

УДК 621.21.54

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
ФОРМИРОВАНИЯ МИКРО- И НАНОСТРУКТУР
УСКОРЕННЫМИ ПОТОКАМИ ИОНОВ ИНЕРТНЫХ И РЕАКТИВНЫХ ГАЗОВ**

И.Н. СПРЕСОВ

(Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск)

Рассматриваются физико-технологические процессы формирования микро- и наноструктур ускоренными потоками ионов инертных и реактивных газов. Предложена модель процесса нанесения тонких пленок на подложках с микронным рельефом. Обоснована эффективность применения ионных потоков при формировании тонких пленок, а также в различных областях современной науки и техники. На основании математической модели исследованы различные формы подложки относительно ионного потока. При увеличении расстояния между подложкой и источником толщина пленки уменьшается. Скорость напыления максимальна при минимальном угле наклона между подложкой и источником. При увеличении времени напыления толщина пленки возрастает пропорционально времени, а при увеличении угла наклона подложки к горизонтальной плоскости толщина пленки уменьшается.

Введение. Одна из важнейших задач в различных отраслях техники, особенно в области микроэлектроники, оптики, при производстве различных изделий – создание равномерных по толщине покрытий. Для плоских поверхностей эта задача успешно решается путем оптимизации позиционирования плоскости нанесения относительно источника наносимого материала, применением внутрикамерных систем перемещения, сложногогеометрических масок, созданием специальных диаграмм направленности молекулярного потока [1].

Что касается сложнорельефных поверхностей, то улучшить равномерность покрытия рельефа возможно либо при условии обеспечения постоянно изменяющегося угла падения молекулярного потока к поверхности, либо используя принцип планаризации. Для первого случая требуется разработка сложных механических систем перемещения, которые, однако, не всегда гарантируют успех; во втором случае усложняется технологический процесс, видоизменяется поверхность, что не всегда допустимо.

Более удобным было бы использовать «немеханические» способы повышения равномерности покрытий, в частности процессы ионного напыления, которые позволили бы получать плёнки на рельефных поверхностях без указанных или сведённых к минимуму недостатков.

Среди наиболее сложных для нанесения пленок – поверхность углубления типа «ступенька». Скорость осаждения материала на подложке зависит не только от эмиссионных характеристик источника, но и от угла распыления, угла конденсации, от расстояния между точками распыления и конденсации и многих других факторов.

Цель данной работы – создать математическую модель формирования твердотельной структуры на поверхности подложки и исследовать зависимости свойств данной структуры от расположения (угла, расстояния) подложки и источника.

Ионно-плазменное распыление

Схема установки для нанесения покрытий катодным распылением представлена на рисунке 1.

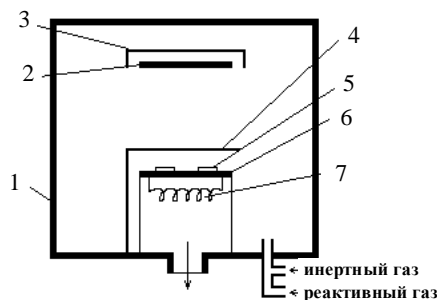


Рис. 1. Схема установки для нанесения покрытий катодным распылением:
1 – камера; 2 – катод; 3 – заземленный экран; 4 – заслонка; 5 – подложка;
6 – заземленный анод; 7 – резистивный нагреватель подложки

Метод осуществляется следующим образом. Вакуумный объем, содержащий анод и катод, откачивают до давления 10...4 Па, после чего производят напуск инертного газа (обычно это аргон при давлении 1...10 Па). Для зажигания тлеющего разряда между катодом и анодом подается высокое напряжение 1...10 кВ. Положительные ионы инертного газа, источником которого является плазма тлеющего разряда, ускоряются в электрическом поле и бомбардируют катод, вызывая его распыление. Распыленные атомы попадают на подложку и оседают в виде тонкой пленки. Скорость осаждения тонкопленочной структуры на подложке в общем виде будет равна

$$R' = M \cdot \frac{\cos \varphi \cdot \cos \gamma}{r^2}, \tag{1}$$

где M – постоянный параметр, пропорциональный скорости распыления; φ – угол распыления; γ – угол конденсации; r – расстояние до подложки.

Угол конденсации – это угол между нормалью к поверхности и вектором конденсации.

