CRECIMIENTO DE PELICULAS DELGADAS DE AU EN UN AMBIENTE DE NITROGENO

J.H. Quintero[1], L.C. Agudelo[1], J.M., Gonzalez1, P.J. Arango[1], A. Mariño[2], A. Devia[1].

- ✓ Este artículo forma parte del "Volumen Suplemento" **S1** de *la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales* (*RLMM*). Los suplementos de la RLMM son números especiales de la revista dedicados a publicar memorias de congresos.
- ✓ Este suplemento constituye las memorias del congreso "*X Iberoamericano de Metalurgia y Materiales (X IBEROMET)*" celebrado en Cartagena, Colombia, del 13 al 17 de Octubre de 2008.
- ✓ La selección y arbitraje de los trabajos que aparecen en este suplemento fue responsabilidad del Comité Organizador del *X IBEROMET*, quien nombró una comisión *ad-hoc* para este fin (véase editorial de este suplemento).
- ✓ La *RLMM* no sometió estos artículos al proceso regular de arbitraje que utiliza la revista para los números regulares de la misma.
- ✓ Se recomendó el uso de las "Instrucciones para Autores" establecidas por la *RLMM* para la elaboración de los artículos. No obstante, la revisión principal del formato de los artículos que aparecen en este suplemento fue responsabilidad del Comité Organizador del *X IBEROMET*.

Suplemento de la Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales 2009; **S1** (3): 963-965

CRECIMIENTO DE PELICULAS DELGADAS DE AU EN UN AMBIENTE DE NITROGENO

J.H. Quintero[1], L.C. Agudelo[1], J.M., Gonzalez1, P.J. Arango[1], A. Mariño[2], A. Devia[1].

1: Laboratorio de Física del Plasma, Universidad Nacional de Colombia sede Manizales. Manizales, Colombia
2: Laboratorio de Superconductividad y Nuevos Materiales, Universidad Nacional de Colombia sede Bogota. Bogota, Colombia

** E-mail: jhquinteroo@unal.edu.co*

Trabajos presentados en el X CONGRESO IBEROAMERICANO DE METALURGIA Y MATERIALES IBEROMET
Cartagena de Indias (Colombia), 13 al 17 de Octubre de 2008
Selección de trabajos a cargo de los organizadores del evento

Publicado On-Line el 29-Jul-2009
Disponible en: *www.polimeros.labb.usb.ve/RLMM/home.html*

Resumen

Un sistema PAPVD (Deposición Física de Vapor Asistida Por Plasma) fue usado para el crecimiento de películas delgadas de Au. Las muestras fueron crecidas variando la presión desde 3 mbar hasta 9.5 mbar. La descarga fue realizada a 200 V en una atmósfera de nitrógeno con una distancia inter-electródica de 4 mm. Los patrones de difracción de rayos X mostraron una estructura FCC para todas las muestras analizadas. Estudios de la estabilidad de la red se realizaron mediante el Análisis de Mulliken y orbitales moleculares. La densidad electrónica total fue obtenida utilizando Teoría de Funcionales de Densidad (DFT).

Palabras Claves: *Películas Delgadas de Au, Sistemas PAPVD.*

Abstract

PAPVD (Plasma Assisted Physical Vapor Deposition) system was used for growing Au thin films. Samples were prepared with variations of the work pressure from 3 mbar to 9.5 mbar. The plasma discharge was realized at 200 V in a nitrogen atmosphere with an inter-electrodes distance of 4mm. The XRD patterns for the different samples showed a FCC structure. Structural stability studies were performed by Mulliken population analysis and molecular orbitals. The electron total density was determined by using the Density Functional Theory.

Keywords: Au-Thin Films, PAPVD system.

