

СОДЕРЖАНИЕ

Том 51, номер 4, 2022

ДИАГНОСТИКА

Применение метода регуляризации Тихонова в задачах эллипсоидальной порометрии low-k диэлектриков

Р. А. Гайдукасов, А. В. Мяконьких, К. В. Руденко 243

Применение методов, используемых при интерпретации спектров электронной спектроскопии, к расшифровке сигналов ионной спектроскопии

В. П. Афанасьев, Л. Г. Лобанова 255

МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделирование кремниевых цилиндрических с полностью охватывающим затвором КМОП нанотранзисторов с переменным радиусом рабочей области

Н. В. Масальский 265

Моделирование методом конечных элементов устройств на поверхностных акустических волнах с использованием пакета COMSOL

А. С. Койгеров, А. В. Корляков 272

ПЛАЗМЕННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Формирования наноразмерных структур на поверхности кремния комбинацией методов фокусированных ионных пучков и плазмохимического травления

В. С. Климин, Ю. В. Морозова, И. Н. Коц, З. Е. Вакулов, О. А. Агеев 283

Плазмохимическое и реактивно-ионное травление кремния в среде тетрафторметана с аргоном

Д. Б. Мурин, С. А. Пивоваренок, А. С. Козин 291

Параметры плазмы и кинетика реактивно-ионного травления кремния в смеси $C_6F_{12}O + Ar$

А. М. Ефремов, В. Б. Бетелин, К.-Н. Kwon 296

ПРИБОРЫ

О механизме образования проводящей среды в мемристорах на основе электроформованных открытых “сэндвич”-МДМ-структур

В. М. Мордвинцев, Е. С. Горлачев, С. Е. Кудрявцев 304

Эффективность методов повышения сбое- и отказоустойчивости блоков статической оперативной памяти

Л. А. Щигорев 313

УДК 621.3.049.771.14

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА В ЗАДАЧАХ ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОЙ ПОРОМЕТРИИ LOW-K ДИЭЛЕКТРИКОВ

© 2022 г. Р. А. Гайдукасов^{a, b}, А. В. Мяконьких^{a, *}, К. В. Руденко^a^aФизико-технологический институт им. К.А. Валиева РАН,
Нахимовский проспект, 34, Москва, 117218 Россия^bМосковский физико-технический институт (НИУ), Институтский переулок, 7,
Долгопрудный, Московская область, 141701 Россия

*E-mail: miakonkikh@ftian.ru

Поступила в редакцию 06.01.2022 г.

После доработки 22.02.2022 г.

Принята к публикации 28.02.2022 г.

В развитии перспективных технологий масштабирования УБИС одну из ключевых ролей играют пористые диэлектрики с низкой диэлектрической проницаемостью, применяемые для изоляции межсоединений в системе металлизации. Конденсация газообразных продуктов в порах таких пленок позволяет решить важнейшую проблему, препятствующую интеграции таких пленок, осуществить малоповреждающее плазменное травление. С другой стороны, на исследовании изотермы адсорбции при конденсации в порах пленки основаны и методы изучения пористости. Поэтому исследование адсорбции в порах является одной из важнейших практических задач, возникающих при создании диэлектриков с низкой диэлектрической проницаемостью и исследовании низкоповреждающих методов их структурирования. Метод эллипсометрической порометрии является простым в реализации и точным подходом для получения изотермы адсорбции, однако ее дальнейший анализ и определение распределения пор по размерам сводится к решению интегрального уравнения и является некорректно поставленной задачей. В настоящей работе предложено применить для ее решения метод регуляризации Тихонова. Метод был верифицирован на модельных данных и использован для исследования образца low-k диэлектрика с исходной толщиной 202 нм и диэлектрической проницаемостью 2.3 на основе органосиликатного стекла.

Ключевые слова: системы металлизации ИС, нанопористые диэлектрики с низкой диэлектрической проницаемостью, эллипсометрическая порометрия, теория объемного заполнения микропор (ТОЗМ), метод регуляризации Тихонова

DOI: 10.31857/S0544126922040068

1. ВВЕДЕНИЕ

Продолжающееся масштабирование транзисторов в интегральных схемах предъявляет новые требования к системам металлизации, состоящие в уменьшении диэлектрической проницаемости и снижении размеров проводников. В связи с этим, продолжаются исследования, связанные с оптимизацией химического состава при разработке новых материалов с низкой диэлектрической проницаемостью для уменьшения RC-задержек и взаимного влияния (crosstalk) систем межсоединений интегральных схем [1]. В настоящее время распространены органосиликатные стекла (organosilicate glasses – OSG) диэлектрики с низкой диэлектрической проницаемостью, которые имеют пористость около 30–40% и диэлектрическую проницаемость около 2.5. Эти диэлектрики предлагается использовать в суб-10 нм технологических маршрутах, в связи

с чем они находятся в стадии интенсивного исследования.

Связь диэлектрической постоянной с полной поляризацией среды, состоящей из поляризуемых полярных молекул, описывается уравнением Дебая [2]:

$$\frac{k-1}{k+2} = \frac{4\pi}{3} N \left(\alpha_e + \alpha_d + \frac{\mu^2}{3k_b T} \right), \quad (1)$$

где k – диэлектрическая проницаемость, N – количество диполей, α_e – электронная поляризация, α_d – ионная поляризация, μ – ориентация диполя в пространстве. Из этого уравнения видно, что диэлектрическая константа напрямую зависит от общего числа диполей в материале и его плотности, поэтому частичная замена твердой матрицы материала вакуумом ($k \approx 1$) позволяет снизить диэлектрическую проницаемость. Возможности

такого подхода варьируются от освоенного в технологии внедрения случайного однородного заполнения структуры диэлектрика порами с характерным размером менее 2 нм до создания более крупных воздушных промежутков (air-gaps), локализованных между проводниками [3].

Для снижения диэлектрической проницаемости методом внедрения пор есть два пути: при помощи плазменно-стимулированного химического осаждения из газовой фазы (PECVD), который хорошо подходит для используемой в настоящее время технологии интеграции дамасцен (damascene), и метод нанесения пленки при помощи центрифугирования (spin-on). При создании пленки вводятся жертвенные частицы, после удаления которых образуются пустоты, которые могут быть и связанными между собой и поверхностью (открытая пористость), и изолированными (закрытыми). Существует пять общих требований для успешной интеграции low-k материала: 1) образец должен быть гидрофобным, так как вода имеет чрезвычайно полярные связи O–H, и значение диэлектрической проницаемости близкое к 80, и даже незначительная адсорбция атмосферной воды приводит к значительной деградации диэлектрика; 2) образец должен быть механически стабильным, чтобы выдерживать механические этапы обработки; 3) материал должен выдерживать температуру 400–450°C, при которой происходит изготовление межсоединений; 4) материал должен быть химически и физически стабильным для этапов травления и очистки; 5) для совместимости с другими материалами, low-k диэлектрик должен иметь соответствующие параметры коэффициента теплового расширения, барьерного осаждения и адгезии.

Пористость определяет физические и химические параметры пленки, увеличение пористости ведет к ухудшению ее механических свойств, что затрудняет процесс интеграции пористых диэлектриков в системы металлизации. Часто исследование распределения пор по размерам и структуры пористости помогает оптимизировать разрабатываемые новые материалы [1].

Пористость образца, средний радиус пор и распределение пор по размерам являются одними из важнейших параметров, с помощью которых можно анализировать как созданные образцы, так и подвергнутые различным физическим процессам. Методы, основанные на заполнении пор адсорбтом, такие как эллипсометрическая порометрия [4] и кварцевые микровесы в сочетании с адсорбцией [5], не чувствительны к закрытым порам, хоть однако широко применяются и являются общедоступными. Измерение полной пористости возможно методами рентгеновской дифракции [6] и лучевой позитронной аннигиляционной спектроскопии (PALS) [7]. Первый метод основан на

анализе рассеянных лучей при прохождении их через образец. Для анализа данных необходимо строить модель для определения электронной плотности ρ_e , поэтому восстановление распределения пор по размерам является сложной задачей. В свою очередь PALS является мощным методом, способным исследовать нанопоры или дефекты в широком диапазоне размеров от 0.3 до 30 нм. Кроме того, PALS с использованием пучка позволяет изучать образцы послойно (толщиной от нескольких нанометров до нескольких микрон). Недостатком этого метода является сложность экспериментальной реализации метода.

В данной работе проведен анализ вычислительных сложностей, возникающих при интерпретации данных эллипсометрической порометрии, и предложено применение метода регуляризации Тихонова для решения такого рода задач. Верификация предложенного подхода выполнена при помощи реконструкции распределения пор по модельным данным. Предложенный подход применен для расчета распределения пор по размерам по экспериментальным данным.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МЕТОДА ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОЙ ПОРОМЕТРИИ

Метод эллипсометрии основан на измерении изменения состояния поляризации света при отражении от поверхности образца, которое может быть определено с высокой точностью [4, 8, 9]. Из формул Френеля, которые связывают коэффициенты отражения для волны с поляризацией в плоскости падения R_p и перпендикулярной ей R_s , получается фундаментальное уравнение эллипсометрии:

$$\operatorname{tg} \Psi e^{i\Delta} = \frac{R_p}{R_s}.$$

В случае, когда образец состоит из тонкой оптически прозрачной пленки на поверхности кремния, задача требует рассмотрения переотражения света на верхней и нижней границе пленки и интерференции между ними. Параметры Ψ и Δ могут быть вычислены, если известны оптические свойства и толщина пленки. Обратная задача вычисления оптических свойств и толщины пленки из параметров Ψ и Δ в общем случае невозможна. Как правило, численное решение обратной задачи эллипсометрии сводится к минимизации невязки модельных и экспериментальных значений параметров Ψ и Δ (их спектральных зависимостей). Метод спектральной эллипсометрии нашел широкое применение в микроэлектронике [10].

Эллипсометрическая порометрия используется для измерения пористости и распределения пор по размерам (PSD). Метод основан на способности пористой пленки адсорбировать пары газов внутри пор с образованием жидкости. Пористость можно определить по значениям показателя преломле-

ния пленки до и после адсорбции газов. Связь между оптическими константами и свойствами многокомпонентной системы описывается формулой Лоренца-Лоренца [11]:

$$B = \sum N_i \alpha_i = \frac{3(n^2 - 1)}{4\pi(n^2 + 2)}, \quad (2)$$

где B – эффективная поляризация единицы объема, n – эффективный показатель преломления многокомпонентной пленки, N и α – число молекул и молекулярная поляризуемость.

При увеличении относительного давления адсорбата на поверхности образца, заполняются поры все большего радиуса, что ведет к изменениям оптических параметров. Зависимости показателя преломления от давления паров адсорбата называются изотермами адсорбции и десорбции. Как правило эти зависимости отличаются, т.е. наблюдается эффект гистерезиса, из-за наличия в структуре пор менисков, которые ведут к “задержке” освобождения пор в процессе десорбции.

Анализ данных порометрии опирается на классификацию изотерм Брунауэра [12]. Определяющееся значение играет характерный размер пор и их форма [13].