В отсутствие наклона подложки влияние основного осаждаемого потока на толщину пленки на боковой поверхности ничтожно мало.

Рассмотрим влияние «местного» переосаждаемого потока (рис. 2).

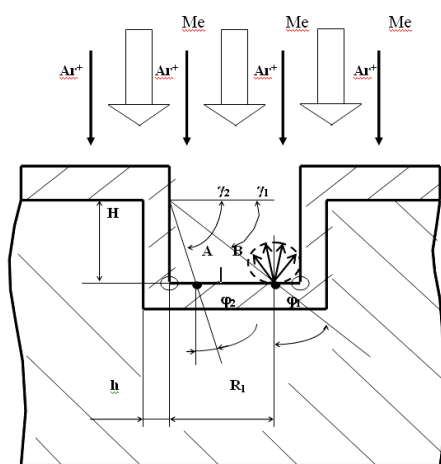


Рис. 2. Схема формирования пленки на ступенчатом рельефе в присутствии ионного пучка

С учетом того, что переосаждаемый поток подчиняется косинусоидальному закону распределения, аналогично (1) можно записать

$$R_G = M' \frac{\cos \varphi' \cdot \cos \gamma'}{r'^2}, \tag{2}$$

где M' – постоянный параметр, пропорциональный скорости распыления; φ' – угол распыления; γ' – угол конденсации; r' – расстояние до вертикальной стенки.

Однако в данном случае из-за соизмеримости размеров «микроисточника» (поверхность AB) и вертикальной стенки, на которую производится нанесение, источник нельзя считать точечным, поэтому необходимо внести соответствующие поправки, учитывающие геометрию рельефа подложки. В результате получаем

$$R_G = M' \int_0^R \int_0^H \frac{\cos \varphi(RH) \cdot \cos \gamma(RH) \Pi(R)}{r'^2(RH)} dR dH, \tag{3}$$

где M' – постоянный параметр, пропорциональный скорости распыления; $\varphi(R, H)$ – угол распыления; R – координата точки источника; H – координата точки вертикальной стенки; $\gamma(R, H)$ – угол конденсации; $\Pi(R)$ – полином, учитывающий неоднородность в распылении поверхности AB ; $r(R, H)$ – расстояние до вертикальной стенки.

Так как выражение, стоящее под интегралом в (3), зависит только от геометрических размеров данного рельефа и практически не изменяется в процессе напыления, то, изменяя M' , можно управлять толщиной пленки на боковых поверхностях подложки.

Скорость травления описывается выражением [2]:

$$S = S_0 \left(\frac{j}{\rho} \right) (A \cos \Theta + B \cos^2 \Theta + C \cos^4 \Theta), \quad (4)$$

где S_0 – эффективность травления пленки в исходных условиях; j – плотность тока в ионном пучке; ρ – плотность атомных слоев; Θ – угол травления; A, B, C – коэффициенты, характеризующие эффективность травления пленки.

Учитывая вклад каждой из стадий (нанесение, распыление, перенесение) можно записать:

$$R = R' - S + M' \int_0^{RH} \frac{\cos \varphi(RH) \cdot \cos \gamma(RH) \Pi(R)}{r'^2(RH)} dRdH; \quad (5)$$

$$V = M \frac{\cos \varphi}{r^2}; \quad (6)$$

$$h = M \frac{\cos \varphi}{r^2} t, \quad (7)$$

где M – постоянный параметр, пропорциональный скорости распыления; φ – угол конденсации; r – расстояние до вертикальной стенки; t – время напыления.

Если учесть, что M' и S определяются в основном интенсивностью дополнительного ионного пучка то, изменяя последнюю, можно легко регулировать скорость осаждения (5), а соответственно и толщину покрытия на вертикальных и горизонтальных стенках. При этом становится возможным улучшение профиля заполнения рельефа даже при отсутствии наклона подложки.

Метод математического моделирования поверхностно-активных процессов напыления

Основные понятия и определения. Моделирование является одним из наиболее распространенных способов изучения различных процессов и явлений.

Исходя из самых общих представлений *моделирование* представляет собой процесс замещения объекта исследования некоторой его моделью и проведение исследований на модели с целью получения необходимой информации об объекте. В свою очередь, *модель* можно определить как физический или абстрактный образ моделируемого объекта, удобный для проведения исследований и позволяющий адекватно отображать интересующие исследователя физические свойства и характеристики объекта.