1. INTRODUCCION

En los últimos años la comunidad científica ha realizado grandes esfuerzos con miras a la producción de nitruros metálicos de transición como son el CuN, AgN y AuN, Devia et al [1] Yua y Zhang [2]. En la ultima década especialmente, se ha hecho gran énfasis, tanto teórico como experimental, en la formación y conocimiento del AuN. Este material podría ofrecer una buena alternativa para reemplazar las películas de oro y su amplio potencial de aplicaciones lo convierten en un material de interés y atractivo científico, Gregoryanz et al [3]. Se encontró, por ejemplo, que la incorporación de AuN en películas de Au, incrementa la dureza del oro hasta en un 50% sin perder el estado conductivo del Au, Butenko et al [4]. Por otra parte y debido a la dificultad para la producción de nitruros metálicos nobles, debido a la alta ionización necesaria para su estabilidad, es necesario estudiar con detalle los sitios de ubicación preferencial del nitrógeno. En este trabajo se utilizo un sistema PAPVD para crecer películas de oro en un ambiente de nitrógeno y determinar la ubicación y cantidad de átomos de nitrógeno incorporados en la estructura del oro mediante Difracción de Rayos X (XRD) y Microcopia Electrónica de Barrido (SEM) respectivamente. Adicionalmente se realizaron estudios de simulación de estructuras FCC con átomos de nitrógeno y oro utilizando el programa GAUSSIAN 98 para observar la configuración electrónica.

2. RESULTADOS EXPERIMENTALES

Un sistema PAPVD de arco pulsado fue utilizado para el crecimiento de las películas, el reactor consta de dos electrodos enfrentados (Cátodo:

blanco, ánodo: sustrato). En este caso el blanco fue de Au al 99.99% y los sustratos utilizados de acero inoxidable AISI 304. Las películas se produjeron con una descarga de 200 V y una distancia interelectrodica de 4 mm. La descarga se produjo en un ambiente de nitrógeno a presiones que varían de 3 mbar hasta 9.5 mbar, con intervalos de 0.5 mbar. Se utilizo un Difractometro de Rayos X Bruker AXS modelo D8 advance con geometría de haces paralelos y monocromador secundario de grafito para la obtención de los patrones de difracción; para el análisis químico elemental un Microscopio Electrónico de Barrido PHILIPS XL30; para la simulación se utilizo el programa Gaussian 98, el cual trabaja con una base de datos LANL2DZ (5D, 7F), Yu et al [5] Steyl [6] y métodos de Densidad funcional y Hartree Fock, Buica et al [7].

Los patrones de difracción de las 17 muestras analizadas en este trabajo se muestran en la fig 1. La estructura cristalina encontrada para las diferentes películas fue FCC con parámetro de red de 4.078 Å; en esta figura solo se muestra la región (2 theta) de 37° a 39°; en esta región se observan modificaciones en las líneas de Bragg que pueden ser indicios de la coexistencia de una nueva fase.

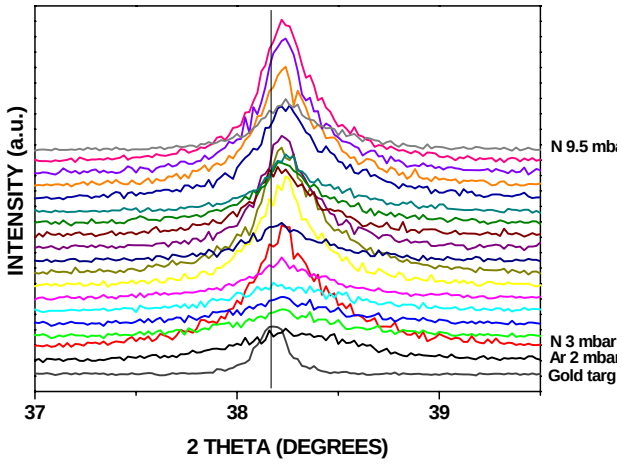


Figura 1. XRD películas de Au

En los nitruros metálicos se observa que el gradiente composicional influye sobre la estabilización estructural del recubrimiento, ya que una mayor cantidad de nitrógeno dentro de la película evidencia un cambio de estructura, es el caso de los nitruros metálicos (MN) que poseen estructuras FCC (con excepción del WN), cuando la estequiometría es tal que la cantidad de nitrógeno supera al metal se encuentran estructuras tipo ortorrómbicas o triclínicas, Evans [8].

En la tabla 1 se observa el porcentaje atómico del Au y N presentes en la superficie del recubrimiento; En el análisis por EDS (Espectroscopia de Energía Dispersiva) no existen alteraciones significativas en las concentraciones de nitrógeno para cambios de 0.5 mbar (presión de crecimiento de las películas), aunque para películas con intervalos de 1.7 mbar se encontró una buena concentración de nitrógeno sobre la superficie (muestras 2, 6, 9 y 14). En los patrones de difracción para estas muestras se observa un cambio en las líneas de bragg, las cuales pueden ser atribuidas al stress residual de la película (muy comúnmente en recubrimientos producidos por PAPVD) o por la coexistencia de una nueva fase, como en recubrimientos de TiN y TiC, Devia [9].

