mikron beosztású. $\ldots$ .	10
5.1.	Rugalmatlan szabadúthossz energiafüggése réz és mangán esetében $\left[ 6 \right]$	12
5.2.	$\rm CM28NH,$ azaz a hőkezeletlen rétegrendszer számolt mélységi profilja	18
5.3.	CM28H, azaz a 450°C-on hőkezelt rétegrendszer számolt mélységi	
	profilja	19
5.4.	CM28H2, azaz a 600° $C\text{-}\mathrm{on}$ hőkezelt rétegrendszer számolt mélységi	
	profilja	20
5.5.	CM8NH, azaz a hőkezeletlen mintára számolt koncentráció profil $\ .\ .$	22
5.6.	CM8H, azaz a hőkezelt mintára számolt koncentráció profil $\ .\ .\ .\ .$	22
5.7.	CM9NH, azaz a hőkezeletlen mintára számolt koncentráció profil $\ .\ .$	23
5.8.	CM9H, azaz a hőkezelt mintára számolt koncentráció profil $\ .\ .\ .\ .$	23
5.9.	CM30NH mintára számolt koncentrációprofil	24
5.10	). CM30H mintára számolt koncentrációprofil	25
5.11	. CM30H2 mintára számolt koncentrációprofil	25
5.12	2. Oxigén ablak a tiszta csúcsalakokkal	28
5.13	3. Oxigén ablak a 9-es minta 243-as spektrumának mért, és számolt	
	spektrumával	28
5.14	l. Mangán ablak a tiszta csúcsalakokkal	29
5.15	5. Mangán ablak a 9-es minta 243-as spektrumának mért, és számolt	
	spektrumával	29
5.16	5. CM8H minta határfelülete a számolt mangán, mangán-oxid és szilícium-	
	oxid csúcsintenzitásokkal	30
5.17	7. CM9H minta határfelülete a számolt mangán, mangán-oxid és szilícium-	
	oxid csúcsintenzitásokkal	31

### 1. Bevezetés

A félvezető-technológiában általános probléma, hogy a vezetékként használt réz, és az alkatrészek anyagát adó szilícium egymásba diffundálnak. Erre megoldás a diffúziós barrier rétegek használata (tipikusan használt pl. a Ta/TaN, vagy Ti/TiN[1, 2], közvetlenül a félvezető felületén), ám az áramkörök méretének csökkenésével a barrier mérete is csökken, ami előállítási nehézségeket von maga után.

A barrier réteg létrehozására javasolt egyik módszer az önszerveződő rétegek használata. A módszer lényege, hogy például valamilyen réz ötvözetet juttatnak közvetlenül a félvezető felszínére, és hőkezelés után az ötvözetből a barrier kiválik az ötvözet és a félvezető határán. Különböző Cu ötvözetekkel végzett vizsgálatok szerint a legígéretesebb ötvözet a Cu-Mn.[3]

### 2. Módszerek

### 2.1. Auger effektus

Az Auger effektust 1923-ban fedezte fel Pierre Victor Auger ködkamrával végzett vizsgálatai során[4], és PhD munkájában gyakorlatilag azonnal a felfedezés után helyes értelmezést adott, azonban technikai nehézségek miatt a gyakorlati alkalmazásra még évtizedeket kellett várni.

Az effektus lényege a következő: kezdeti állapotként adott egy atom, aminek egy alsó energiaszintjéről (K) hiányzik egy elektron (vagyis egy lyuk van ott). Ekkor a lyuk rekombinálódhat egy magasabb energiaszinten lévő ( $L_1$ ) elektronnal. Eközben a legerjedő elektron Coulomb jellegű taszító kölcsönhatásba lép egy nála magasabb héjon ( $L_2$ ) lévő elektronnal, ami, ha elég energiát kap, távozik az atomból (KLL Auger elektron). Így az egész folyamat egy egyszeresen ionizált kezdőállapotból egy kétszeresen ionizált végállapotba való eljutás, ahol a két állapot energiájának különbsége a kilépő elektron kinetikus energiája. Az emittált elektront nevezzük Auger elektronnak.



2.1. ábra. Az Auger folyamat sematikus szemléltetése

Az Auger elektron kinetikus energiája a következőképpen áll elő:

$$E_{kin} = E_K - E_{L_1} - E_{L_2} - \Delta$$

ahol  $E_K - E_{L_1}$  a lyuk és a legerjesztődő elektron energiaszintjeinek különbsége.  $E_{L_2}$  a kilépő elektron kilépés előtti energiája, vagyis ennek ellentettje szükséges az atomból való kilépéshez, ezért kell levonni.  $\Delta$  egy összetett korrekciós tag, ami többek között tartalmazza az energiaszint eltolódásait. Nehezen kiszámolható, de atomfizikailag jól meghatározott. Ez a tag sokszor kicsi (< 10eV, de lehet nagy is), és azért fontos, mert függhet az atom kémiai környezetétől. Ez azért van, mert a valenciasávban lévő elektronok energiája függ attól, hogy az atom kötésben van-e, és ha valamelyik, folyamatban résztvevő elektron a valencia sávban volt a folyamat előtt, ez az eltérés meg fog jelenni az Auger elektron energiájában. A leggyakoribbak a KLL, az LMM és az MNN Auger elektronok.[5]

### 2.2. Auger elektronspektroszkópia és mélységi feltérképezés

Mivel a különböző energiaszintek egyértelműen jellemeznek egy-egy elemet, az Auger elektronok energiáját vizsgálva azonosíthatjuk a vizsgált anyagrészben lévő elemeket. A kibocsátott elektronok száma az energia függvényében az Auger spektrum. Az energiaátmenetek diszkrét jellege miatt intenzitás csúcsokat (Auger csúcso-kat) láthatunk. Ezek a csúcsok egy lassan változó háttérhez adódnak hozzá. Egy-egy anyagra egyedi spektrum jellemző, de a spektrum különböző energiaanalizátorok esetén kicsit eltérhet. Az 2.1 pontban említett energiaeltolódások miatt pedig következtethetünk a kémiai állapotra, ami az Auger spektroszkópia egy előnyét adja. Ez természetesen más spektroszkópiai módszereknél is jelen van, példálul a Röntgenfotoelektron spektroszkópiában (X-ray photoelectron spectroscopy, XPS).[5]

Az Auger spektroszkópia egy hátránya, hogy az effektus jellegéből fakadóan csak legalább hármas rendszámú atomokat lehet vele vizsgálni, ami a H észlelhetetlensége miatt okozhat problémát.