В настоящее время известны и широко используются в научных исследованиях и инженерной практике многочисленные методы и приемы моделирования. В общем случае можно выделить *физическое* и *математическое* моделирование [4].

При *физическом (натурном) моделировании* модель воспроизводит изучаемый процесс или объект с сохранением его физической природы. Физическое моделирование широко применялось до недавнего времени при проектировании сложных технических объектов. Обычно изготавливался макетный или опытный образец технического объекта, проводились испытания, в процессе которых определялись его выходные параметры и характеристики, оценивались надежность функционирования и степень выполнения технических требований. Если вариант технической разработки оказывался неудачным, все повторялось сначала, т.е. осуществлялось повторное проектирование, изготовление опытного образца, испытания и т.д.

Примерами такого моделирования являются продувка моделей самолетов в аэродинамических трубах, испытание блоков РЭС на вибростендах и др.

К преимуществам физического моделирования перед натурным экспериментом можно отнести прежде всего отличие условий реализации процесса-модели от условий, свойственных процессу-оригиналу, которые выбираются исходя из удобства и простоты исследования. Поскольку при физическом моделировании нет необходимости сохранять размеры конструкций, время и интенсивность воздействующих факторов, то появляется реальная возможность интенсификации процесса исследований и получения необходимых результатов при меньших материальных и временных затратах. Однако при этом условия моделирования не могут выбираться абсолютно произвольно. Между процессом-оригиналом и процессом-моделью должны быть сохранены определенные соотношения подобия, вытекающие из закономерностей физиче-

ской природы явлений и гарантирующие возможность использования сведений, получаемых путем моделирования, для адекватной оценки свойств исследуемого оригинала (подобие – это условие, при котором возможен количественный перенос результатов эксперимента с модели на оригинал).

Исходя из изложенного выше видно, что физическое моделирование связано со значительными материальными и временными затратами. Поэтому физическое моделирование имеет ограничения в применении. В этом отношении более широкие возможности у *математического* и *компьютерного* моделирования. Под математическим моделированием понимают процесс создания математической модели и оперирование ею с целью получения необходимых сведений о реальном или проектируемом технологическом объекте. Математическое моделирование позволяет посредством математических символов и зависимостей составить описание функционирования технологической системы в условиях окружающей среды, определить выходные параметры и характеристики, получить оценку показателей эффективности и качества, осуществить поиск оптимальной структуры и параметров объекта [4].

Применение математического моделирования при проектировании в большинстве случаев позволяет отказаться от физического моделирования, значительно сократить объемы испытаний и доводочных работ, обеспечить разработку технологических систем с высокими показателями эффективности и качества. Основой этого вида моделирования является математическая модель.

Математическая модель – это совокупность математических соотношений (уравнений, неравенств, логических условий и др.) и связей между ними, отражающих важнейшие свойства исследуемого процесса или объекта.

Математическое моделирование основано также на том факте, что различные изучаемые явления могут иметь одинаковое математическое описание. Хорошо известным примером служит описание одними и теми же уравнениями электрического колебательного контура и пружинного маятника.

Математическая модель концентрирует в себе записанную в форме математических соотношений совокупность знаний, представлений и гипотез о соответствующем объекте или явлении. Поскольку знания эти никогда не бывают абсолютными, а в гипотезах иногда намеренно не учитывают некоторые эффекты (например, влияние силы трения в механике, потери на тепло в электронике и т.п.), модель лишь приближенно описывает поведение реальной системы.

При математическом моделировании исследование процесса может проводиться чисто математическими методами, например, поиском экстремумов функций, критериальных соотношений и др. Однако в настоящее время наиболее широко применяются методы *компьютерного* моделирования, которые предусматривают программную реализацию математической модели и ее исследование в соответствии с разработанным алгоритмом. *Алгоритм* – это соответствующим образом записанное предписание, определяющее последовательность выполнения операций вычисления математической модели на ЭВМ. Разработка алгоритмов компьютерной реализации математической модели является важной и ответственной задачей моделирования, результаты которой во многом определяют эффективность и быстродействие вычислительного эксперимента. Для наглядности алгоритмы чаще всего представляют в виде блок-схем, дополнительно может даваться их словесное описание.