Для микро- и мезопор характерны разные процессы адсорбции. Для мезопор (радиус пор больше 2 нм) характерна полимолекулярная адсорбция, которая с увеличением давления заканчивается капиллярной конденсацией. Этот процесс обусловлен проявлением капиллярных сил. В случае плоской поверхности конденсация происходит, когда давление становится равным давлению насыщенного пара, то есть при $P/P_0 = 1$, а конденсация над вогнутой поверхностью в порах происходит при $P/P_0 < 1$, что ведет к изменению химического потенциала и условий фазового равновесия в порах, где P_0 – давление насыщенного пара над плоской поверхностью. Связь радиуса мениска и относительного давления описывается уравнением Кельвина-Томсона [14]:

$$r_m = \frac{2\sigma M}{\rho RT \ln \frac{P}{P_0}}, \quad (3)$$

где σ – поверхностное натяжение жидкости, R – газовая постоянная, T – температура, M – молярная масса, ρ – плотность. Также стоит отметить, что процессы адсорбции и десорбции различны, так как при адсорбции адсорбат удаляется из поры во всем объеме при соответствующем давлении. Поэтому конечный радиус при десорбции равен радиусу самой поры, в то же время в процессах адсорбции необходимо делать поправку ВЕТ [15], которая описывает адсорбцию на стенках пор слоя адсорбата до заполнения самой поры. Она может

быть получена из теории адсорбции Ленгмюра и имеет вид:

$$t = \frac{t_0 C K^P / P_0}{(1 - K^P / P_0)(1 + (C - 1) K^P / P_0)}, \quad (4)$$

где C – константа, описывающая взаимодействие адсорбента и адсорбата, K – коэффициент, введенный для расширения области применения уравнения ВЕТ [16], t_0 – толщина одного монослоя. Принимается, что конечный радиус пор при адсорбции равен $r = r_m + t$.

Изотерма адсорбции описывается интегралом от функции $z(r)$, представляющей распределение пор по размерам:

$$W(P/P_0) = \int_0^{+\infty} z(r) dr. \quad (5)$$

В микропорах (радиус меньше 2 нм) поля поверхностных сил перекрываются и действуют во всем объеме микропор. Для описания адсорбции в микропорах, Дубининым была разработана теория объемного заполнения микропор (ТОЗМ) [17], которая описывает заполнение поры моментально во всем объеме в диапазоне относительных давлений от 0.001 до 0.1. Основной термодинамической функцией этой теории является дифференциальная максимальная молярная работа адсорбции A , равная со знаком минус изменению свободной энергии Гиббса адсорбции ΔG : $A = RT \ln(P/P_0) = -\Delta G$, где p – равновесное давление пара при температуре T . Если адсорбция выражается в безразмерных единицах, то дифференциальную молярную работу адсорбции целесообразно выражать способом, сходным по форме с безразмерным отношением A/E , где E – характерная свободная энергия адсорбции. Тогда тепловое уравнение адсорбции

можно представить в общем виде: $\theta = f\left(\frac{A}{E}, n\right)$, где n – параметр, зависящий от адсорбента, θ – степень заполнения пор, равное отношению заполненности W к максимальной заполненности пор W_0 . Последнее уравнение выражает распределение заполнения микропор в зависимости от дифференциальной молярной работы адсорбции A , причем параметры распределения E и n не зависят от температуры. Из температурной инвариантности и основываясь на распределении Вейбулла, Дубинин и Астахов получили термическое уравнение адсорбции в аналитической форме, которое выражается следующим образом [17]:

$$F(A) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{A}{E}\right)^n\right]. \quad (6)$$

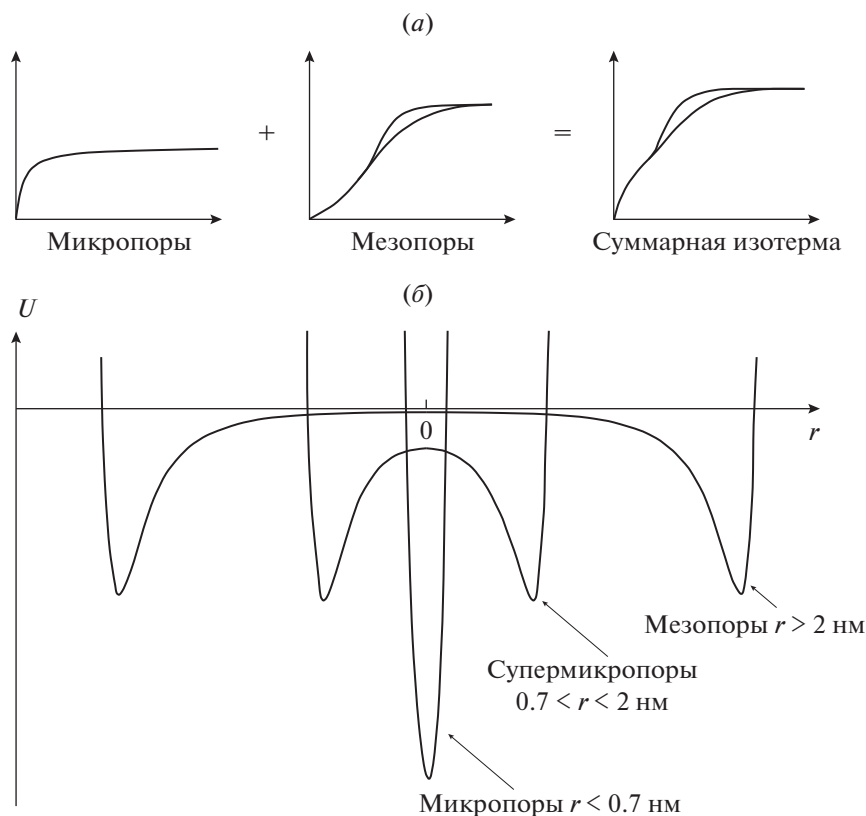


Рис. 1. Результат перекрытия поверхностных полей в порах разного размера выражается в (а) наблюдаемых изотермах адсорбции и (б) зависимости энергии притяжения к противоположным стенкам поры.

Видно (при $p/p_0 = 1$), что $F(A)$ выражает долю незаполненного объема пор, поэтому θ описывает долю заполненного объема конденсатом:

$$\theta = \exp\left[-\left(\frac{A}{E}\right)^n\right]. \quad (7)$$

На рис. 1а схематично изображены изотермы адсорбции для микропористых и мезопористых образцов. По классификации Брунауэра данные изотермы принадлежат к первому и пятому типу изотерм. Если расстояние между противоположными стенками пор становится слишком большим, то поля поверхностных сил перестают перекрываться (рис. 1б), и теория объемного заполнения перестает работать, и дальнейшая адсорбция описывается капиллярной конденсацией [4, 5]. Поэтому в экспериментах наблюдается сумма двух изотерм для микро- и мезопор.

В статье [20] с использованием данных малоуглового рассеяния рентгеновских лучей на углеродсодержащих адсорбентах [21], которые давали информацию о линейных характеристиках микропор, было получено эмпирическое соотношение, связывающее радиус инерции шелевидной поры x и свободную энергию адсорбции E .

$$r = \frac{k}{2E}. \quad (8)$$

Здесь параметр k является коэффициентом пропорциональности и обычно принимается равным 12.

Отсюда уравнение Дубинина-Астахова (ДА) (при $n = 2$ Дубинина-Радушкевича) принимает вид [17]:

$$W = W_0 \exp\left[-\left(\frac{rA}{\beta k}\right)^2\right], \quad (9)$$

где β является коэффициентом подобия, отражающим природу адсорбируемого вещества. Это уравнение описывает адсорбцию для образца, имеющего поры одного размера. Размер пор находят путем линеаризации уравнения в координатах $(\lg(W), A^2)$.

Возможен подход, в котором определяют параметры распределения пор по размерам из семейства таких распределений, например описываемого гауссианом [6]. Недостатком такого подхода является то, что форма распределения не определяется при решении задачи, а задается априорно.

Для определения распределения пор $z(B)$, где $B = r^2/k^2$, необходимо решить интегральное уравнение, которое описывает процесс адсорбции в микропорах:

$$W(P/P_0) = \int_0^{+\infty} z(B) \exp(-B(A(P/P_0))^2) dB, \quad (10)$$

Задачи (5) и (10) относятся к классу некорректно поставленных задач. Как правило, их решение численными методами связано с возникновением неустойчивостей и артефактов, приводящих к значительным погрешностям. В настоящей работе предложено осуществлять решение методом регуляризации Тихонова [23]. Выбор метода обусловлен тем, что он обеспечивает эффективность для решения задач этого класса. Метод Тихонова, как и любой метод регуляризации, основан на использовании априорной информации о классе функций, на котором ищется решение задачи.

3. МЕТОД РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ТИХОНОВА

Рассмотрим уравнение первого рода

$$Az = u, \quad z \in Z, \quad u \in U, \quad (11)$$

где Z и U – конечномерные функциональные пространства с оператором $A: Z \rightarrow U$. Задачи данного типа часто встречаются в физике при различных исследованиях и экспериментах, и из-за наличия шума в исходных данных решение является неустойчивым, то есть некорректно поставленной задачей. По определению Ж. Адамара корректно поставленной задачи Z, U – метрические пространства, $A: Z \rightarrow U$ – непрерывный оператор, тогда задача по нахождению z является корректно поставленной задачей, если выполняются все условия:

- 1) уравнение (11) разрешимо $\forall u \in U$;
- 2) решение единственно;
- 3) решение устойчиво.

Будем предполагать, что уравнение (11) разрешимо классическим образом, и будем выделять минимальное по норме пространства Z решение среди всех решений. Таким образом, определенное нормальное решение существует и единственно, и основной задачей будет задача нахождения решения задачи (с индексом 0):

$$A^0 z = u^0, \quad z \in Z, \quad u^0 \in U, \quad (12)$$

где Z, U – гильбертовы пространства, $A^0: Z \rightarrow U$ – линейный непрерывный оператор, $u^0 \in U$ – некоторый заданный элемент. Через z^0 обозначим нормальное решение уравнения (12). Оператор A^0 и правая часть u^0 соответственно точный оператор

и точная правая часть, однако они точно не известны, а известны только их приближения: линейный непрерывный оператор $A^h: Z \rightarrow U$ и правая часть $u^\delta \in U$ вместе с оценками их отклонения от A^0 и u^0 соответственно:

$$\begin{aligned} \|A^h - A^0\| &\equiv \sup_{\|z\|<1} \|(A^h - A^0)z\| = \\ &= \sup_{z \in Z} \frac{\|(A^h - A^0)z\|}{\|z\|} \leq h, \end{aligned} \quad (13.1)$$

$$\|u^\delta - u^0\| \leq \delta, \quad (13.2)$$

где $h \in (0, h_0)$, $\delta \in (0, \delta_0)$, h_0, δ_0 – некоторые фиксированные положительные числа.