Fontos paraméter az elektronok rugalmatlan szabad úthossza (inelastic mean free path, IMFP), ami egy elektron bizonyos anyagban rugalmatlan kölcsönhatás, azaz energiaveszteség nélküli várható útja. Ez függ az anyagtól, és az elektron energiájától. Érthető, hogy ahhoz, hogy Auger elektronokat hitelesen detektáljunk, az kell, hogy a detektált elektron energiaveszteség nélkül jusson el hozzánk. Közelítésképpen mondhatjuk, hogy a mért jel az IMFP-vel megegyező vastagságú felületi rétegből jön. Az IMFP tipikusan Å, vagy 1-2 nm nagyságrendű.[6] Ez azt jelenti, hogy az Auger spektroszkópia a szilárdtestek felületi analitikai módszere. Technikai nehézséget jelent, hogy egy spektrum különböző vonalai különböző mélységű rétegekből jönnek.

A mélységi feltérképezés, vagy profilírozás lényege a következő: felveszünk egy Auger spektrumot a minta felületéről, majd valamilyen módszerrel, például ionporlasztással eltávolítunk egy vékony réteget az anyag felületéről. Ezután megint felveszünk egy spektrumot, és ezeket felváltva ismételjük. Érdemes olyan vastagságú réteget eltávolítani, amekkora rétegről információt kapunk egy spektrum felvételével, így a minta teljes vastagságából tudunk információt nyerni az anyagösszetételről. Ha az Auger csúcsokból minden spektrumra meghatározzuk az anyagösszetételt, akkor a mélység függvényében tudjuk ábrázolni a koncentrációkat. Ezt nevezzük mélységi profilnak. Megoldandó technikai nehézséget jelent itt a csúcsintenzitásokból a relatív koncentráció meghatározása, valamint az, hogy az ismert porlasztási időkből kiszámoljuk a mélységet.

### 3. Mérési összeállítás

### 3.1. Magnetronos porlasztás

A mintákat az MFA Vékonyrétegfizikai Osztályán állították elő egyenáramú magnetronos porlasztással. A módszer lényege röviden a következő. Egy vákuumkamrában helyezik el a porlasztani kívánt anyagokat (targeteket), és nagy negatív feszültséget kapcsolnak rájuk (300-1000V). Ezután porlasztógázt engednek be a kamrába, aminek ionjai a feszültség hatására a targetekbe csapódnak, onnan atomokat és elektronokat szakítva ki (esetünkben kb. 2 atom/ion hozammal). A targetek mögé elhelyezett erős mágnesek tere a kilépő elektronokat spirális pályára kényszeríti, aminek köszönhetően jóval több gázatomot tudnak ionizálni, nagyban megnövelve ezzel a targetatom hozamot.

A targetek elé megfelelően elhelyezett (esetünkben Si) hordozón a targetatomok egy része felfogható, ezzel gyakorlatilag atomrétegenként felépítve a mintát. Ezzel a módszerrel szilárd oldatok, és adott rétegszerkezetű minta is létrehozható. A berendezés vázlata a 3.1 ábrán látható.



3.1. ábra. Magnetronos porlasztó berendezés sematikus vázlata

### 3.2. A mérőrendszer felépítése

A berendezés szintén egy vákuumkamrában kapott helyet, ahol turbószivattyú gondoskodik a ( $10^{-9}$  torr, azaz  $10^{-11}$  Pa nagyságrendű) vákuum fenntartásáról. A vákuumkamra közepén kap helyet a dönthető, forgatható mintatartó, amit az alábbi eszközök vesznek körül.

Tömegspektrométer, ami azért van beépítve, mert néha szükséges, hogy azonosítsuk a kamrában jelen lévő gázokat. Ez például a vákuum esetleges elromlásának okát segíthet felderíteni.

#### 3.2.1. Az energia analizátor

Az energia analizátor egy Staib DESA 100 tipusú előfékezéses henger tükör analizátor[7] (cylindrical mirror analyser, CMA), aminek működési elve a következő. Két koaxiális hengerfelület formájú, ellentétes feszülségre kötött fémlemez közé vezetjük be a mérni kívánt elektronokat. Az elektronok az elektromos tér miatt görbült pályán haladnak, ám a különböző energiájú elektronok különböző görbületű pályákon. Az analizátor geometriai felépítése miatt csak meghatározott energiájú elenktronok képesek eljutni a számlálóba. Mivel az ehhez szükséges energia arányos a hengerekre kapcsolt feszültséggel, e feszültség értékének változtatásával megszámolhatjuk a különböző eneriájú elektronokat. A beérkező elektronok egy sokszorozóba jutnak, aminek a jelét egy számítógép már képes feldolgozni. Szintén a számítógép vezérli a hengerek feszültségét. Így a számítógép vezérlésével a berendezés automatikusan fel tudja venni a spektrumot.

#### 3.2.2. Atomok gerjesztése, elektronágyú felépítése

Az atomokat egy 5 keV-es elektronnyalábbal gerjesztjük. Az elektronforrás egy izzókatód, az elektronokat pedig az előtte elhelyezett anód gyorsítja, és két kondenzor fókuszálja, amik közül az egyiknek állítható a feszültsége, amivel fókuszálható a nyaláb.

Az elektronnyaláb többféle módon is kölcsönhatásba lép az anyaggal, és mindegyiknek vannak az anyagból kilépő "termékei". A különböző elektronsugárzásokat más-más analitikai módszereknél használják. Számunkra a már tárgyalt Auger elektronok lesznek fontosak, továbbá a szekunder elektronok, amiket a nyaláb az atomok gyengén kötött, külső héjairól lök ki. Ezeket lehet használni képalkotásra. A módszert használja a pásztázó elektronmikroszkópia (scanning electronmicroscpy, SEM), de az általunk használt AES berendezésnek is van egy egyszerű képalkotó üzemmódja. Ekkor az elektronnyalábot szkenneli az automatika, és egy külön erre a célra beszerelt elektronsokszorozón keresztül mérjük a minta kölönböző részeiről kilépő szekunder elektronok számát. A számítógép egy célszoftver segítségével megalkotja a képet. Ez a minta beállításakor hasznos.