В связи с широким распространением персональных компьютеров, повышением их быстродействия, емкости оперативной памяти, наличием эффективного системного программного обеспечения и соответствующих языков программирования компьютерное моделирование стало наиболее распространенным и перспективным методом исследований и разработки технологических систем. Оно в значительной степени определяет научно-технический прогресс в различных отраслях техники, особенно в области электроники, где без применения автоматизированных методов проектирования и производства вообще невозможно дальнейшее развитие.

Выбор модели

В модели струны (рис. 3) граница между обработанной и необработанной областями (например, между протравленной и непротравленной областями в ходе травления) аппроксимируется набором точек, соединенных между собой прямыми отрезками.

Результирующий профиль обработанной поверхности определяется положением первоначального профиля [3], который движется через среду с учетом того, что скорость распространения в каждой точке является функцией локальных переменных.

Рассмотрим пример, приведенный на рисунке 3, который иллюстрирует приложение модели струны к процессам изотропного и анизотропного травления.

Моделирование изотропного травления заключается в придании всем точкам струны постоянной скорости перемещения в направлении биссектрисы угла, образуемого между двумя перпендикулярами к соседним прямолинейным отрезкам. Скорость анизотропного травления пропорциональна косинусу угла между направлением потока травящих частиц и нормалью к поверхности (рис. 3, б).

Граница обрабатываемого материала представляется в виде ломаной линии, координаты узлов которой хранятся в памяти ЭВМ.

В каждый момент времени вычисляются скорости движения границы, и происходит сдвиг либо узлов в направлении биссектрис углов между сегментами, либо сегментов в перпендикулярном им направлении. В рамках модели струны рост пленок в ходе осаждения моделируется как травление с отрицательной скоростью. Продвижение каждой точки кусочно-линейного профиля определяется условиями осаждения. В процессе такого продвижения происходит добавление или отбрасывание точек на отрезках струны, когда они становятся длинными или очень короткими.

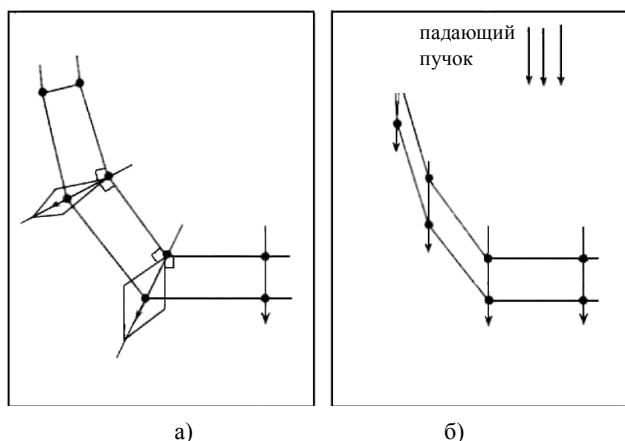


Рис. 3. Модель струны для представления процессов травления: изотропное (а) и анизотропное (б) поступательное движение точек, принадлежащих профилю края обрабатываемой поверхности

Программный комплекс

Обоснование выбора языка программирования JAVA. Проблема выбора языка программирования при создании программ весьма актуальна. Алгоритмический подход к разработке программ, должен быть заменен объектно-ориентированной моделью, являющейся в настоящее время основной моделью, используемой в индустрии программирования.

Существуют различные языки программирования, каждый из которых обладает определенными достоинствами и не меньшим количеством недостатков. Язык Basic не является типизированным и объектно-ориентированным языком программирования, кроме версии языка VB.NET, но его использование связано с трудностями технического плана (достаточно высокие аппаратные требования). Практически все версии языка программирования Basic разработаны для MS-DOS, которая прекратила свое существование, в версиях Windows 2000 и Windows XP имеется только командная строка, позволяющая выполнять консольные приложения. Язык Pascal, являясь типизированным языком, не относится к объектно-ориентированным языкам, кроме версии Object Pascal, используемой в среде программирования Delphi. Объектно-ориентированные возможности языка Object Pascal – надстройки над языком Pascal, структура программы на языке Object Pascal подобна структуре обычного языка Pascal.

Главным требованием при выборе языка программирования должна быть поддержка методов объектно-ориентированного программирования на уровне структуры программы. Среди проанализированных языков программирования данному критерию удовлетворяют два языка: Java и C#. Они являются основными языками для двух конкурирующих платформ Java 2 Enterprise Edition и .Net Framework.