Согласно теории оптимизации, если (11) разрешимо, то оно имеет единственное нормальное, т.е. минимальное по норме, решение. Это нормальное решение является решением задачи минимизации:

$$\|z\|^2 \rightarrow \min; \quad z \in \{y \in Z: Ay = u\}. \quad (14)$$

То есть задача по решению уравнения (3.2) эквивалентна задаче минимизации

$$\Phi(z) = \|A^0 z - u^0\|^2 \rightarrow \min; \quad z \in Z. \quad (15)$$

Часто множество точек минимума какой-либо заданной функции $f(z)$ на множестве D обозначают следующим образом:

$$\begin{aligned} \operatorname{argmin}_{z \in D} f(z) &\equiv \\ &\equiv \{z^* \in D: f(z^*) = \min_{z \in D} f(z)\}. \end{aligned} \quad (16)$$

Оказывается, однако, что возможно так возмутить задачу (12), заменив ее целым семейством зависящих от числового параметра (параметра регуляризации) $\alpha > 0$ задач минимизации, что, во-первых, решение каждой из задач этого семейства уже не будет обладать указанным эффектом неустойчивости, и, во-вторых, при стремлении параметра α к нулю эти решения будут сходиться в норме Z к решению z^0 исходной задачи (12). Другими словами, отказываясь от непосредственного решения задачи (12), можно получить приближенное ее решение с любой наперед заданной точностью. Данный метод называется методом регуляризации Тихонова, в котором показано, что решением задачи по нахождению z можно рассматривать задачу по минимизации функционала Тихонова:

$$\begin{aligned} M^\alpha(z) &\equiv \Phi(z) + \alpha \|z\|^2 \equiv \|A^h z - u^\delta\|^2 + \\ &+ \alpha \|z\|^2 \rightarrow \min; \quad z \in Z; \quad \alpha > 0, \end{aligned} \quad (17)$$

как и ранее, оператор A^h и элемент u^δ являются приближениями соответственно оператора A^0 и u^0 . Основным свойством этого функционала M^α

является то, что его минимальное значение на всем гильбертовом пространстве Z достигается при любой тройке $A^h; u^\delta; \eta$, причем в единственной точке z_η^α для которой справедлива оценка:

$$\|z_\eta^\alpha\| \leq \|u^\delta\|/\sqrt{\alpha}. \tag{18}$$

С помощью этого элемента происходит аппроксимация точного решения z^0 , и главной идеей является согласованное стремление к нулю ошибок заданного оператора h , правой части δ и параметра регуляризации α . Поэтому если при $\alpha(\eta) \rightarrow 0$ при $\eta \rightarrow 0$ выполняется условие согласования $(h^2 + \delta^2)/\alpha(\eta) \rightarrow 0$, то

$$\|z_\eta^\alpha - z^0\| \rightarrow 0, \quad \eta \rightarrow 0, \tag{19}$$

где z^0 – нормальное решение уравнения (12).

На основе всего вышесказанного можно определить регуляризирующий оператор:

$$R(A^h, u^\delta, \eta) \equiv z_\eta^\alpha. \tag{20}$$

Рассмотренный выше процесс регуляризации, когда в качестве пространства решений Z было взято пространство $L_2(a,b)$ (*априорная информация*), называется регуляризацией нулевого порядка, так как в нем не использовалась информация о производных точного решения.

Таким образом, алгоритм, позволяющий найти приближенное решение некорректно поставленных операторных задач вида $Az = u$, основан на применении функционала Тихонова и решении задачи по его минимизации (17).

4. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ТИХОНОВА ДЛЯ ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОЙ ПОРОМЕТРИИ

Легко заметить, что в случае задач эллипсометрической порометрии интегральные уравнения (5) и (10) представляют собой уравнения Фредгольма 1-ого рода. В настоящей работе предлагается использовать численный метод, следующий методологии Тихонова, сводящий решение задач (5) и (10), к операторной задаче:

$$u(x) = \int_a^b K(x,s)z(s)ds, \quad s \in [c;d]. \tag{21}$$

Под интегралом ядро и искомая функция. Вводится разбиение

$$c = x_1 < x_2 < \dots < x_m = d, \\ a = s_1 < s_2 < \dots < s_n = b,$$

где n и m могут быть любыми. Тогда несложно заменить интеграл суммой по методу трапеции.

$$\sum_{j=1}^m r_j K_{ij} z_j = u_i, \quad i = \overline{1,m}, \tag{22}$$

где r_j – расстояние между соседними точками в разбиении по оси абсцисс. Таким образом, интеграл заменяется СЛАУ относительно неизвестных функций. Оператор регуляризации A составляется из $a_{ij} = r_j K_{ij}$.

Сначала рассмотрим решение задачи (5) для мезопор $W(P) = \int_0^{+\infty} z(r)dr$. В данном случае ядро интегрального уравнения равно единице, но так как уравнение Фредгольма задано на прямоугольной конечной области, необходима замена пределов по оси x , соответствующей радиусу пор $x \in [0,d]$. Также при увеличении давления заполняются поры все большего размера, поэтому необходимо ограничить область, в которой поры заполнены (рис. 2а). Расчет ограниченной области происходит по уравнению Кельвина (3). Необходимо перейти к новому ядру:

$$K_2(r, P/P_0) = \begin{cases} 1, & x < r_0 \\ 0, & x > r_0 \end{cases}$$

где r_0 рассчитывается по формуле (3).

Тогда решение интегрального уравнения Фредгольма сводится к решению системы линейных уравнений:

$$\sum_{j=1}^n r_j K_{2ij} z_j = W(p_i) \quad \text{или} \quad A(r, P/P_0)z(r) = W(P/P_0).$$

Для шумоподавления и нахождения собственных значений предложено использовать метод сингулярного разложения SVD [8] и применить его к матрице $A: [A]_{mn} = [U]_{mm} \text{diag}([S]_{mn})_{ml} [V]_{nn}$. После чего решение минимизации функционала Тихонова имеет вид:

$$z_{reg} = \sum_{i=1}^n \frac{s_i^2}{s_i^2 - \alpha^2} \frac{u_i^T V}{s_i} W_i. \tag{23}$$

Для микропор уравнение Фредгольма, описывающее интегральное уравнение Дубинина, выглядит так:

$$W(P/P_0) = \int_0^{+\infty} z(B) \exp(-By) dB = \\ = \int_0^{+\infty} z(r) \exp(-mr^2 A^2) dr, \tag{24}$$

где $y = \left\{ \frac{T}{\beta} \lg(P_0/P) \right\}^2$; $A = RT \ln(P_0/P)$; $B = \frac{r^2}{k^2}$; $m = \frac{1}{(\beta k)^2}$;

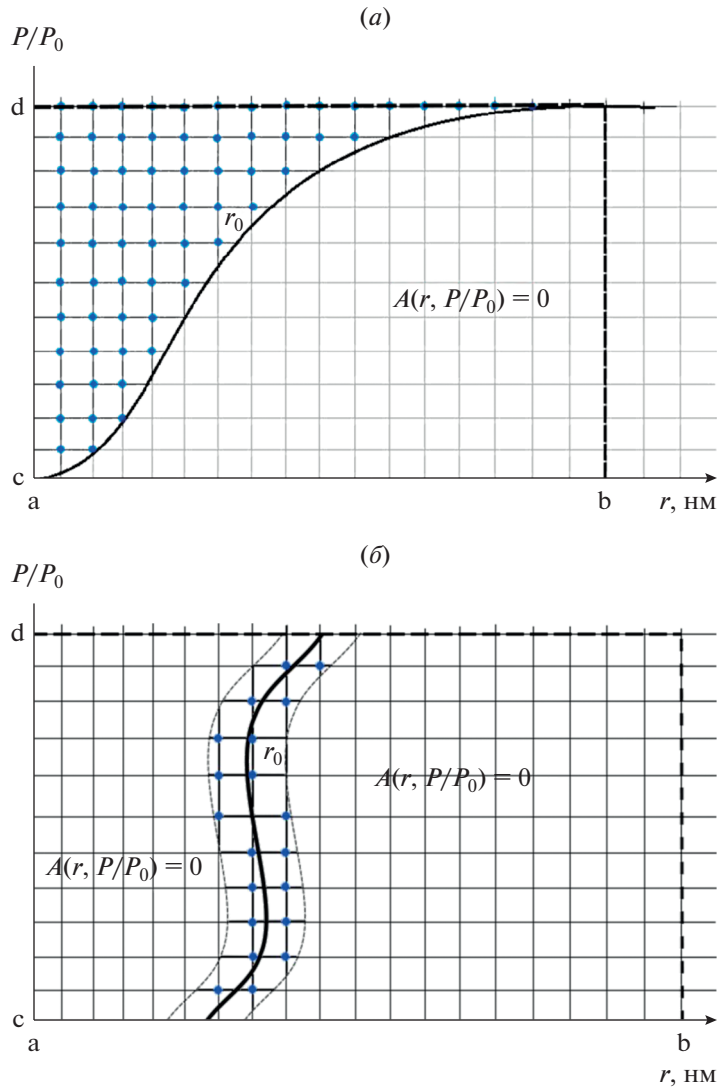


Рис. 2. Ограничение области матрицы регуляризации по (а) теоретическим данным, рассчитанным из уравнения Кельвина (3), и (б) экспериментальным данным из линейризации уравнения Дубинина (9).

$$\lg(P_0/P) = -0.4343 \ln(P/P_0).$$

Видно, что ядро интегрального уравнения имеет вид $K(r, P/P_0) = \exp(-mr^2 A(P/P_0)^2)$ в области

$$\Pi = \begin{cases} r \in [0, 2] \\ P/P_0 \in [0, 1] \end{cases}.$$

В данном случае, для решения этого интегрального уравнения делается переход к области, ограниченной по радиусу, согласно физическим соображениям, так как уравнение Дубинина применимо для пор радиусом до двух нанометров. Также необходимо учитывать алгоритм Дубинина для определения размера поры при заданном давлении. Суть состоит в том, что для каждого давления в эксперименте мы определяем радиус и максимальную пористость W_0 , по которой в дальней-

шем строим решение интегрального уравнения Дубинина методом регуляризации Тихонова. Оператор регуляризации рассчитывается по всем возможным наборам давлений и радиуса, и нам необходимо выбрать точки r_δ на сетке, лежащие вблизи от r_0 , которую мы получили из эксперимента по формуле (8) (рис. 2б). Поскольку метод применим в диапазоне давлений от 0 до 0.1, это также ограничивает область. Поэтому делается переход к новому интегральному ядру и области решения:

$$K_2(r, P/P_0) = \begin{cases} K(r, P/P_0), r_0 - r_\delta < r < r_0 + r_\delta \\ 0, r \notin \{r_0 - r_\delta, r_0 + r_\delta\}, \end{cases} \quad (25)$$

$$\Pi = \begin{cases} r \in [0, 2] \\ P/P_0 \in [0, 0.1] \end{cases}.$$

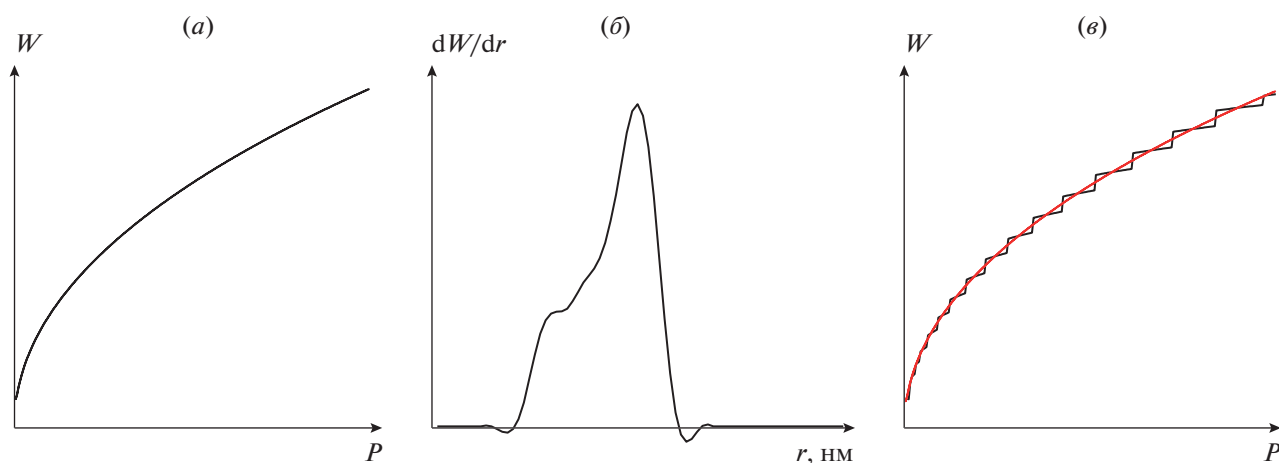


Рис. 3. (а) Функция распределения Вейбулла, (б) распределение пор по размерам, полученное в процессе обработки функции распределения, (в) восстановленная функция распределения.