3.2. ábra. Elektronnyaláb-anyag kölcsönhatásának termékei

A többi folyamat során keletkező elektronok nem fontosak számunkra, de természetesen ezek beütéseit is észleli a gép. Ezek, továbbá az energiájukat vesztett Auger elektronok felelősek a háttér kialakításáért. Mivel ezen elektronok nem csak karakterisztikus energiákkal rendelkeznek, a háttér lassan változik. A csökkent energiájú Auger elektronok miatt megfigyelhető, hogy a spektrumban a csúcsok közelében a kisebb energiás oldalon nagyobb az intenzitás, mint a csúcs fölött.

### 3.2.3. Ionporlasztás

A mélységi feltérképezés során igen fontos, hogy hogyan végezzük a rétegek eltávolítását. Erre elterjedt módszer az ionbombázás, mi is ezt a módszert alkalmazzuk. A cél az lenne, hogy egy felületi réteg eltávolítása után a megmaradó anyag ne változzon. Mivel ez az ionbombázás roncsoló hatása miatt nem elérhető, célunk az, hogy a változásokat minél jobban minimalizáljuk. Mivel az ionok energiájánál a kilépő atomok energiája sokkal kisebb, az ionok energiájának nagyrésze az anyagban nyelődik el, szerkezeti változásokat okozva ott. Egyik módszer tehát az ionnyaláb energiájának csökkentése. Esetünkben 1 keV-es nyalábot használtunk. A felület durvulása ellen pedig súrlódószögű beesést alkalmazunk (esetünkben 80°-os beesési szöget, ami a felületre merőlegestől értendő). Mivel kristályos anyagok esetében a porlasztási tényező szögfüggő, a mintát forgatjuk. Továbbá, hogy maga a porlasztógáz minél kevesebb valószínűséggel lépjen kémiai kölcsönhatásba a mintával, argont használunk.

A mérés pontosságát növeli, ha a porlasztási kráter alja (ahol a mérést végezzük) minél laposabb, hiszen ha görbült, a detektált jel a minta különböző mélységeiből érkezik. A kráter alja igen sima, 100 $\mu$ m-en nm nagyságú az emelkedése. Gömbfelülettel közelítve a kráter alját, ez m nagyságrendű görbületi sugarat jelent. A görbület csökkentése érdekében az elektronnyalábéhoz képest nagy átmérőjű ionnyalábot használunk. Az ionnyaláb áramsűrűsége kb. Gaussos, aminek  $\sigma$  szélessége kb. 0, 3mm. Porlasztás közben pásztázzuk az ionnyalábot, így nagyobb lesz a leporlasztott felület. Ezekkel a módszerekkel a tipikus kráterméret nagyságrendje  $100\mu m - 1000\mu m$ . A kráterünk aljának simasága igen jónak számít.[8]

### 4. A mérés menete

### 4.1. Minták

A minták tiszta szilícium hordozóra lettek ráporlasztva. Az első réteg minden esetben szilícium-oxid volt, ami az áramkörökben használt félvezetőt hivatott modellezni. Erre kerültek a különbözőféle réz-mangán rendszerek. Az MTA MFA Vékonyrétegfizikai Osztályán Misják Fanni állította elő a mintasorozatot. Ezek egy részét a rendelkezésünkre bocsátotta, másik részét pedig keresztmetszeti transzmissziós elektronmikroszkóppal (XTEM) vizsgálta. A minták kódneveiben a CM a réz-mangán (Cu-Mn) rétegrendszerre utal, az utána következő szám a minta sorszáma. A sorozatból következő mintákkal dolgoztunk:

• CM8 (160  $\pm$  4) nm vastagságú, 20% nominális Mn koncentrációjú Cu-Mn réteg, (48  $\pm$  4) nm szilícium-oxid Si hordozón.



4.1. ábra. CM8 minta XTEM felvétele

• CM9 (160  $\pm$  4) nm vastagságú, 80% nominális Mn koncentrációjú Cu-Mn réteg, (40  $\pm$  4) nm szilícium-oxid Si hordozón.



4.2. ábra. CM9 minta XTEM felvétele

• CM28 Multiréteg minta. 33 nm tiszta Mn, 40 nm tiszta Cu, 33 nm Mn. Itt is érvényes a ±4 nm-es hiba.



4.3. ábra. CM28 minta XTEM felvétele

• CM30  $(64 \pm 4)$  nm vastagságú, 20% nominális mangán koncentrációjú Cu-Mn réteg,  $(20 \pm 4)$  nm szilícium-oxid Si hordozón.



4.4. ábra. CM30 minta XTEM felvétele

A rétegek vastagságai az XTEM képek alapján lettek meghatározva. A nominális koncentrációk a növesztés során célul kitűzött koncentráció. A minták kétféle hőkezelésnek lettek alávetve:  $450^{\circ}C$ -on, és  $600^{\circ}C$ -on. Mindkét hőkezelés egy órán keresztül tartott. A hőkezeletlen minták kódnevéhez egy NH (nem hőkezelt),  $450^{\circ}C$ -on hőkezelt mintákhoz H (hőkezelt), a  $600^{\circ}C$ -on hőkezeltekhez pedig egy H2 utótag van írva. A hőkezelés hatására vizsgáljuk az ötvözetekben a réz és mangán fázis szétválását, külön megjelenését, különös tekintettel figyelve a szilícium-oxid felületét.

### 4.2. Levákuumozás, minta behelyezés

A mintákat, vigyázva a felület sértetlenségére néhány négyzetmilliméteres darabokra tördeltük, és megtisztításuk után a forgatható mintatartókra tettük. A minta behelyezése után a turbószivattyú gondoskodott a vákuum létrehozásáról. A vákuumrendszert ilyenkor kályházni szokták: a mintacserekor a levegőből a felületre tapadt szennyeződések a mérés során folyamatosan rontanák a vákuum értékét, ám ha ilyenkor felfűtjük a rendszert  $100^{\circ}C$  körüli hőmérsékletre, a szennyeződések leszakadnak a felületről, és a mérés során már nem fognak gondot okozni. Egy ilyen kályházás több napig is eltarthat. A katód első felfűtésekor a felületéről megint leszakadnak a levegőből rátapadt szennyeződések, így a vákuum elromlik (kb. 2 nagyságrenddel), ám ezután újra visszaáll. Ez egy természetes módszer a berendezés megtisztítására.