Второе требование – это интегрированная среда программирования, удовлетворяющая современным требованиям, предъявляемым к такой среде (возможность использовать как визуальное программирование, так и написание кода вручную; создание различного типа приложений и т.п.).

Для языка Java доступны как минимум две среды программирования, удовлетворяющие данному критерию: интегрированная среда программирования Eclipse и интегрированная среда программирования NetBeans, поставляемая вместе с Java 2 SDK Standard Edition v. 1.4.2.

Потребность в использовании языка Java связана с тем, что он позволяет разрабатывать программы для мобильных устройств. Для этого может использоваться Java 2 SDK Mobile Edition. Это направление нам кажется достаточно перспективным ввиду того, что в настоящее время появляются все больше новых мобильных устройств, стоимость которых все время уменьшается.

Описание программного комплекса. Программный комплекс основан на принципе модели струны и математических выкладок, описанных выше в (1) – (7). Данный комплекс написан на языке JAVA и представляет собой однодокументное Windows-приложение с несколькими рабочими окнами, имеет структуру, показанную на рисунке 4.

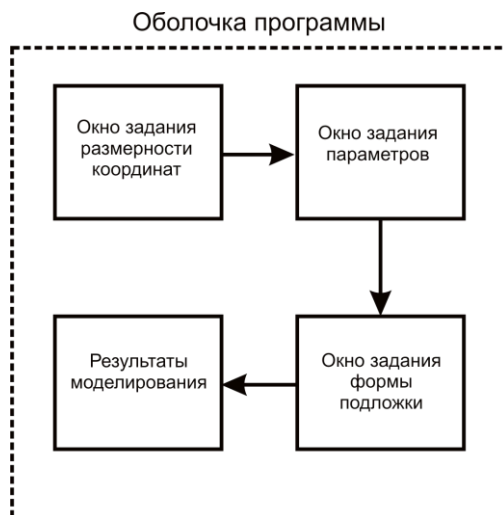


Рис. 4. Структурная схема программного комплекса

Для проведения эксперимента нами была избрана ступенчатая форма подложки. Результаты моделирования представлены на рисунке 5.

