

Zależność pomiędzy mechanizmem nukleacji a własnościami mechanicznymi w cienkich warstwach miedzi osadzanych technikami ALD/MLD na podłożach polimerowych z gradientem na granicy międzyfazowej

NuMeCu

Osadzanie warstw atomowych i molekularnych (ALD i MLD) jest jedną z najnowocześniejszych i szeroko rozwijanych technik otrzymywania ultra-cienkich warstw z precyzją na poziomie pojedynczych warstw atomowych. Cykl ALD składa się z dwóch kolejnych pulsów oddziałujących z podłożem gazów prekursorów, rozdzielonych pulsem inertnego gazu przedmuchującego komorę. Odpowiednio dobierając prekursory można wytworzyć cienką warstwę praktycznie dowolnego materiału na dowolnym typie podłoża. Warstwy tego typu mają bardzo wysoką jednorodność i zachowują trójwymiarową architekturę podłoża. Jest to wyjątkowa zaleta ALD i MLD w stosunku do bardziej standardowych technik osadzania, takich jak PVD lub CVD. Chociaż obie techniki ALD i MLD są generalnie bardziej kosztowne, zostały już wdrożone komercyjnie w obszarach mikroelektroniki, ogniw słonecznych, tranzystorów z wysoką stałą dielektryczną, a także pokryć antyrefleksyjnych. Podczas gdy większość osadzonych materiałów to tlenki metali, osadzanie cienkich i jednorodnych warstw metali nadal stanowi wyzwanie. Dzieje się tak zwłaszcza w przypadku nanoszenia warstw na podłoża polimerowe, które są wykorzystywane w coraz powszechniejszych elastycznych urządzeniach elektronicznych oraz w rozwijającej się dziedzinie biorobotyki i biomechaniki. Bazujące na tych technologiach przyszłe urządzenia do monitorowania zdrowia i implantologii oraz czujniki zintegrowane z tekstyliami i elastyczne wyświetlacze powinny mieć wysoką odporność na rozciąganie, skręcanie lub zwijanie.

Miedź, jako jeden z najlepszych przewodników elektrycznych, jest także jednym z najbardziej pożądanym materiałów do wytwarzania ultra-cienkich warstw na elastycznych podłożach, które wymagają przeprowadzenia procesu nanoszenia w niskich temperaturach. Niedawne badania wykazały możliwość otrzymywania cienkich warstw techniką ALD przy użyciu gazów redukujących, takich jak hydrochinon, $\text{Zn}(\text{Et})_2$ lub plazma wodorowa w temperaturze poniżej 150 stopni Celsjusza, odpowiedniej dla podłoży organicznych. Chociaż podstawowa zasada reakcji powierzchniowych w ALD i MLD jest raczej prosta, chemisorpcja cząsteczek gazu na podłożu lub powierzchni depozytu, a następnie ich dysocjacja są elementami złożonego zjawiska tworzenia się wiązań na granicy faz, nukleacji i dalszego wzrostu warstwy. Są to czynniki, które bardzo silnie wpływają na przyczepność powłoki metalicznej i jej odporność mechaniczną na spękania.

Aby poznać dokładne mechanizmy nukleacji i wzrostu warstwy Cu, w projekcie zaproponowano badania tworzenia się wiązań na granicy faz za pomocą **eksperymentów in-situ** z wykorzystaniem promieniowania synchrotronowego, badań mikrostrukturalnych za pomocą transmisyjnej mikroskopii elektronowej (TEM) oraz **obliczeń kwantowo-mechanicznych** (DFT). Spektroskopia absorpcyjna miękkiego promieniowania X z wykorzystaniem całkowitego uzysku elektronów oraz spektroskopia fotoelektronów to techniki czułe powierzchniowo, umożliwiające wgląd w proces osadzania i dostarczające informacji na temat wczesnych etapów wzrostu warstwy – zarodkowania, a także umożliwiające identyfikację utworzonych wiązań. Obliczenia DFT pozwalają przyjrzeć się ścieżkom reakcji na poziomie atomowym. Ta część badań pomoże lepiej zrozumieć mechanizmy stojące za ewolucją mikrostruktury podczas wzrostu cienkiej warstwy: określenia działania różnych prekursorów podczas osadzania oraz przebiegu reakcji chemicznych. Na poziomie makroskopowym zostaną przeprowadzone szczegółowe badania eksperymentalne dotyczące **właściwości mechanicznych** w celu ustalenia zależności wcześniej zebranych informacji o interfejsie i strukturze wewnętrznej warstwy z jej przyczepnością, wytrzymałością, odpornością na spękania i twardością. Wyniki eksperymentów mechanicznych posłużą do projektowania gradientów fazowych między polimerem a powłoką metaliczną, w celu zoptymalizowania adhezji i wytrzymałości warstw z precyzją dostępną w technikach ALD/MLD.

Podsumowując, projekt traktuje przedmiot badań z kilku perspektyw z dziedziny inżynierii materiałowej, fizyki i chemii: (i) syntezy cienkich warstw i gradientów na granicy międzyfazowej za pomocą precyzyjnych technik nanoszenia ALD i MLD; (ii) charakterystyki za pomocą analizy in-situ tworzenia się wiązań międzyfazowych i obserwacji TEM ex-situ; (iii) modelowania mechanizmów nukleacji i wzrostu warstw w skali atomowej oraz (iv) korelacji struktury wewnętrznej warstwy z wytrzymałością mechaniczną. Dzięki tak wszechstronnemu podejściu do nauki o materiałach chcemy zapewnić optymalizację wytwarzania warstwy miedzi na podłożach polimerowych, co ma kluczowe znaczenie dla produkcji niezawodnych urządzeń w przyszłej elastycznej elektronice.