A mérés szempontjából döntő fontosságú, hogy az ionnyaláb beesési pontja, és a mérési pont a mintán pontosan a forgástengelyre essen. Ezt úgy tudjuk biztosítani, hogy a mintát elkezdjük forgatni, és besugározzuk az elektronnyalábbal. Ez megváltoztatja a besugárzott részek szekunderemissziós tulajdonságait, így a már említett szekunderemissziós képalkotási móddal látni lehet azokat a részeket, amiket az elektronsugár ért. Ez a forgatás miatt egy kör lesz, aminek középpontja a forgástengely. Ezután a kör középpontjára kell állítanunk az ionnyalábot, és ezzel a minta beállítása megtörtént.



4.5. ábra. CM28-as minta szekunderemissziós képe. Jól látható a beállításhoz "rajzolt" kör a minta felületén. A skála mikron beosztású.

### 4.3. A mérés lefolyása

A mérést automatikusan vezérli az ehhez az összeállításhoz írt Material Analyser nevű program. Meg kell adnunk a spektrumok között alkalmazott besugárzási időket, a felvenni kívánt spektrumok energia intervallumait, és az energia lépésközt. Ezek mind a vizsgált rendszertől függenek. Ha ezt megtettük, a program emberi beavatkozás nélkül végzi a porlasztást, és a spektrumok felvételét, vagyis levezényli a teljes mérést.

### 5. A mérés kiértékelése

### 5.1. Auger áram számítása

Egy ionizált atom esetében az Auger elektron kibocsátásának valószínűségét a Fermi-féle aranyszabály adja meg:

$$\omega \sim \left| \int \varphi_f(1) \varphi_f(2) \frac{e}{r_1 - r_2} \varphi_i(1) \varphi_i(2) dr_1 dr_2 \right|$$

 $\varphi_i$  a rekombinálódó elektronok kezdeti,  $\varphi_f$  a végső hullámfüggvénye. Alkossunk modellt, amiben a mintát felbontjuk a gerjesztőnyalábra merőleges rétegekre. Egy ilyen réteg legyen olyan vékony, hogy benne a sűrűség és a koncentrációk homogénnek legyenek tekinthetők, de legyen benne több atomréteg. Jelöljük ezt a vastagságot dz-vel. Legyen  $I_p$  a primer áram (a gerjesztés árama),  $\sigma$  az ionizációs hatáskeresztmetszet. N a szórócentrumok térfogati számsűrűsége, ami összefüggésben van a tömegsűrűséggel is:  $N = N_A \frac{\rho}{M}$ , ahol  $\rho$  a tömegsűrűség,  $N_A$  az Avogadroszám, M pedig a moláris tömeg (tömeg/mól). Az ionizációban nemcsak a primer áram, hanem áz általa kiváltott, illetve a mélyebb rétegekből visszaszórt elektronok is szerepet játszanak, ezért be kell vezetnünk az úgynevezett visszaszórási tényezőt (backscattering factor), amit r-rel jelölünk. Ennek pontos értéke összetett fizikai folyamatok eredménye, és meghatározása ma is aktív területe a fizikának. Ekkor a rétegben egységnyi felületen, egységnyi idő alatt emittált Auger elektronok száma:

$$I_p \sigma \omega N dz (1+r) \tag{5.1}$$

Folytonos közelítésben, homogén közegben haladva az áram intenzitása exponenciálisan csökken. z mélységből kijövő áram detektált nagysága, ha az a gerjesztő nyalábbal  $\vartheta$  szöget zár be,  $I_0$  az eredeti áram  $\vartheta$  szögben, és T a transzmissziós tényező, és  $\Omega$  a detektor térszöge:

$$I_0 e^{-z/\lambda \cos\vartheta} \Omega T \tag{5.2}$$

 $\lambda$  a rugalmatlan szabadúthossz (IMFP), ami azt adja meg, hogy az áram mekkora úton csökken 1/e részére. Ez az érték függ az anyagi minőségtől, és az elektronnyaláb energiájától.



5.1. ábra. Rugalmatlan szabadúthossz energiafüggése réz és mangán esetében [6]

A gerjesztőnyaláb (5keV) szabad úthossza nagyságrendileg nagyobb az Auger elektronok (esetünkben max ~ 920eV) szabad úthosszánál, vagyis azokban a rétegekben, ahonnan a mérési adataink származnak, a primer áram intenzitása állandónak tekinthető számításaink során. Összegezve 5.1 és 5.2 alapján a detektált Auger áram[5]:

$$I_A = \int_0^\infty I_p \sigma(z) \omega(z) N(z) dz (1+r) e^{-z/\lambda \cos\vartheta} \Omega T$$
(5.3)

### 5.2. Koncentrációszámolás

Osszetett anyagok esetében az összetevők relatív koncentrációira vagyunk kíváncsiak. A nyers mérési adataink a beütésszámok az energia függvényében. Az erős háttér és a detektor pontatlansága miatt ezt numerikusan deriváljuk, így a Gaussszerű intenzitáscsúcsokból egy pozitív, és egy közeli negatív csúcs lesz. Ezen a tartományon a maximum és minimum különbségét tekinthetjük a csúcsintenzitásnak. Közelítsük az anyagot homogén anyaggal! Ekkor az Auger elektronok megtett útja során az integrál egy tagja sem függ z-től, kivéve az exponenciálist. Így egyszerűen ki tudjuk integrálni az 5.3 integrált. Hogyha a tiszta *i* anyag Auger áramát  $I_i^0$ -val jelöljük, és az összetett anyagban, mátrixkörnyezetben levő azonos anyagét  $I_i^M$ -mel, akkor ezekre a következő kifejezések adódnak:

$$I_i^0 = I_p \sigma_i \omega_i (1 + r_i^0) \lambda_i^0 N_i^0 \beta$$

$$I_i^M = I_p \sigma_i \omega_i (1 + r_i^M) \lambda_i^M N_i^M \beta$$

Ahol  $\beta = \frac{T\Omega}{\cos\vartheta}$  a detektorra jellemző konstans,  $N_i^0 = N_A \frac{\rho_i^0}{M_i}$ , és  $N_i^M = N_A \frac{\rho_M}{M_i} X_i$ , ahol  $\rho_M$  a mátrix, vagyis a teljes anyag sűrűsége,  $X_i$  pedig az *i* anyag relatív koncentrációja. Osszuk el egymással a két egyenletet:

$$\frac{I_i^M}{I_i^0} = \frac{I_p(1+r_i^M)\sigma_i\omega_i\lambda_i^M N_i^M\beta}{I_p(1+r_i^0)\sigma_i\omega_i\lambda_i^0 N_i^0\beta} = \frac{1+r_i^M}{1+r_i^0} \cdot \frac{\lambda_i^M}{\lambda_i^0} \cdot \frac{\rho_i^M}{\rho_i^0} \cdot X_i^M$$