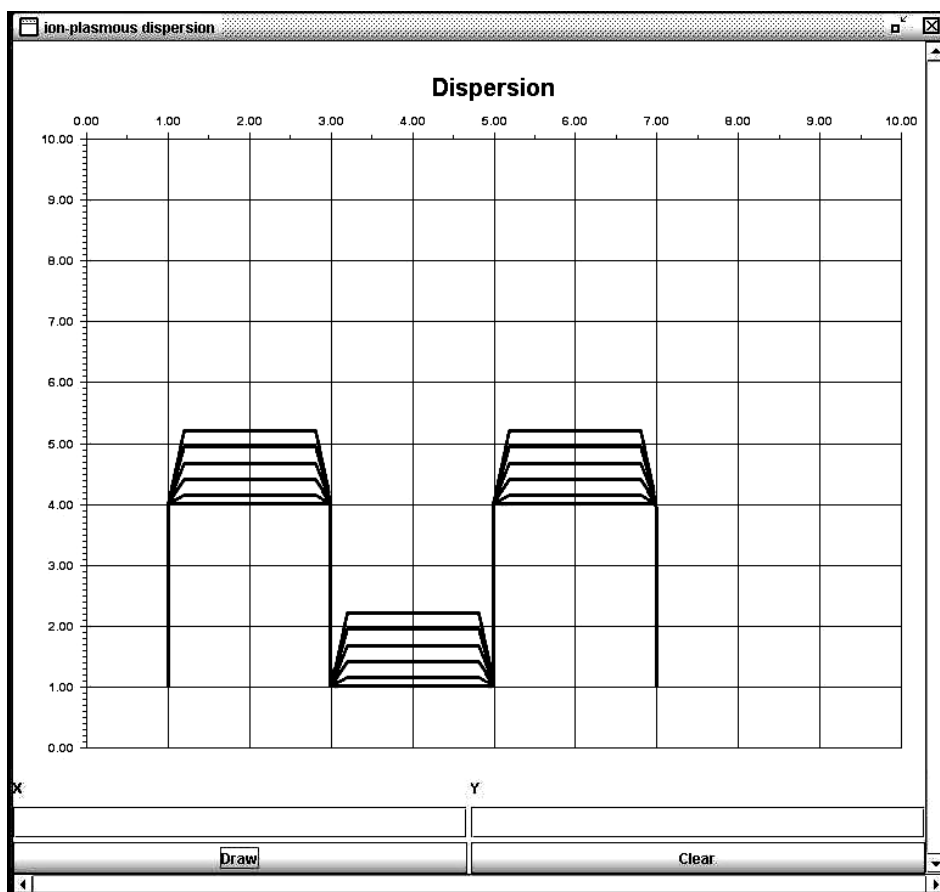


Рис. 5. Результаты моделирования для подложки ступенчатой формы

Исследовалась зависимость скорости напыления от угла наклона плоскости подложки к горизонтальной поверхности. Полученные результаты проиллюстрированы рисунком 6.

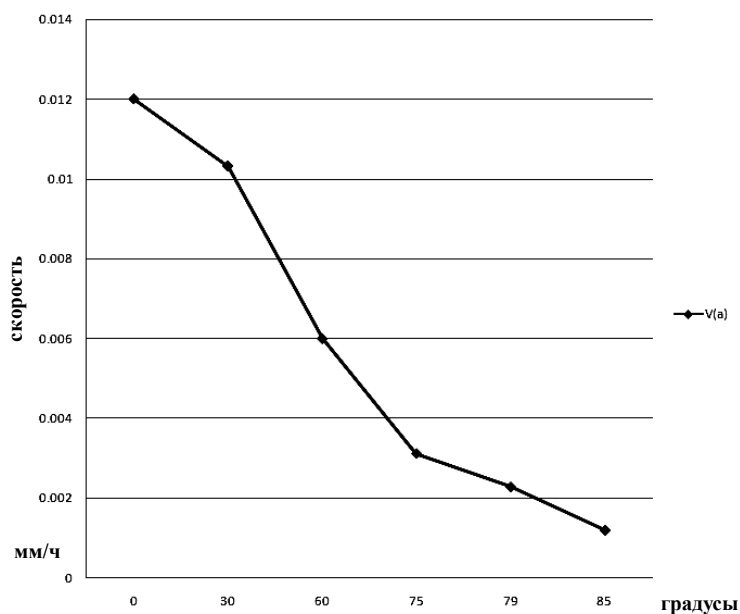


Рис. 6. Зависимость скорости напыления от угла наклона плоскости подложки к горизонтальной поверхности

По результатам исследования зависимости толщины пленки от угла наклона подложки к горизонтальной поверхности при разной длительности процесса напыления построен график, изображенный на рисунке 7.

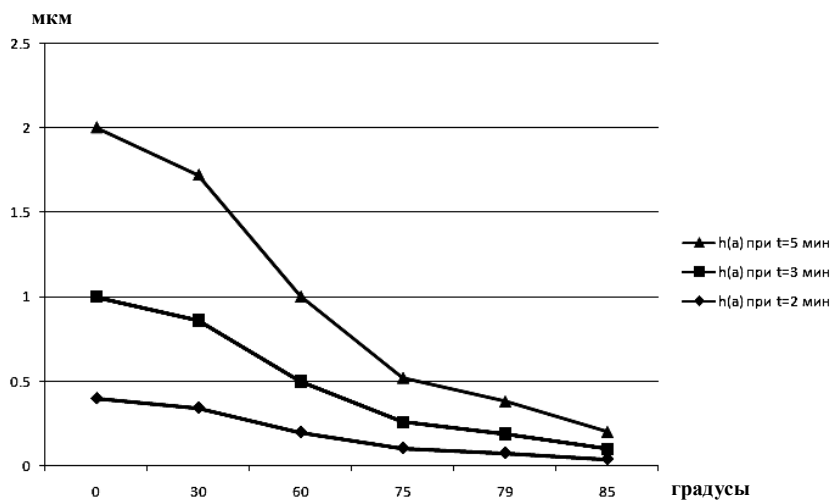


Рис. 7. Зависимость толщины пленки от угла наклона при разной длительности процесса напыления

Анализ приведенного графика свидетельствует о том, что при увеличении времени напыления толщина пленки возрастает в 2 раза, а при увеличении угла наклона подложки к горизонтальной плоскости толщина пленки уменьшается.