Tabla 1. EDS, concentraciones de Au y N en películas de Au

Muestra	Presión (mbar)	%Au	%N
2	3.0	49.73	7.59
6	5.0	67.22	7.80
9	6.5	71.45	8.37
14	8.0	77.39	9.85

En la fig 2 se observa la densidad de estados para la estructura FCC simulada, los orbitales de los elementos están deformados debido a la interacción entre los átomos del sistema. El orbital 4f del oro permite este tipo de configuración, el cual puede ser observado con algunas modificaciones en la estructura. La superposición total de los orbitales indica el comportamiento metálico de los enlaces, como se observa en la parte superior derecha de la figura, mientras que los orbitales que no interactúan, están asociados a enlaces covalentes (parte inferior de la figura).

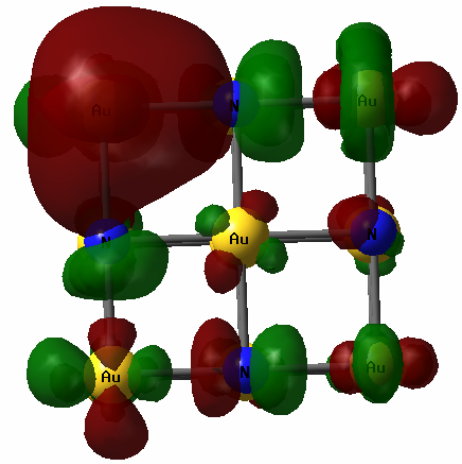


Figura 2. Orbitales Moleculares de AuN

3. CONCLUSIONES

Películas de Au fueron crecidas por un sistema PAPVD por la técnica de arco pulsado. En los patrones de difracción se observo una estructura FCC que corresponde a películas de Au, pero pequeños cambios en las líneas de bragg fueron observadas, debido a la posible inclusión de átomos de nitrógeno dentro de la red del oro. Por medio de EDS se observo que para cambios de 0.5 mbar no existen variaciones en la concentración de nitrógeno sobre la superficie y las películas crecidas con 1.7 mbar de diferencia poseen una mejor concentración de nitrógeno, lo cual puede ayudar a formar una fase estructuralmente estable para el AuN. Por medio del programa GAUSSIAN 98 se encontró que la estructura FCC para el AuN puede ser una fase estable, gracias a los tipos de enlace presentes en el sistema.

4. AGRADECIMIENTOS

Al INSTITUTO COLOMBIANO PARA EL DESARROLLO DE LA CIENCIA Y TECNOLOGIA COLCIENCIAS en su programa doctorados nacionales en la II Convocatoria de Apoyo a Programas de Posgrado 2006. A la Universidad Nacional de Colombia y al Laboratorio de Física de Plasma.

5. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Devia A, Benavides V, Castillo HA, Quintero J, Plasma and Fusion Science, 2006: 258-261.

[2] Yua R and Zhang X. F., Applied Physics Letters, 2005; 86: 121913.

[3] Gregoryanz E, Sanloup C, Somayazulu M, Badro J, Fiquet G, Mao HK, Hemley RJ, Nat. Mater. 2004; 3: 294.

[4] Butenko YuV, Alves L, Brieva AC, Yang J, Krishnamurthy S, Siller L, Chemical Physics Letters, 2006; 430: 89–92.

[5] Yu S, Chen S, Zhang WW, Yu L, Yin Y, Chemical Physics Letters, 2007; 446: 217–222.

[6] Steyl G, Polyhedron, 2007; 26: 5324–5330.

[7] Buica G, Nakajima T, Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer, 2008; 109: 107–118.

[8] Pierson H0, “Interstitial Nitride: Structure and Composition”, Handbook of Refractory Carbides And Nitrides, Westwood, New Jersey, U.S.A., Noyes Publications; 1996, p. 171.

[9] Devia A, Benavides V, Restrepo E, Arias DF, Ospina R, Vacuum, 2006; 81: 378–384.