Ebből kifejezhető a koncentráció:

$$X_i = \frac{I_i^M / I_i^0}{\rho_i^0} \cdot \rho_i^M \cdot \frac{\lambda_i^0}{\lambda_i^M} \cdot \frac{1 + r_i^0}{1 + r_i^M}$$

Hogyha két anyag koncentrációját elosztjuk egymással, kapjuk a következő kifejezést:

$$\frac{X_A}{X_B} = \frac{I_A^M / I_A^0}{I_B^M / I_B^0} \cdot \frac{1 + r_A^0}{1 + r_A^M} \cdot \frac{1 + r_B^M}{1 + r_B^0} \cdot \frac{\lambda_A^0 \lambda_B^M}{\lambda_B^0 \lambda_A^M} \cdot \frac{\rho_B^0}{\rho_A^0} = \frac{I_A^M / I_A^0}{I_B^M / I_B^0} F_{AB}$$

Kaptunk egy kifejezést, ami csak az Auger áramoktól, és az úgynevezett mátrix tényezőtől ( $F_{AB}$ ) függ. A mátrix tényező tartalmazza az anyag környezetének hatásait az Auger áramra. Ez azért jó, mert megszabadultunk sok, általában ismeretlen tagtól.

Tegyük meg a következő közelítést:  $F \approx 1$ . Ekkor

$$\frac{X_A}{X_B} = \frac{I_A^M / I_A^0}{I_B^M / I_B^0}$$

Követelmény, hogy a koncentrációk összege 1 legyen:  $\sum_i X_i = 1$ . Írjuk fel tehát:

$$\sum_{i} \frac{X_i}{X_B} = \frac{\sum_{i} I_i^M / I_i^0}{I_B^M / I_B^0} = \frac{1}{X_B}$$

Tehát:

$$X_B = \frac{I_B^M / I_B^0}{\sum_i I_i^M / I_i^0}$$

Bevezetve az  $\alpha_i = \frac{I_i^0}{I_{Ref}^0}$  érzékenységi tényezőt, az *i*-edik anyag koncentrációjára adódik:

$$X_i = \frac{I_i^M / \alpha_i}{\sum_j I_j^M / \alpha_j} \tag{5.4}$$

 $I_{Ref}^{0}$  egy referenciának használt tiszta anyag Auger csúcsának intenzitása.[5] Érdemes olyan anyagot használni, ami nagy tisztaságban jelen van. Én erre a célra a szilíciumot választottam. Az érzékenységi tényezők meghatározásához szükségünk van minden kérdéses anyagból tiszta mintára, lehetőleg ugyanazon mérésen belül, hogy a körülmények ne változzanak meg, hiszen az elrontaná az arányokat. Erre egy multiréteg minta a legalkalmasabb, aminek különböző rétegeiben megtalálhatók a vizsgálni kívánt anyagok, (elméletileg) 100%-os koncentrációkkal. Ebből megtudhatjuk az  $I_i^0$ -akat, s ebből  $\alpha_i$ -ket. Erre a CM28NH jelzésű mintát használtam.

Az Auger csúcsok intenzitásának a derivált spektrumban a maximum és a minimum különbségét vesszük, és ezeket a számokat vizsgáljuk a porlasztási idő függvényében. Ám ezek hibával terheltek, így azokon a helyeken is kapunk egy alapzajt, ahol tudjuk, hogy nincs jelen a vizsgált anyag. Alapesetben ilyen a szilícium hordozó belseje. (Szilíciumot nagyon tisztán tudnak előállítani.) Ezért megnéztem a kapott értékeket azon a szakaszon, ahol a hordozó csúcsnagysága már beállt a maximuma környékére, és egy akkora zajszintet vontam le a derivált beütésszámokból, hogy ezen a szakaszon ne kapjunk jelet. Így minden mérésnél minden csúcsra kaptam egy (általában kb. 10% körüli) zajszintet, amit kivontam az anyag egész derivált spektrumából. Ahol negatív értékeket kaptam, ott az értéket nullának vettem. Ezek után az 5.4 alapján minden csúcsra meghatároztam a koncentrációkat, így kaptam egy koncentrációprofilt a porlasztási idő függvényében. A következő Auger csúcsokat vizsgáltam (10eV-ra kerekítve): Mn 590eV-os csúcsát, Cu 920eV-os csúcsát, Si 90eV-os csúcsát, C 270eV-os csúcsát, valamint a mangán-oxid és szilícium-oxid kb. 510eV-os és 507eV-os csúcsait.

Ebben az esetben plusz problémát jelent, hogy a mangánnak vagy egy csúcsa 510eV-nál, ami megnehezíti a mangán-oxid detektálását ugyanezen a helyen. Ennek kiküszöbölésére három dolgot feltételeztem: az egyik, hogy a mangán e két csúcsának intenzitásaránya nem változik, a második, hogy a csúcsintenzitások lineárisan adód-nak össze, a harmadik pedig, hogy a CM28NH mintában a Mn rétegek közepe tájékán nincs jelen mangán-oxid. Azokra a részekre, ahol ebben a mintában az 510eV-os csúcs már nem változik, átlagoltam a két csúcs arányát (510eV-os csúcs intenzitása/590eV-os csúcs intenzitása), és ezután minden mérésnél az 510eV-os csúcs intenzitásából kivontam az 590eV-os csúcs intenzitásának, és ennek az arányszámnak a szorzatát. A kapott számot vettem a mangán-oxid csúcs intenzitásának, utána ezekkel a számokkal végeztem el a fent leírt számolásokat.