Тогда аналогично предыдущей задаче решается следующая система линейных уравнений с применением сингулярного разложения, после чего решение минимизации функционала Тихонова имеет вид аналогичный формуле (23):

$$\sum_{j=1}^n r_j K_{2ij} z_j = W(p_i) \quad (26)$$

$$\text{или } A(r, P/P_0) z(r) = W(P/P_0).$$

Параметр регуляризации определяется нахождением минимума функции обобщенной перекрестной проверки GCV [25].

5. ВЕРИФИКАЦИЯ МЕТОДА

Для расчетов была выбрана среда разработки MATLAB, в которой была написана программа для решения задач (5) и (10) методом регуляризации Тихонова. Метод был верифицирован путем решения симулированных задач с известным решением. Для уравнения Кельвина были смоделированы задачи, в которых присутствовали различные особенности (бимодальность), чтобы доказать чувствительность метода к ним. Сперва по заданным параметрам строится плотность распределения суммой двух гауссов, имеющая смысл распределения пор по размерам. Из нее легко получить функцию распределения, имеющую смысл изотермы адсорбции, к которой необходимо добавить сгенерированный шум. Далее изотерма адсорбции прогоняется через алгоритм, основанный на решении некорректной задачи (5) методом регуляризации Тихонова, после чего полученные графики сравниваются со смоделированными.

При наложении рис. 6а на 6б и 6в наблюдается сходство смоделированного распределения пор по размерам и изотермы адсорбции (красная линия), с графиками, полученными путем решения некорректной задачи.

Верификация решения задачи (10) интегрального уравнения Дубинина является нетривиальной задачей, так как нет однозначного перехода от давления к радиусу, как при решении задачи (5). Для верификации рассматривалась прямая операторная задача (26). Сгенерированная функция распределения Вейбулла (рис. 3а), описывающая адсорбцию в микропорах, использовалась в качестве исходных данных. Для восстановления исходной функции распределения полученное распределение пор по размерам (рис. 3б) было подставлено в (26) (рис. 3в).

6. ИЗМЕРИТЕЛЬНАЯ УСТАНОВКА

Измерительный метод основан на изменении оптических параметров пористых пленок в процессе адсорбции в них адсорбата, что видно из формулы (2) Лоренца-Лоренца. В нашем случае, в роли адсорбата выступает изопропиловый спирт (C_3H_8O), а измерение изменения оптических параметров осуществляется с помощью эллипсометра M-2000X от J.A.Woollam Co.

Система подачи паров адсорбата показана на рис. 4 и включает два регулятора расхода газа (mass flow controller – MFC) с расходом 200 ст. см³/мин, которые управляются с помощью модуля ЦАП/АЦП L-card E14-440. Через один из них подается сухой азот, а через второй – насыщенные пары изопропилового спирта. Соотношение их потоков определяет относительное давление адсорбата над образцом. Вследствие особенностей устройства данного MFC, при

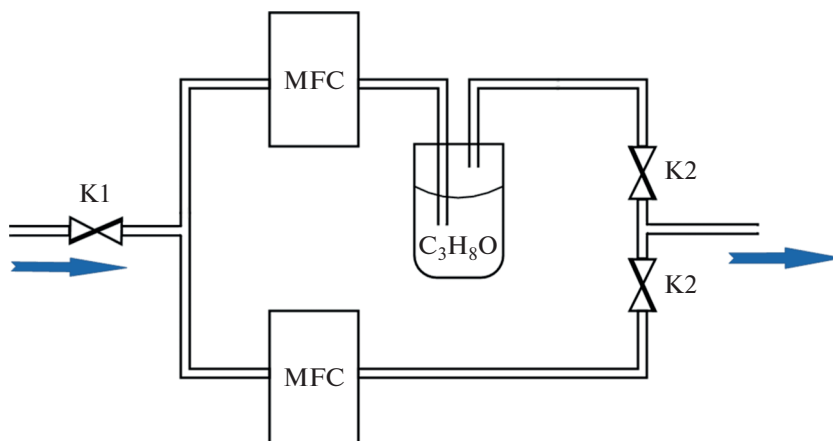


Рис. 4. Схема подачи газа сухого азота с парами изопропилового спирта на образец. K1, K2 – система ручных кранов для перекрытия подачи газа.

относительном потоке ниже 1.5% их показания ненадежны, поэтому в дальнейшем рассматривается диапазон давлений составляющий [1.5%; 100%] от давления насыщенных паров. Система кранов K1–K2 предотвращает резкий скачок давлений в резервуаре с жидким изопропиловым спиртом.

Временной интервал между установлением требуемых газовых потоков и началом процедуры эллипсометрического измерения должен превышать время установления равновесного заполнения пленки адсорбатом, которое составляет 5 с, как было установлено экспериментально. Мелкость шага по давлению адсорбата должна быть достаточно мала, чтобы не потерять особенности распределения при решении обратной задачи (9).

При анализе образца главный интерес представляют процессы заполнения пор адсорбатом (адсорбция) и последующего удаления его из пор (десорбция). Измеряя зависимость заполненности пор (W) от давления (P), можно получить изотермы адсорбции и десорбции, предварительный анализ которых позволяет установить к какому типу по классификации Брунауэра они принадлежат и какой тип пористости преобладает в образце. Далее, решая задачи (5) или (10) для полученной изотермы, может быть найдено распределение пор по размерам и средний радиус.

7. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ВЕТ

При наличии газообразного адсорбата с давлением P в атмосфере над поверхностью гладкого образца образуется слой адсорбата толщиной $t(P)$, которая определяется уравнением ВЕТ (4). Оценка зависимости толщины этого слоя от давления требуется для проведения корректных измерений методом порометрии. В настоящей работе эксперимент по определению параметров ВЕТ был прове-

ден при варьировании давления адсорбата над поверхностью оксида кремния. Толщина адсорбированного слоя измерялась эллипсометрически (рис. 5). Нелинейная подгонка экспериментальных данных позволяет определить параметры уравнения (4). Также можно определить толщину первого монослоя t_0 , значение которого лежит в начале линейного участка изотермы и равно 0.28 нм.

Для определения параметра C необходимо построить линейную форму изотермы адсорбции. При коэффициенте $K = 0.5$ для данного образца диапазон применимости уравнения ВЕТ лежит от $0.05P_0$ до $0.9P_0$. Расхождения при больших давлениях не играют роли, поскольку рабочий диапа-

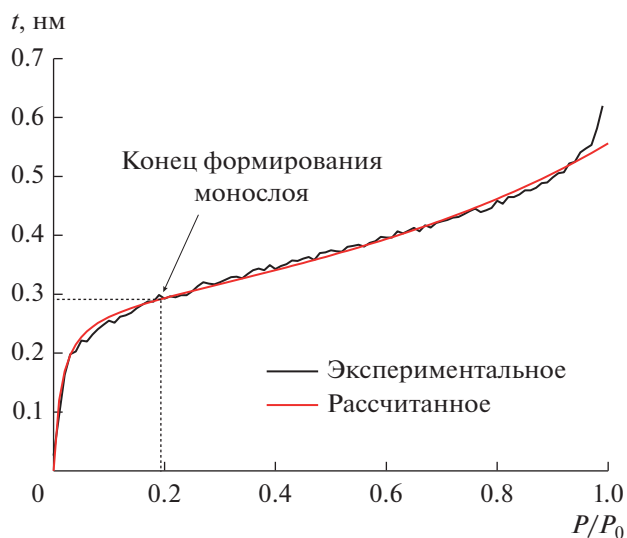


Рис. 5. Экспериментальная и рассчитанная зависимости толщины адсорбированного слоя на поверхности непористого образца по полученным коэффициентам ВЕТ.

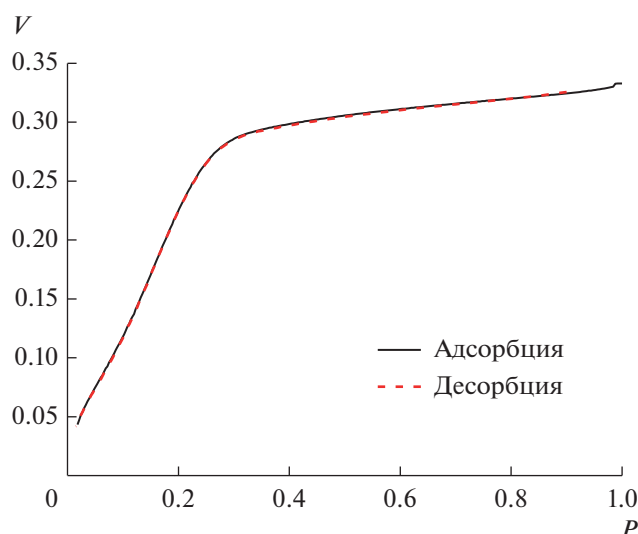


Рис. 6. Изотермы адсорбции и десорбции для исследованного образца, подвергнутого криогенному травлению при различных температурах.

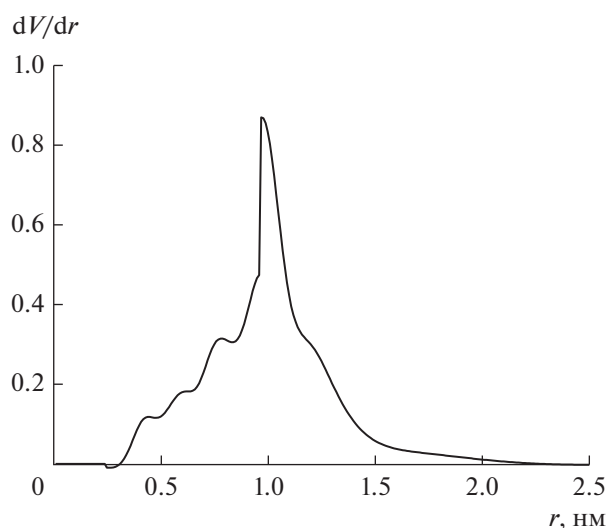


Рис. 7. Распределения пор по размерам, полученное из изотермы адсорбции для экспериментального образца.

зон давлений лежит ниже давления насыщенных паров. Также было оценено значение коэффициента $C = 148$. Качество подгонки показано на рис. 5.

8. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для определения распределения пор по размерам предложенным методом использовались промышленные образцы low-k диэлектрика с исходной толщиной 202 нм и диэлектрической проницаемостью 2.3 на основе органосиликатного стекла. Перед измерением образцы пленок отжигались 30 мин при температуре 400°C для удаления адсорбированной атмосферной влаги. Полученные в цикле адсорбция-десорбция изотермы адсорбции и десорбции представлены на рис. 6.

По виду изотермы можно сказать, что при относительном давлении меньше $P/P_0 < 0.1$ происходит резкий рост адсорбции, что может говорить

о наличии в образце некоторого количества микропор. Также при $P/P_0 = 0.13$ видны изменения наклона изотермы адсорбции, что может говорить о наличии мезопор в образце. Обратная задача для микропор и мезопор была решена по алгоритму, представленному в предыдущих разделах, что позволило получить распределение пор по размерам (рис. 7).