В данной работе также исследуются зависимости толщины пленки от расстояния подложки до источника. На основании полученных данных был построен график зависимости толщины пленки от расстояния подложки до источника, представленный на рисунке 8.

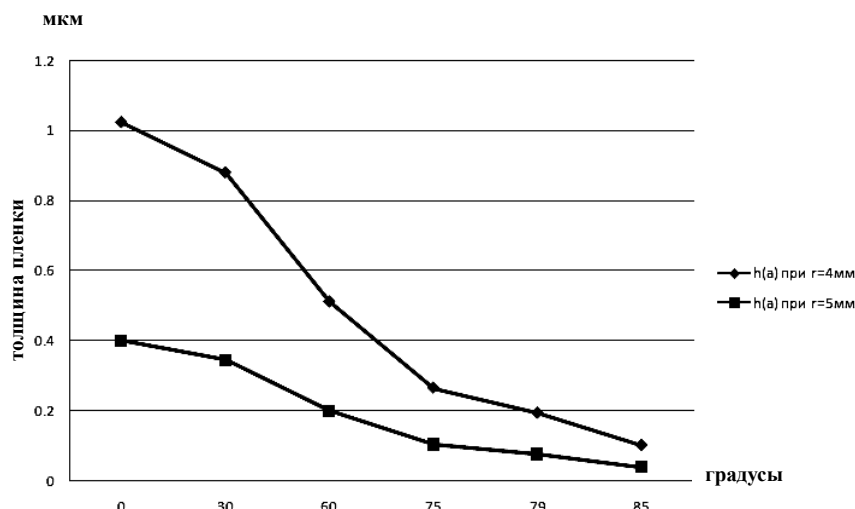


Рис. 8. Зависимость толщины пленки от расстояния подложки до источника

Исходя из полученных данных можно сделать вывод о том, что при увеличении расстояния между подложкой и источником толщина пленки уменьшается обратно пропорционально расстоянию (см. рис. 8).

Заключение. В данной работе предпринята попытка обосновать эффективность применения ионных потоков при формировании тонких пленок, а также в различных областях современной науки и техники.

На основании исследований можно сделать следующие выводы:

- 1) скорость напыления максимальна при минимальном угле наклона между подложкой и источником;
- 2) при увеличении времени напыления толщина пленки возрастает пропорционально времени, а при увеличении угла наклона подложки к горизонтальной плоскости толщина пленки уменьшается;
- 3) при увеличении расстояния между подложкой и источником толщина пленки уменьшается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Волин, Э.М. Ионно-плазменные методы получения износостойких покрытий (Обзор зарубежной литературы за 1979 – 1983 гг.) / Э.М. Волин // Технология легких сплавов. – 1984. – № 10.
2. Структура и механические свойства вакуумно-плазменных покрытий TiCN / В.М. Мацевитый [и др.] // Известия высших учебных заведений. Черная металлургия. – 1984. – № 3.
3. Майссела, Л. Технология тонких пленок / Л. Майссела, Р. Гленга. – М.: Советское радио, 1977.
4. Кундас, С.П. Компьютерное моделирование технологических систем / С.П. Кундас, Т.А. Кашко. – Минск: БГУИР, 2002. – 168 с.
5. Анищенко, Л.М. Автоматизированное проектирование и моделирование технологических процессов / Л.М. Анищенко, С.Ю. Лавренюк, В.В. Петрухин. – М.: Радио и связь, 1995. – 176 с.

Поступила 11.02.2011

SIMULATION OF PHYSICAL PROCESSES FORMATION OF MICRO-AND NANOSTRUCTURES EXPEDITE THE FLOW OF IONS OF INERT AND REACTIVE GASES

I. SPRESOV

In this article the physical processes of micro- and nanostructures formation with accelerated ion beams of inert and reactive gases are described. A new model was proposed: a process of application of thin membranes on the base with micron relief. The efficiency of ion streams application is justified in the formation of thin membranes, as well as in various areas of science and technology. Based on the mathematical model, the various forms of the base relative to the ion flow were explored. As the distance between the base and the source grows, the thickness of the membrane decreases; the velocity of coating is maximal when the angle of the base and the source is minimal. With the increasing of coating time, the membrane thickness increases proportionally with time, while increasing the angle of the base to the horizontal surface makes the membrane thickness decrease.