Megjegyzendő még, hogy a mangán-oxid érzékenységi tényezőjét nem tudtam meghítározni, így a koncentrációjának pontos értéke különbözhet a valóstól, de a menete hiteles.

### 5.3. Mélységkalibráció

A különböző spektrumok felvétele között ismert porlasztási időket alkalmazunk, ám nem tudjuk, hogy eközben milyen vastag réteget porlasztunk le a mintánkról, így nem triviális probléma a porlasztási idő függvényében ismert koncentrációprofilt mélységi profillá áttranszformálni.

Az egyik legegyszerűbb módszer, ha valamilyen más módszerrel megmérjük a határfelületek távolságát, és ezeket a rétegvastagságokat illesztjük a profilunkhoz. Mivel az általunk vizsgált mintákról rendelkezésre állnak XTEM képek, ez esetünkben egy járható út.

A hőkezeletlen minták esetében a mélységkalibrációt a következőképpen végeztem el. Az XTEM képek alapján ismertek a rétegvastagságok  $(s_I)$ . A porlasztási idő függvényében (t) ábrázolt koncentrációprofilban is felismerhető a rétegszerkezet. A réteghatárt úgy definiáltam, hogy az a hely, ahol valamely összetevő koncentrációja eléri a maximális és a minimális koncentráció (általában közel nulla) számtani közepét ( $t_I$ ). Úgy vettem, hogy ezeknek ismert a mélysége. Az ismert (és nem feltétlenül állandó) porlasztási időkből mindegyik profilhoz kiszámoltam a porlasztás kezdete óta eltelt időket, és ezen idők szerint a rétegek köztes profiljaira lineárisan interpoláltam a mélységeket. Az I réteg i profiljaihoz tartozó  $s_i$  mélységek, ahol  $t_i$  jelöli a profilhoz tartozó porlasztási időt,  $s_I$  az I réteg vastagsága,  $t_I$  pedig a réteg megkezdéséig eltelt idő:

$$s_i = \sum_{J=1}^{I-1} s_J + \frac{t_i - t_I}{t_{I+1} - t_I} \cdot s_I$$

A hőkezelt minták esetében máshogy kell eljárnunk. A különböző anyagokra kiszámolhatjuk az r porlasztási hányadokat, amit a következő egyenlet definiál, ha a mélységet s-sel jelöljük:

$$s = \int_0^t r dt$$

r dimenziója távolság/idő, vagyis gyakorlatilag a porlasztás sebességét adja meg, és összetett rendszerekben bonyolultan függ a mélységtől, azonban multiréteg mintákban, ahol (közel) tiszta anyagok fordulnak elő, a rétegeken belül r állandó, így egyegy rétegre felírhatjuk:

$$s = rt$$

A CM28NH minta alapján ezeket kiszámoltam rézre, mangánra és szilíciumoxidra. Közelítésként számolhatunk úgy, hogy összetett anyagban  $r = \sum_i X_i r_i$ , így a hőkezelt minták mélységeit a köveztezőképpen számoltam:

$$s_{i+1} = (t_{i+1} - t_i) \cdot \sum_j X_j r_j + s_i$$
(5.5)

Mivel r függ az ionsugár áramsűrűségétől, a különböző mérésekben pedig az ionáram különböző lehet, r-ek változhatnak, ám arányuk mindig ugyanakkora marad. Mivel a réz a mintákban használt anyagok közül a legnemesebb, durva közelítésként mondhatjuk, hogy a tiszta réz mennyisége hőkezelés során állandó marad. Ezért, miután a mélységi kalibrációt elvégeztem a fent leírtak szerint, összeadtam a réz mennyiségét az egész mélységi profilra a következőképpen:

$$M_{Cu} = \sum_{i} X_i^{Cu} \cdot (s_{i+1} - s_i)$$

A hőkezelt minták profilmélységeit megváltoztattam úgy, hogy ez a mennyiség megegyezzen a hőkezeletlen mintában számolttal. Így kaptam meg a hőkezelt minták végleges mélységprofilját.

### 5.4. CM28-as minta

A koncentrációk számításának módszerénél már leírtam, hogy az érzékenységi tényezők meghatározásához szükségünk van tiszta anyagokra, lehetőleg egy mérésen belül az összesre, mert a különböző mérések esetében más lehet az ionáram, ami meghamisítja az érzékenységi tényezők arányát. Erre jó a 28-as minta, amiben tiszta, (elméletileg) 100%-os koncentrációjú rétegek vannak, így ebből a mintából nyertem ki a tiszta anyagra jellemző csúcsintenzitásokat a rézre, mangánra, és a szilíciumra is, és határoztam meg a fenti módon az érzékenységi tényezőket.

### 5.4.1. CM28NH

A hőkezeletlen mintára kapott mélységi profil (itt, és a későbbi ábrákban a szem megvezetése érdekében összekötöttem az adatpontokat. Az összekötéseknek nincs fizikai jelentésük):



5.2. ábra. CM28NH, azaz a hőkezeletlen rétegrendszer számolt mélységi profilja

A Mn néhány helyen oxidos kicsit, a Cu egyáltalán nem. Látszik, hogy a mangánoxid feldúsul a szilícium-oxid határán, és a minta felületén, ami érthető, hiszen ez a rész érintkezett a környezettel. A felületen található egy kis szén is, ami szintén szennyeződés, ami egy alacsony szinten végig látható a külső Mn rétegben, de a rézbe már nem hatol be. Ez összhangban van azzal, hogy a réz tiszta marad. A határfelületek viszonylag élesek, ahogy vártuk.

### 5.4.2. CM28H

A  $450^{\circ}C$ -on egy óráig hőkezelt mintára kapott mélységi profil:



5.3. ábra. CM28H, azaz a  $450^{\circ}C$ -on hőkezelt rétegrendszer számolt mélységi profilja

Látszik, hogy már ezen a hőmérsékleten erősen egymásba diffundáltak az anyagok, és alig lehet felismerni az eredeti rétegszerkezetet. A felszíni mangánréteg még jobban oxidálódott, és ebbe az oxidos mangánba a réz kevésbé diffundálódott bele, mint a másik oldalán a tisztább mangánba. A tiszta Si határa is kevésbé éles, és az oxidos Si koncentrációja leesett. A hőkezelés hatására átrendeződhetnek a kötések, és az oxigén átköthet más atomokhoz. A MnO képződéshője:  $\Delta H_{MnO} =$ -384, 9kJ/mol, a MnO<sub>2</sub>-é:  $\Delta H_{MnO_2} = -519, 7kJ/mol$ , míg a SiO<sub>2</sub>-é  $\Delta H_{SiO_2} =$ -859, 4kJ/mol,[9] így energetikailag a Si-hoz a legelőnyösebb kötődnie. A réz olyan erősen belediffundált a mangánba, hogy elérte a szilícium-oxid réteget is, ahol leesett ugyan a koncentrációja, de behatolt az oxidrétegbe.