Для определения статистических характеристик этих распределений были найдены также моменты распределений: первый начальный момент, (средний радиус пор \bar{x}), второй центральный момент, или же дисперсия D , по которому можно рассчитать среднеквадратичное отклонение σ , третий центральный момент, из которого получается коэффициент асимметрии S , и четвертый, показывающий коэффициент эксцесса ϵ [27]. Результаты помещены в табл. 1.

Таблица 1. Характеристики распределения пор по размерам для набора образцов полученной решением интегрального уравнения Дубинина

	\bar{x} , нм	σ , нм	S	ϵ	Открытая пористость, %	
Микропоры	0.78	0.71	1.08	-2.99	33.3	
Мезопоры	Адсорбция	1.09	0.98	1.39		-2.69
	Десорбция	0.79	0.75	1.74		-1.95
Суммарное распределение	1.01	0.9	1.74	0.71		

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложено применить для решения задачи эллипсометрической порометрии метода регуляризации Тихонова. Целесообразность применения метода регуляризации объясняется тем, что задача эллипсометрической порометрии является некорректно поставленной, и для получения ее устойчивого решения требуется использование априорной информации. В данном случае это информация о гладкости функции распределения по размерам, следующая из общих соображений. Предложенный метод включает отдельные подходы для микро- и мезопор, а также учет поверхностной адсорбции (теория ВЕТ). Для определения ВЕТ параметров были проведены эллипсометрические измерения толщины адсорбированного слоя на оксиде кремния. Методика определения распределения пор по размерам с использованием метода регуляризации Тихонова была верифицирована на модельных распределениях. В работе был исследован промышленный образец low-k диэлектрика с исходной толщиной 202 нм и диэлектрической проницаемостью 2.3 на основе органосиликатного стекла. Получены распределения пор по размерам и их статистические характеристики. Показано, что необходимо применение комбинированного подхода, учитывающего наличие микропор и мезопор в структуре образца.

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФТИАН им. К.А. Валиева РАН Минобрнауки РФ по теме № FFNN-2022-0019, частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований № 18-29-27025 МК.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rasadujman M., Wang Y., Zhang L. et al.* A detailed ellipsometric porosimetry and Positron Annihilation Spectroscopy study of porous organosilicate-glass films with various ratios of methyl terminal and ethylene bridging groups // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2020. V. 306. P. 110434.
2. *Kittel Ч.* Введение в физику твердого тела. 1978. [*Kittel Ch.* Introduction to Solid State Physics. 1978.]
3. *Zahedmanesh H., Besser P.R., Wilson C.J., Croes K.* Air-gaps in nano-interconnects: Mechanics and impact on electromigration // *Journal of Applied Physics*. 2016. V. 120(9). P. 095103.
4. *Tompkins H.G.* A user's guide to ellipsometry // New York: Academic Press. 1993. ISBN 0-12-603050-0.
5. *Rouessac V., Lee A., Bosc F., Durand J., Ayrat A.* Three characterization techniques coupled with adsorption for studying the nanoporosity of supported films and membranes. // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2008. V. 111(1–3). P. 417–428.
6. *Tao Li, Andrew J.S., Lee B.* Small Angle X-ray Scattering for Nanoparticle Research // *Chemical Reviews*. 2016. V. 116(18). P. 11128–11180.
7. *Gidley D.W., Peng H.-G., Vallery R.S.* Positron annihilation as a method to characterize porous materials // *Annu. Rev. Mater. Res.* 2006. V. 36(1). P. 49–79.
8. *Мяконьких А.В., Смирнова Е.А., Клементе И.Э.* Применение метода спектральной эллипсометрии для исследования процессов атомно-слоевого осаждения // *Микроэлектроника*. 2021. Т. 50. № 4. С. 264–273. [*Miakonkikh A.V., Smirnova E.A., Clemente I.E.* Application of the spectral ellipsometry method to study the processes of atomic layer deposition // *Russian Microelectronics*. 2021. V. 50(4). P. 230–238.]
9. *Dedkova A.A., Nikiforov M.O., Mitko S.V., Kireev V.Yu.* Investigation of Gallium Nitride Island Films on Sapphire Substrates via Scanning Electron Microscopy and Spectral Ellipsometry // *Nanotechnol Russia*. 2019. V. 14(3–4). P. 176–183.
10. *Орликовский А.А., Руденко К.В.* Диагностика *in situ* плазменных технологических процессов микроэлектроники: современное состояние и ближайшие перспективы. Часть III. // *Микроэлектроника*. 2001. Т. 30. № 5. С. 323–344. [*Orlikovskii A.A., Rudenko K.V.* *In situ* Diagnostics of Plasma Processes in Microelectronics: The Current Status and Immediate Prospect, Part III // *Russian Microelectronics*. 2001. V. 30. P. 275–294.]
11. *Lorenz L.* Experimentale og theoretiske undersøgelser over Legemernes Brydningsforhold // *Vidensk. Selsk. Skr.* 1869. V. 8. P. 203.
12. *Brunauer S., Deming L.S., Deming W.E., Teller E.* On a Theory of the van der Waals Adsorption of Gases // *Journal of the American Chemical Society*. 1940. V. 62(7). P. 1723–1732.
13. *De Boer J.H.* Structure and properties of porous materials // London. Butterworths. 1958. P. 68.
14. *Thomson W.T.* On the equilibrium of vapour at a curved surface of liquid // *Phyl. Mag.* 1871. V. 42. P. 448–452.
15. *Brunauer S., Emmett P.H., Teller E.* Adsorption of Gases in Multimolecular Layers // *J. Am. Chem. Soc.* 1938. V. 60. P. 309–319.
16. *Brunauer S., Skalny J., Bodor E.E.* Adsorption on Nonporous Solids // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1969. V. 30. P. 546–552.
17. *Dubin M.M.* The Potential Theory of Adsorption of Gases and Vapors for Adsorbents with Energetically Nonuniform Surfaces // *Chem. Rev.* 1960. V. 60. P. 235–241.
18. *Dubin M.M., Zaverina E.D.* // *Zhur. Fiz. Khim.* 1949. V. 23. P. 1129.
19. *Everett D.H., John C.P.* Adsorption in slit-like and cylindrical micropores in the Henry's law region. A model for the microporosity of carbons // *J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1*. 1976. V. 72. P. 619–636.
20. *Dubin M.M., Stoeckli H.F.* Homogeneous and Heterogeneous Micropore Structures // *J. Colloid Interface Sci.* 1980. V. 75(1). P. 34–42.
21. *Plavnik G.M., Dubin M.M.* Investigation of the porous structure of activated charcoals from sucrose by method of

- adsorption and small-angle scattering of x-rays // Russ. Chem. Bull. 1966. V. 15. P. 597–605.
22. *Dubin M.M.* Inhomogeneous microporous structures of carbonaceous adsorbents // Carbon. 1981. V. 19(4). P. 321–324.
 23. *Tikhonov A.N., Arsenin V.Y.* Solution of Ill-posed Problems. Washington: Winston & Sons, 1977.
 24. *Golub G., Kahan W.* Calculating the Singular Values and Pseudo-Inverse of a Matrix // Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics Series B Numerical Analysis. 1965. V. 2(2). P. 205–224.
 25. *Bottegal G., Pillonetto G.* The generalized cross validation filter // Automatica. 2018. V. 90. P. 130–137.
 26. *Liu C., Qi Q., Seregin D.S., Vishnevskiy A.S. et al.* Effect of terminal methyl groups concentration on properties of organosilicate glass low dielectric constant films // Jpn. J. Appl. Phys. 2018. V. 57(7S2). P. 07MC01.
 27. *Чебышев П.Л.* Полное собрание сочинений П.Л. Чебышева // Изд-во АН СССР. 1944–1951. [*Chebyshev P.L.* The complete works of P.L. Chebyshev // Publishing House of the USSR Academy of Sciences. 1944–1951.]

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ ПРИ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОВ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ, К РАСШИФРОВКЕ СИГНАЛОВ ИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

© 2022 г. В. П. Афанасьев^а, *, Л. Г. Лобанова^а, **

^аНациональный исследовательский университет “МЭИ”,
Красноказарменная ул., 14, Москва, 111250 Россия

*E-mail: v.af@mail.ru

**E-mail: lida.lobanova.2017@mail.ru

Поступила в редакцию 14.02.2022 г.

После доработки 07.03.2022 г.

Принята к публикации 09.03.2022 г.

Построена аналитическая модель описания энергетических спектров легких ионов средних энергий, отраженных от поверхности твердого тела, или MEIS – Medium Energy Ions Spectra. В основе методики использован ОКГ (Oswald-Kasper-Gaukler) метод, надежно апробированный и широко используемый в электронной спектроскопии. Развита методика интерпретации MEIS спектров ионов, отраженных от слоисто неоднородных образцов. В настоящей работе показано, что интерпретация MEIS данных на основе использования имеющихся в литературе данных по средним потерям энергии на единицу длины – stopping power, может привести к столь значительным погрешностям, что не позволит говорить о MEIS как о количественной методике. Указывается, что развитый в настоящей работе подход позволяет успешно апробировать данные по stopping power.

Ключевые слова: спектроскопия ионов средних энергий, метод инвариантного погружения, малоугловое приближение, аналитическое описание спектров, энергетические спектры отраженных электронов, слоисто неоднородные мишени, средние потери энергии легких ионов на единицу длины (stopping power)

DOI: 10.31857/S0544126922040032

1. ВВЕДЕНИЕ

Спектроскопия, основанная на зондировании образцов легкими ионами (протонами и ионами гелия), например, ISS (Ion Scattering Spectroscopy), RBS (Rutherford Bask Scattering), ERD (Elastic Recoil Detection), находит широкое применение для исследования мишеней сложного состава [1–6]. В основе теорий, наиболее просто описывающих процессы упругого рассеяния ионов, лежит SLA приближение (Straight Line Approximation). В этом подходе рассматривается одно сильное обратное упругое рассеяние [3, 4], позволяющее с приемлемой точностью интерпретировать RBS спектры мэВных ионов. Однако, это приближение не способно с адекватной точностью описать особенности в спектрах RBS и ERD, возникающие при снижении энергии зондирующих ионов, что необходимо для определения послыонных профилей с более высоким энергетическим разрешением. Для описания этих особенностей предпринимаются попытки включить в рассмотрение процессы двукратного упругого рассеяния, однако, вопрос о том, повышаем ли мы точность описания процесса, ограничива-

ясь двукратным приближением, не обсуждается. Еще больше трудностей возникает при использовании SLA приближения для интерпретации спектров ISS, что связано с тем, что энергия зондирующих ионов составляет единицы кэВ.

Аналитическое описание дифференциальных по углам и энергии спектров отраженных ионов традиционно строится на основе малоуглового приближения, которое базируется на “сильной вытянутости” дифференциального сечения упругого рассеяния $\omega_{el}(\psi)$:

$$\omega_{el}(0) \gg \omega_{el}(\pi). \quad (1)$$

Как показано в [7, 8], условие (1) позволяет на основе решения граничной задачи для уравнения переноса методом инвариантного погружения Амбарцумяна получить решение, которое принято называть ОКГ методом [9]. ОКГ метод успешно использовался исключительно для решения задач по определению угловых и энергетических характеристик отраженных электронов [7, 8, 10].

Однако, условие (1) выполняется для ионов в более широком интервале энергий, чем для электро-

нов, что означает высокую эффективность ОКГ метода в спектроскопии легких ионов.

Представленная в работе методика описывает спектры однородных и многослойных мишеней на основе аналитического подхода, основанного на решении граничной задачи для уравнения переноса методом инвариантного погружения Амбарцумяна. Решение определяется параметрами сечения упругого рассеяния, на основе которого вычисляется PLDF (Pass Length Distribution Function), и энергетическими характеристиками, такими как, величина средних потерь энергии на единицу длину (stopping power), верификация которой подробно

обсуждается в работе, и параметры, определяющие процесс перезарядки ионов. Энергетические спектры отраженных протонов, вычисленные на основе представленной методики, сравниваются с экспериментальными данными.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Рассмотрим задачу упругого рассеяния электронов и легких ионов в твердых телах. Решение граничной задачи для уравнения переноса методом инвариантного погружения в азимутально симметричной ситуации приводит к формуле:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{|\mu|}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) S(\tau, \mu_0, \mu) = x(\mu_0, \mu) + \int_{-1}^0 x(\mu_0, \mu') S(\tau, \mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} + \\ + \int_0^1 S(\tau, \mu_0, \mu') x(\mu', \mu) \frac{d\mu'}{\mu'} + \int_0^1 \int_{-1}^0 S(\tau, \mu_0, \mu'') x(\mu'', \mu') S(\tau, \mu', \mu) \frac{d\mu''}{\mu''} \frac{d\mu'}{\mu'}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $S(\tau, \mu_0, \mu)$ — функция отражения, определяемая геометрией рассеяния; μ_0, μ — косинусы углов визирования и зондирования; и безразмерной длиной пробега частицы в мишени $\tau = \frac{z}{l_{el}}$; l_{el} — средняя длина свободного пробега между упругими соударениями. $x(\mu_0, \mu)$ — нормированное на единицу дифференциальное сечение упругого рассеяния.

Функция $S(\tau, \mu_0, \mu)$ описывает распределение отраженных частиц по длинам пробега в мишени — PLDF.

В [7, 8] показано, что условие (1) позволяет упростить уравнение (2) и записать его в виде:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{|\mu|}\right) \left(1 + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) S(\tau, \mu_0, \mu) = x(\mu_0, \mu) + \\ + \left(\frac{1}{\mu_0} + \frac{1}{|\mu|}\right) \int_0^1 S(\tau, \mu_0, \mu') x(\mu', \mu) d\mu'. \end{aligned} \quad (3)$$

В [7, 8] отмечено, что переход от (2) к (3) приводит к погрешностям, величина которых определяется степенью вытянутости дифференциального сечения упругого рассеяния $x(\mu)$, а именно, малостью отношения:

$$\zeta = \frac{x(1)}{x(-1)} \ll 1. \quad (4)$$

В случае консервативного рассеяния (когда исключается канал неупругого рассеяния) можно получить аналитическое решение уравнения (3). Процедура этого решения и обоснование сделанных допущений на основе сравнения результатов с

результатами точного численного решения уравнения (2) представлены в [8]. Полученное решение одинаково в случае электронного рассеяния и в случае рассеяния легких ионов. Однако, в случае рассеяния легких ионов, сделанные для получения аналитического решения допущения применимы в более широком интервале энергий, т.к. параметр экранирования процесса элементарного рассеяния легких ионов на порядки меньше электронного — $\zeta_{ion} \ll \zeta_{electron}$.

Получим решение уравнения (3) в SLA приближении. В подынтегральном выражении правой части уравнения (3) находится произведение функции $x(\mu', \mu)$, имеющий резкий максимум при $\mu' = \mu$, на функцию $S(\tau, \mu_0, \mu')$, плавно зависящую от μ' . Для вычисления интеграла в уравнении (3) разложим функцию отражения $S(\tau, \mu_0, \mu')$ в ряд Тейлора вблизи $\mu' = \mu$:

$$\begin{aligned} S(\tau, \mu_0, \mu') \approx S(\tau, \mu_0, \mu) + \\ + \left[\frac{\partial S}{\partial \mu}\right] (\mu - \mu') + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 S}{\partial \mu^2}\right] (\mu - \mu')^2. \end{aligned} \quad (5)$$

Подставляя разложение (5) в подынтегральное выражение уравнения (3) и ограничиваясь только первым членом разложения в ряд Тейлора, получаем:

$$\left(\alpha(\mu) + \frac{\partial}{\partial \tau}\right) S(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} x(\mu_0, \mu), \quad (6)$$

где $\alpha(\mu) = \int_0^1 x(\mu', \mu) d\mu' \ll 1$. Например, в случае Резерфордского рассеяния — $\alpha(\mu) \sim \eta$, где η —

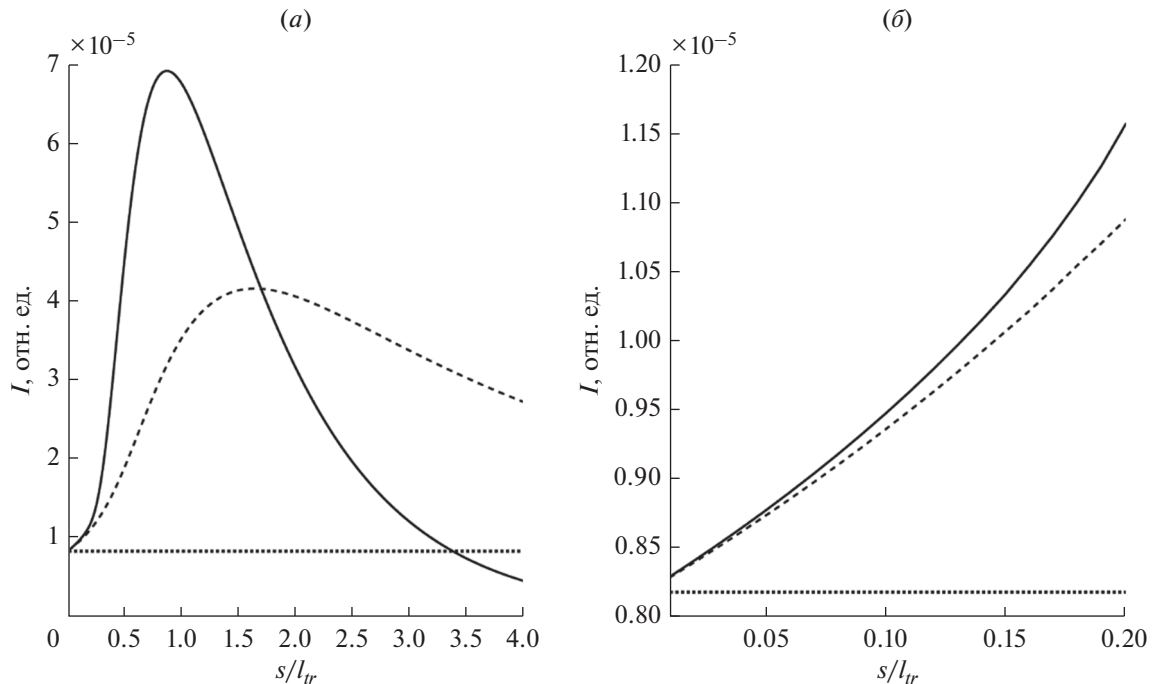


Рис. 1. Распределение отраженных протонов по длине пробега в титановой мишени (PLDF). Геометрия: падение по нормали, отражение на 135°. Начальная энергия протонов 20 кэВ. Пунктирная линия – расчет на основе SLA приближения (формула (7)), сплошная линия – расчет на основе диффузионного приближения (формула (9)), штриховая линия – расчет на основе ОКГ метода (формула (11)). Рисунок (б) – увеличенный масштаб для пробегов, меньших 0.2 транспортного пробега.

параметр экранирования, равный квадрату отношения длины волны де Бройля налетающей частицы к радиусу Дебая среды, в которой движется частица. Решение уравнения (6) в SLA приближении:

$$S(\tau, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} x(\mu_0, \mu) \exp(-\alpha(\mu) \tau). \quad (7)$$

Поскольку в уравнении (7) $\alpha(\mu) \ll 1$, то экспоненту в решении в SLA приближении не пишут.

Если в уравнение (3) подставить все выписанные члены ряда Тейлора (5), то перейдем к уравнению:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} S(\tau, \mu_0, \mu) &= \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} x(\mu_0, \mu) + \\ &+ \frac{\sigma_{tr}}{2} \Delta_\mu S(\tau, \mu_0, \mu), \end{aligned} \quad (8)$$

где $\Delta_\mu = \frac{\partial}{\partial \mu} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \mu}$ – полярная часть оператора Лапласа в сферических координатах, σ_{tr} – нормированное транспортное сечение.

Подробный вывод перехода от уравнения (3) к уравнению (8) после подстановки уравнения (5) в уравнение (3) представлен в [11].

Решение уравнения (8) находим, представив функцию $S(\tau, \mu_0, \mu)$ в виде разложения по полиномам Лежандра:

$$\begin{aligned} S(\tau, \mu_0, \mu) &= \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \times \\ &\times \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \rightarrow \mu) x^l \exp\left(-\frac{l(l+1)}{2} \tau_{tr}\right), \end{aligned} \quad (9)$$

где τ_{tr} – измеренный в транспортных длинах пробег частицы, x^l – коэффициенты разложения нормированного дифференциального сечения упругого рассеяния $x(\mu)$ в ряд по полиномам Лежандра.

При стремящемся к нулю пробеге частицы $\tau \rightarrow 0$ решения (7) и (9) совпадают. Допущения, в рамках которых получено решение (9), называется малоугловым диффузионным приближением [11]. На рис. 1 представлены решения (7) и (9), описывающие распределение по пробегам отраженных от титановой мишени протонов.

Графики на рис. 1 представляют решение чисто упругой задачи. Для электронов и легких ионов ре-

шение было получено на основе одинаковых исходных уравнений (3). Очевидно, что SLA приближение не способно адекватно описать процесс формирования потока отраженных протонов. Дело в том, что в SLA приближении не учитывается процесс изотропизации нисходящего потока частиц, который позволяет изменять нисходящее движение на восходящее при рассеянии частиц на углы, меньшие, чем угол между направлением зондирующего потока частиц и направлением на энергоанализатор. Расчет на основе диффузионного приближения на рис. 1 показывает, что многократное упругое рассеяние в нисходящем и восходящем потоках, которое исключает SLA приближение, приводит к резкому росту числа отраженных протонов. Процесс многократного упругого рассеяния в восходящем и нисходящем потоках частиц кардинально меняет число отраженных протонов с пробегом, меньшим и составляющим величину порядка транспортного пробега в мишени.

Еще раз отметим, что PLDF, представленные на рис. 1 сплошной и штрихпунктирной линией, это результат учета многократного упругого рассеяния. Подчеркнем, что модели двукратного, трехкратного и т.д. упругого рассеяния не имеют смысла. Рис. 1 указывает на то, что SLA приближение справедливо только в том случае, если транспортный пробег $l_{tr} = \frac{1}{\sigma_{tr}n}$, где n – концентрация частиц в мишени, будет намного больше остаточного пробега (Residual Range):

$$R_0(E_0) = \frac{E_0}{\bar{\epsilon}}, \quad (10)$$

где E_0 – начальная энергия зондирующего пучка частиц, $\bar{\epsilon}$ – средние потери энергии частиц на единицы длины (stopping power).

Решение уравнения (3) методом, описанным в [7, 9], имеет вид:

$$S(\tau_{tr}, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{1}{\tau_{tr}} \times \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu_0 \mu + \sqrt{1-\mu_0^2} \sqrt{1-\mu^2}) \times (\exp(-(1-x^l)\tau_{tr}) - \exp(-\tau_{tr})). \quad (11)$$

Решение (3) подробно апробировано в [7, 8, 10]. В [10] показано удовлетворительное соответствие результатов, полученных на основе формулы (11), результатам моделирования методом Монте-Карло (МК). В [7] показано хорошее соответствие расчетов, выполненных на основе формулы (11), точному численному решению уравнения (2).