### 5.4.3. CM28H2

A 600°C-on egy óráig hőkezelt mintára kapott mélységi profil a 5.4 ábrán látható.





Ezen a hőmérsékleten láthatólag teljesen szétesett a rétegszerkezet. A Si egyértelműen megtalálható minden mélyégben, és a Mn is igen mélyen behatolt a hordozóba.

### 5.5. CM8-as minta

### 5.5.1. CM8NH

20%-os nominális mangán koncentrációjú minta. 5.5 ábra.

### 5.5.2. CM8H

A hőkezeletlen minta egyenletes koncentrációjú, alig oxidált, a hőkezeltnél azonban a felületen, és a szilícuim-oxid határfelületén is feldúsul a mangán. (5.6 ábra.) A határfelületen láthatólag jelen van mangán-oxid is, de igen kevés. Ezen a részen réz és szilícium-oxid egyidejűleg jelen vannak, sokkal nagyobb részen, mint hogy az a szabadúthosszakból fakadó mérési pontatlanság legyen. (~ 10nm-es nagyságrendű vastagságú rétegben van jelen mind a kettő, míg a réz 920eV-os elektronjainak szabadúthossza SiO<sub>2</sub>-ben 2, 7nm, rézben 1, 5nm, a szilícium-oxid azonosítására használt 507eV-osé 1, 8nm, valamint 0, 9eV[6]. Ezek nagyságrendileg kisebbek a mért átfedésnél, tehát a látott jelenség nem lehet a szabad úthosszakból adódó mérési hiba.)

### 5.6. CM9-es minta

#### 5.6.1. CM9NH

A mintán már megfigyelhető valamilyen koncentrációgradiens: a Mn koncentrációja nő a szilícium-oxid felé haladva. Érdekes a felületen a koncentrációk gyors változása. 5.7 ábra.

#### 5.6.2. CM9H

Ezen a mintán nagyon jól látszik a keresett effektus: a Mn feldúsul a Cu két oldalán, a réz pedig nem hatol be a szilícium-oxidba (ez a tartomány még további, pontosabb vizsgálatokra szorul). Látszik, hogy a felszínen oxidálódott a mangán: réz ebben a tartományban sem látható. 5.8 ábra. A szilícium-oxid és a mangán határfelületén nem triviális a szilícium-oxid, a mangán és a mangán-oxid szétválasztása.

Fontos megemlíteni, hogy az itt látott jelenség látszólag ellentmondásben van a 5.3 ábrán látottal, ahol a réz koncentrációja leesett a mangán-oxidban. Ennek feloldása lehet, hogy a diffúzió, és az oxidáció különböző sorrendben zajlik le a két esetben. További megjegyzés, hogy - habár a keresett effektus valamennyire látszik a mintán, - a profil nem egy tipikus barrier réteg profilja.



5.5. ábra. CM8NH, azaz a hőkezeletlen mintára számolt koncentrációprofil



5.6. ábra. CM8H, azaz a hőkezelt mintára számolt koncentráció<br/>profil



5.7. ábra. CM9NH, azaz a hőkezeletlen mintára számolt koncentrációprofil



5.8. ábra. CM9H, azaz a hőkezelt mintára számolt koncentráció<br/>profil

### 5.7. CM30-as minta

A hőkezeletlen mintában nagyjából állandók a koncentrációk. Az alacsonyabb hőmérsékleten hőkezelt mintában a szilícium-oxid határán megfigyelhető egy kisebb Mn dúsulás, de a következő hőkezelt mintában ez már nem látszik, sőt a réz behatol a szilícium-oxidba.



5.9. ábra. CM30NH mintára számolt koncentrációprofil



5.10. ábra. CM30H mintára számolt koncentrációprofil



5.11. ábra. CM30H2 mintára számolt koncentráció<br/>profil

### 5.8. Mangán és oxigén csúcsok dekompozíciója

Ha több, közeli Auger csúcs is jelen van a mért spektrumban, nem triviális feladat szétbontnai a jelet és megállapítani az összetevő csúcsok nagyságát. Tipikusan egy csúcs többféle kémiai formájának egyidejű jelenléte esetén, jelen esetben az oxigén, és a mangán csúcs esetén van erre szükség, különösen a 8-as és 9-es hőkezelt minták szilícium-oxid határfelületeinek esetében. Egy lehetséges módszer erre, ha feltételezzük, hogy a mért spektrum a tiszta csúcsok lineárkombinációjaként áll elő, és az együtthatókat variálva minimalizáljuk a négyzetes eltéréseket.

A mintáink ilyen szempontból nem kérdéses részeiről rendelkezésre állnak a tiszta mangán, mangán-oxid, és szilícium-oxid csúcsalakok. Az így kapott értékeket így jelölöm:  $N_i^{Mn}$ ,  $N_i^{MnO}$ ,  $N_i^{Sio}$ , ahol a felső index az anyagot, az alső *i* index pedig az energiát jelöli (minden N *i* függő). Ekkor a mért  $N_i$  spektrumról azt feltételezem, hogy ezek lineárkombinációjaként felírható, ami hibával van terhelve. Bevezetem az S négyzetes eltérést:

$$S = \sum_{i} \left( N_i - \alpha N_i^{Mn} - \beta N_i^{MnO} - \gamma N_i^{SiO} \right)^2$$
(5.6)

Ahol  $0 \leq \alpha, \beta, \gamma \leq 1$ , és azt az  $\alpha, \beta, \gamma$  konfigurációt keressük, ahol S a legkisebb, az oxigén (480eV - 525eV) és a mangán nagyenergiás csúcsának (570eV - 600eV) energiaablakaira elvégezve a szummát. (Pontosabban, mivel a numerikus deriválás az ablakok határánál hamis értékeket ad, ezen ablakok első és utolsó 3eV-ját kihagytam az összegzésből.) A CM28NH mintából a tiszta anyagok közepe felől elmentettem a mangán és szilícium-oxid csúcsalakokat, és a CM28H minta elejéről a mangán-oxid csúcsalakját, mert eddigi számolásaimban ezen a helyen bizonyult a legnagyobb koncentrációjúnak. Meg kell jegyezni, hogy itt mangán és mangán-oxid is jelen van, ezt figyelembe kell venni. Ehhez feltételeznem kellett, hogy a felületen, valamint a mangán-szilícium-oxid határfelületen létrejövő oxidos mangánnak ugyanolyan a csúcsalakja.