Для описания ионного рассеяния дифференциальные сечения упругого рассеяния $x(\mu)$ определялись в первом Борновском приближении на основе потенциала криптон-углерод (Кг-С) [1–3].

Транспортные сечения определялись в соответствии с [12]. Описание PLDF протонов, отраженных от титановой мишени, рассчитанное по ОКГ методу на основе формулы (11), представлено на рис. 1 сплошной линией.

Из рис. 1 видно лишь качественное соответствие PLDF, вычисленного в диффузионном приближении, результатам, полученным по ОКГ методу. Связано это с тем, что при расчете в диффузионном приближении учитываются лишь три первых слагаемых в разложении в ряд Тейлора (5). Диффузионное приближение позволяет объяснить такую особенность RBS спектра, как Low Energy Tail [6], которая наблюдается при снижении энергии пучка зондирующих ионов до энергии в сотни кэВ. Снижение энергии пучка зондирующих ионов в RBS методе необходимо для повышения энергетического и, как следствие, пространственного разрешения метода [6].

Энергетические спектры отраженных частиц определяются в соответствии с формулой:

$$S(\Delta, \mu_0, \mu) = \int_0^{\infty} dz S\left(\frac{z}{l_{el}}, \mu_0, \mu\right) T\left(\frac{z}{l_{in}}, \Delta\right), \quad (12)$$

где $T(\tau, \Delta)$ – в случае ионного рассеяния определяется лишь двумя моментами сечения неупругого рассеяния: $\bar{\epsilon}$ – средние потери энергии частицы на единице длины, $\bar{\epsilon}^2$ – средний квадрат потерь энергии частицы на единице длины или страгглинг. Это следует из законов сохранения энергии и импульса, ограничивающих максимум энергии, которую ион может передать электронной подсистеме.

Функция $T(\tau, \Delta)$ имеет следующий вид:

$$T(z, \Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{\Sigma}}} \exp\left(-\frac{(\Delta - \bar{\epsilon}z)^2}{2\sigma_{\Sigma}^2}\right), \quad (13)$$

где $\sigma_{\Sigma} = \bar{\epsilon}^2 s + \sigma_{Dop} + \sigma_{beam} + \sigma_{enan}$ – суммарный уширяющий фактор, который есть сумма страгглинга – $\bar{\epsilon}^2 s$; уширения за счет эффекта Доплера – σ_{Dop} ; уширения, возникающего за счет энергетического разброса в зондирующем пучке – σ_{beam} ; аппаратной функции энергоанализатора – σ_{enan} .

Подставив PLDF (11) в формулу для расчета энергетических спектров (12), получим выражение для расчета энергетических спектров отраженных частиц в приближении непрерывного замедления или, когда $T(z, \Delta) = \delta(\Delta - \bar{\epsilon}z)$:

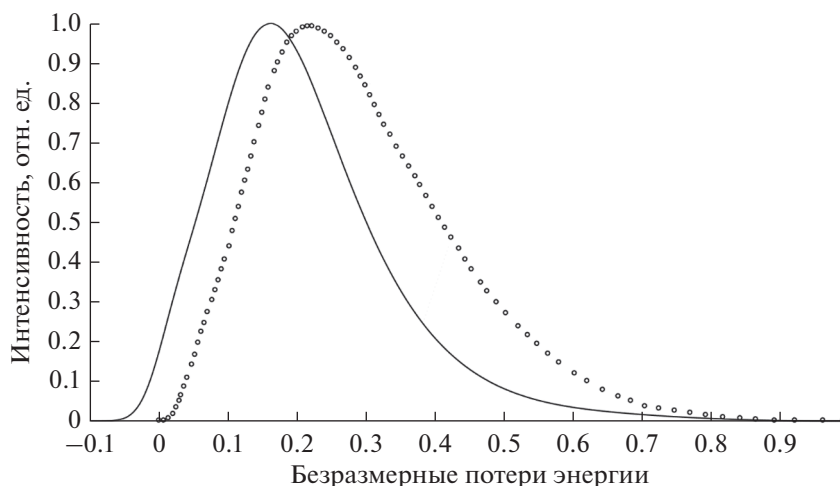


Рис. 2. Энергетические спектры протонов, отраженных от вольфрама. Геометрия: угол зондирования 71°, угол визирования 109°. Начальная энергия протонов 25 кэВ. Сплошная линия – расчет на основе формул (13) и (14), кружки – эксперимент [14].

$$S(\Delta, \mu_0, \mu) = \frac{\mu_0 |\mu|}{\mu_0 + |\mu|} \frac{(1 - x_1)(1 - \Delta) \exp\left(-\frac{A}{\sqrt{1 - \Delta}}\right)}{\Delta \bar{\epsilon}} \times \sum_l \frac{2l + 1}{2} P_l\left(\mu_0 \mu + \sqrt{1 - \mu_0^2} \sqrt{1 - \mu^2}\right) \times \left[\exp\left(-\frac{\Delta(1 - x_1) \sigma^*}{(1 - x_1)(1 - \Delta)^{5/2}}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta \sigma^*}{(1 - x_1)(1 - \Delta)^{5/2}}\right) \right]. \tag{14}$$

В формуле (14) безразмерный параметр σ^* является определяющим для аналитического описания процесса формирования энергетических спектров отраженных ионов:

$$\sigma^* = \frac{E_0}{l_r \bar{\epsilon}}, \tag{15}$$

где $\frac{E_0}{\bar{\epsilon}}$ – длина пробега иона до полной его остановки или, как было отмечено выше, residual range.

Для протонов, имеющих начальную энергию в интервале $-1 \text{ кэВ} < E_0 < 30 \text{ кэВ}$, параметр $\sigma^* \sim 1$.

Множители вида $(1 - \Delta)$ и $(1 - \Delta)^{5/2}$ учитывают зависимость сечения упругого рассеяния и сечения неупругого рассеяния от энергии.

Функция $\exp\left(-\frac{A}{\sqrt{1 - \Delta}}\right)$ в формуле (14) введена для учета явления перезарядки отраженных ионов [1–5]. Безразмерная константа A , определяющая эффективность процесса нейтрализации ионов при отрыве от поверхности образца, считается подгоночным параметром.

Для того чтобы получить окончательный вид энергетического спектра отраженных ионов не-

обходимо провести свертку формулы (14) с формулой (13).

3. АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОТРАЖЕНИЯ ОТ ОДНОРОДНЫХ МИШЕНЕЙ

Энергетические спектры отраженных протонов, представленные в [1–4], в настоящей работе были проинтерпретированы на основе расчетных спектров, вычисленных по формулам (12)–(14). При расчете использовались данные по stopping power, взятые из таблиц NIST (National Institute of Standard Technology) [13]. Из полученных результатов сравнения можно заключить, что нами достигнуто полное качественное соответствие, а именно одинаковое поведение расчетных и экспериментальных спектров в зависимости от атомного номера мишени и энергии зондирующего пучка. Причины количественного различия связаны в основном с погрешностью, с которой известны данные по stopping power протонов. Наибольший разброс данных по stopping power приходится на энергии зондирующего пучка протонов, рассматриваемые в настоящей работе.

Представленное на рис. 2 сравнение расчетных (формулы (13) и (14)) и экспериментальных [14] данных по вольфраму указывает на удовлетвори-

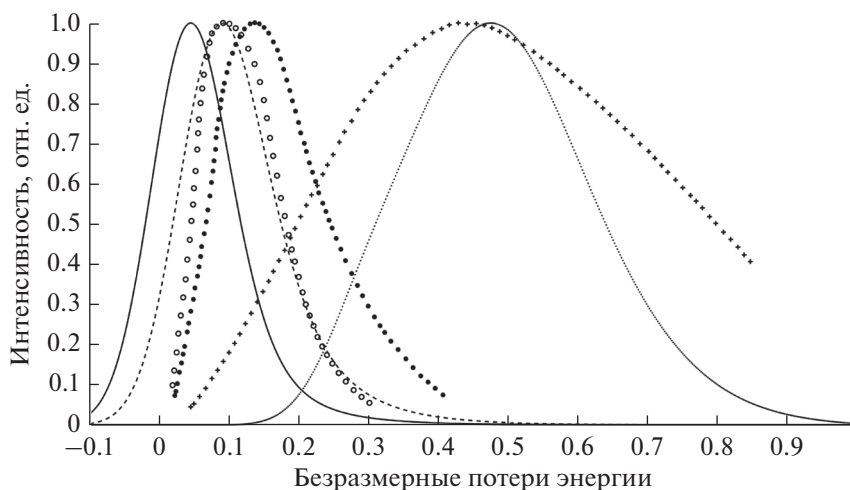


Рис. 3. Энергетические спектры протонов, отраженных от бериллия, никеля и золота. Геометрия: угол зондирования 83° , угол визирования 95° . Начальная энергия протонов 10 кэВ. Расчет на основе формул (13) и (14): бериллий – пунктирная линия, никель – штриховая линия, золото – сплошная линия. Эксперимент [15]: бериллий – плюсики, никель – темные кружки, золото – светлые кружки.

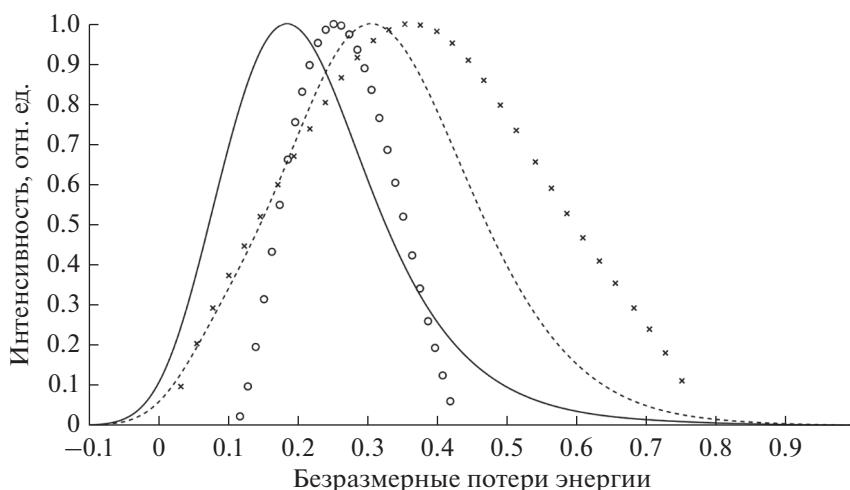


Рис. 4. Энергетические спектры протонов, отраженных от меди. Геометрия: угол зондирования 80° , угол визирования 110° . Расчет на основе формул (13) и (14): 10.1 кэВ – сплошная линия, 33.2 кэВ – штриховая линия. Эксперимент [16]: 10.1 кэВ – кружки, 33.2 кэВ – крестики.

тельное соответствие развитой в настоящей работе методики экспериментальным результатам.

Рис. 3 отражает общие характеристики энергетических спектров отраженных протонов, наблюдаемые при изменении атомного номера мишени – Z [15]: при неизменной энергии зондирующего пучка протонов при уменьшении Z наблюдается уширение энергетического спектра и сдвиг максимума спектра в область больших потерь энергии.

Особенности поведения энергетических спектров отраженных протонов, наблюдаемые при изменении энергии зондирующего пучка, представлены на рис. 4. С ростом энергии зондирующего пучка протонов наблюдается сдвиг максимума

энергетического спектра в сторону меньших энергий и рост относительной полуширины спектра. Отмеченный сдвиг максимума спектра и уширение спектра наблюдается во всех экспериментах для энергии зондирующего пучка легких ионов в интервале от единиц до десятков кэВ [16].