A probléma megoldására programot írtam. A program forráskódja (c++) megtalálató a mellékelt CD-n, illetve a [10] címen. Ez 5%-os pontossággal megadta  $\alpha, \beta$ és  $\gamma$  értékeket. Ezután a kapott profil alapján  $\alpha, \beta$  és  $\gamma$  maximumának ismeretében mégegyszer elvégeztem a számolást, már kisebb határok között, kisebb lépésközzel, így az ebből adódó hiba kisebb lett, mint az eredeti, mérésből származó hiba. Példaként ábrázoltam a két kérdéses energiaintervallumra előbb a tiszta csúcsokat, majd a mért, és a programmal számoltat (5.12 - 5.15 ábrák). Erre a CM9H minta 243-as spektrumát ábrázoltam (kb. 163nm mélységnek felel meg), mert ránézésre vizsgálva itt gyanús volt két Mn csúcs jelenléte.



5.12. ábra. Oxigén ablak a tiszta csúcsalakokkal



5.13. ábra. Oxigén ablak a 9-es minta 243-as spektrumának mért, és számolt spektrumával



5.14. ábra. Mangán ablak a tiszta csúcsalakokkal



5.15. ábra. Mangán ablak a 9-es minta 243-as spektrumának mért, és számolt spektrumával

Az így kapott  $\alpha$ ,  $\beta$  és  $\gamma$  értékeket felszorozva az eredeti csúcsok ismert csúcsintenzitásaival megkapjuk a három kérdéses csúcs intenzitását, de már szétbontva. Ezt visszaírtam az eredeti mérési adatok helyére, és a számításokat elvégeztem a megszokott módon. A program szokásos barrierréteghez szükséges mangán-oxidot nem talált jelentős mértékben. A 8-as és 9-es minták profiljának azon részei, amikre az illetsztéseket elvégeztem (5.16, 5.17 ábrák). A 8-as mintánál a réz egyértelműen a szilícium-oxidba diffundált. A 9-es minánál a mangán valamiféle védőréteget látszik kialakítani, de fontos megjegyezni, hogy ez a profil nem egy tipikus barrier réteg viselkedés.



5.16. ábra. CM8H minta határfelülete a számolt mangán, mangán-oxid és szilícium-oxid csúcsintenzitásokkal



5.17. ábra. CM9H minta határfelülete a számolt mangán, mangán-oxid és szilícium-oxid csúcsintenzitásokkal

## 6. Összegzés

A dolgozatban Cu-Mn rendszereket térképeztünk fel Auger elektronspektroszkópia segítségével. Ezen rendszerek fontosak lehetnek a jövőben a félvezetőtechnológiában áramkörök gyártásánál, de ezek fázisviszonyai, pl. fázisszétválás vékonyréteg formában még nem teljesen ismertek. Ezeket a tulajdonságokat vizsgáltuk többféle összetétel és hőkezelés mellett, különös tekintettel a réz-mangán keverék és a szilíciumoxid határfelületén esetlegesen kialakuló diffúziós akadályréteget.

A keresett effektust nem sikerült egyértelműen azonosítani, de az eredmények alapján a kutatást érdemes folytatni. A jövőben érdemes a 8-as és 9-es mintákhoz hasonló összetételűeket ugyanezeken a hőmérsékleten, de hosszabb ideig hőkezelni, és ezután megvizsgálni őket. Érdemes szándékosan létrehozni egy mangán-oxid réteget, és megfigyelni, hogy egy már kialakult réteg tényleg diffúziós barriert képez-e. Ez magyarázatot adhat a 5.3 és a 5.8 ábrákon látható ellentmondásra. Lehetőség van egy Auger áramot szimuláló program megírására is, amivel a gyorsan változó koncentrációjú határfelületek összetételéről kaphatunk majd pontosabb információt.

### Hivatkozások

- Y. Otsuka, J. Koike, H. Sako, K. Ishibashi, N. Kawasaki, S.M. Chung, and I. Tanaka, Graded composition and valence states in self-forming barrier layers at Cu-Mn/SiO2 interface, Applied Physics Letters 96, 2010.
- [2] A. E. Kaloyeros, E. Eisenbraun, Annu. Rev. Mater Sci. 30, 363, 2000.
- [3] J. Koike, M. Wada, Appl. Phys Lett. 87, 041911 2005.
- [4] P. Auger, Comptes Rendus Acad. Sci. Paris, 1923.
- [5] J. C. Riviére, S Myhra Handbook of Surface and Interface Analysis, Marcel Dekker Inc. 1998.
- [6] S. Tanuma, C. J. Powell, D. R. Penn, Surf. Interf. Anal., Vol. 21, 165, 1993.
- [7] A. Barna, L. Kótis, J. Lábár, A. Sulyok, A. L. Tóth, M. Menyhárd, P. Panjan, Growing imbedded Ni3C-rich layer with sharp interfaces by means of ion beam mixing of C/Ni layers, Journal of Physics D: Applied Physics, 2011.
- [8] Menyhárd Miklós Mélységi feltérképezés Auger-elektronspektroszkópiával, Fizikai Szemle 177.0., 2004/6.
- [9] http://chemistry.about.com/od/thermodynamics/a/Heats-Of-Formation.htm
- [10] adamrudolf.web.elte.hu/faktor3.cpp

## NYILATKOZAT

Név: Rudolf Ádám András ELTE Természettudományi Kar, szak: Fizika BSc. ETR azonosító: RUAQAAT.ELTE Szakdolgozat címe: Határfelületek kísérleti vizsgálata

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2011. június 6.

a hallgató aláírása