Стоит отметить, что среди огромного многообразия экспериментальных данных не удалось найти спектры, подобные тем, что представлены на рис. 3, но измеренные с относительной точностью, как, например, сделано в [17]. Это важно знать при интерпретации энергетических спектров легких ионов, отраженных от слоисто неоднородных мишеней.

4. АНАЛИТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ОТРАЖЕНИЯ ОТ СЛОИСТО НЕОДНОРОДНЫХ МИШЕНЕЙ

Рассмотрим двухслойную мишень, схема которой представлена на рис. 5.

Функция пропускания представляет собой оператор, определяющий плотность потока частиц $I(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, прошедших сквозь слой:

$$I_T(E, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} T(d, \theta_0, E - E', \theta - \theta', \varphi - \varphi') \times \\ \times I_0(E', \theta', \varphi') d\theta' = T \otimes I_0. \quad (16)$$

Функция отражения представляет собой оператор, определяющий плотность потока частиц $I(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, отраженных от слоя:

$$I_r(E, \theta, \varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_0^{\pi} r(d, \theta_0, E - E', \theta - \theta', \varphi - \varphi') \times \\ \times I_0(E', \theta', \varphi') d\theta' = r \otimes I_0. \quad (17)$$

В формулах (16) и (17) дана как подробная, так и матричная запись действия функции пропускания и функции отражения на плотность потока падающих частиц $I_0(E', \theta', \varphi')$. Плотность потока частиц, отраженных и прошедших сквозь слой, есть сумма плотностей потока частиц $I_T(E, \theta, \varphi)$ и $I_r(E, \theta, \varphi)$ и обозначается $I_{T,r}(E, \theta, \varphi)$.

Воспользовавшись матричной записью, записываем плотность потока частиц, прошедших и отразившихся от слоя материала "1", толщиной d_1 , и отразившихся от материала "2", $R_{12}(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$:

$$R_{12} = r_1 + t_1 \otimes R_2 \otimes t_1 + \\ + t_1 \otimes R_2 \otimes r_1 \otimes R_2 \otimes t_1 + \dots \quad (18)$$

В первом приближении пренебрежем последними слагаемыми:

$$R_{12} = r_1 + t_1 \otimes R_2 \otimes t_1, \quad (19)$$

где
$$t(d, \theta_0, E - E') = t \left(\frac{d}{\cos \theta_0} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi \varepsilon^2 d / \cos \theta_0}} \times$$

$$\times \exp \left(- \frac{(E - E' - \bar{\varepsilon} d / \cos \theta_0)}{2\varepsilon^2 d / \cos \theta_0} \right)$$
 – функция пропускания, описываемая нормальным законом распределения.

Если известны экспериментальные данные по спектрам $R_1(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$ и $R_2(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$, то можно получить более простую формулу для определения $R_{12}(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$. Будем использовать представление (19) для записи функции отражения от однородной полубесконечной мишени из материала "1":

$$R_1 = r_1 + t_1 \otimes R_1 \otimes t_1. \quad (20)$$

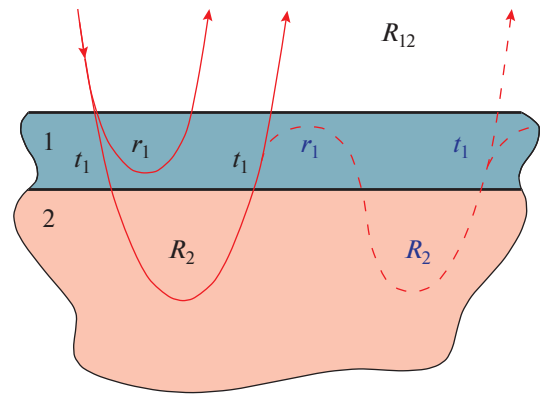


Рис. 5. Процессы, приводящие к изменению функции отражения $R(E, \theta_0, \theta, \varphi_0 - \varphi)$: функция t_1 – функция пропускания для слоя материала "1", функция r_1 – функция отражения от слоя материала "1", функция R_2 – функция отражения от материала "2", функция R_{12} – функция отражения от материала "1" и "2".

Получив выражение для функции r_1 из формулы (20) и подставив ее в формулу (19), получаем:

$$R_{12} = R_1 + t_1 \otimes (R_2 - R_1) \otimes t_1. \quad (21)$$

Формулу (21) можно легко обобщить на трехслойную мишень. Покроем мишень, представленную на рис. 5, сверху слоем, толщиной d_0 из материала "0", тогда получим:

$$R_{012} = r_0 + t_0 \otimes R_{12} \otimes t_0. \quad (22)$$

Аналогично формуле (20), получаем:

$$R_0 = r_0 + t_0 \otimes R_0 \otimes t_0. \quad (23)$$

Для трехслойной модели получаем итоговую формулу:

$$R_{012} = R_0 + t_0 \otimes (R_{12} - R_0) \otimes t_0. \quad (24)$$

На рис. 6 представлены результаты расчета энергетических спектров протонов, отраженных от мишени из вольфрама, покрытого слоями лития различной толщины.

5. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В настоящей работе определены границы применимости метода описания энергетических спектров отраженных частиц, основанного на приближении одного сильного упругого рассеяния или приближении прямолинейных траекторий – SLA. В данном приближении полагается, что движение частиц до и после сильного упругого рассеяния происходит по прямолинейным траекториям (исключается изменение направления движения частицы за счет многократного упругого рассеяния), однако неупругое рассеяние, приводящее к торможению частицы, имеет место. На рис. 1 представле-

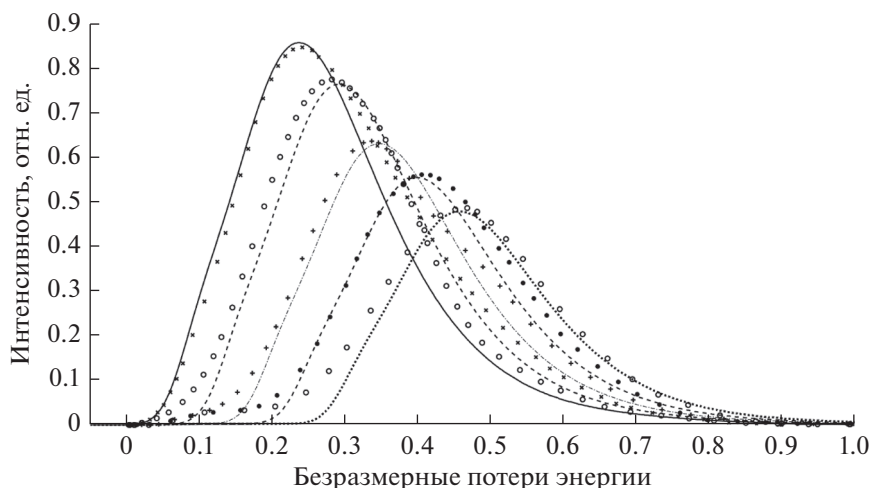


Рис. 6. Энергетические спектры протонов, отраженных от мишени из вольфрама, покрытого слоями лития разной толщины. Геометрия: угол зондирования 71° , угол визирования 109° . Начальная энергия протонов 25 кэВ. Линии на графике – расчет на основе формул (13) и (14) для толщин 10, 17.5, 25, 32 нм (по убыванию интенсивности соответственно), значки – эксперимент [14].

но решение задачи об упругом рассеянии протонов в различных приближениях. Из их сравнения следует, что SLA приближение применимо только тогда, когда остаточный пробег иона много меньше транспортного пробега:

$$\frac{E_0}{\bar{\epsilon}} \ll l_{tr}. \quad (25)$$

Решение консервативной, чистой упругой задачи отражения легких ионов от поверхности твердого тела получено по ОКГ методу. Этот метод с большим успехом применяется для решения задач отражения электронов от поверхности твердого тела [7, 8, 10]. В настоящей работе показано, что для перехода от электронного рассеяния к протонному рассеянию, в ОКГ методе необходимо лишь заменить дифференциальные сечения упругого рассеяния. Применение ОКГ метода в задачах протонного рассеяния возможно в более широком интервале энергий, что является следствием малоуглового приближения (т.к. длина волны де Бройля протонов меньше, чем у электронов, а, следовательно, и параметр экранирования меньше). Полученное на основе ОКГ метода распределение отраженных ионов по длинам пробега в мишени описывается формулой (11). Положение максимума распределения отраженных ионов по длине пробега в мишени, измеренного в длинах транспортного пробега τ_{tr} , не зависит от атомного номера мишени и энергии зондирующего пучка протонов. Определяется оно видом выбранного сечения дифференциального упругого рассеяния.

Расчет энергетических спектров отраженных ионов выполнялся на основе формулы (12). Вид этой формулы объясняется независимостью процессов упругого и неупругого рассеяния. Функция,

описывающая спектр энергетических потерь ионов с пробегом, равным s , представлена формулой (13). Аналитическое выражение для энергетического спектра отраженных ионов, записанное в приближении непрерывного замедления, представлено формулой (14). Удовлетворительное количественное совпадение расчетных энергетических спектров наблюдается для экспериментальных данных, полученных на большом масс-монохроматоре МИФИ [14] (рис. 2 и рис. 6). На рис. 3, 4 наблюдается качественное соответствие расчетных и экспериментальных данных. Причиной количественного различия результатов является большая погрешность данных по средним потерям энергии протонов на единице длины $\bar{\epsilon}$.

Расчетные и экспериментальные данные, представленные на рис. 6, демонстрируют хорошее качество представленной в работе методики расчета спектров протонов, отраженных от слоисто неоднородных мишеней. Результаты, представленные на рис. 6, наиболее ярко демонстрируют возможности для реализации процедуры измерения величины $\bar{\epsilon}$, если нам известна толщина покрытия, которую можно определить, например, методами рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии.

На основе метода, ранее успешно использованного для задач электронного и ионного рассеяния [17–19], построены расчетные схемы для определения энергетических спектров ионов, отраженных от слоисто неоднородных мишеней. Показано удовлетворительное качественное описание энергетических спектров ионов, отраженных от неоднородных поверхностей, на основе описанных в настоящей работе методов. Причиной количественного различия является неприменимость ОКГ метода и не подходы, представленные в [7, 8, 10], а недоста-

точная апробация данных по упругому рассеянию легких ионов и отсутствие данных по сечениям неупругого рассеяния легких ионов в поверхности твердого тела.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Спектроскопия, основанная на зондировании поверхности легкими ионами средних энергий, обладает широкими и, в ряде ситуаций, уникальными возможностями [1–5]. Как по интенсивности отраженных от поверхности твердого тела ионов, так и по интенсивности выбитых из твердого тела ионами атомам (атомам отдачи), можно осуществлять поэлементный анализ поверхности. Метод, основанный на ионном зондировании поверхностного слоя твердого тела, обладает высочайшей чувствительностью. С помощью данного метода возможно исследование процессов адсорбции и десорбции ионов [5], исследование многослойных структур на основе измерения полных коэффициентов отражения ионов, исследование структуры и релаксации поверхности кристаллов [5].

Внимательное исследование результатов анализа твердых тел на основе ионного зондирования указывает на одно важное обстоятельство: в существующих в настоящее время методиках, основанных на расшифровке спектров рассеянных ионов, можно говорить лишь о качественном анализе образца. Исследование в качестве примера работ [20, 21] одной научной группы, посвященных экспериментальному анализу покрытий на основе энергетических спектров отраженных протонов, и работ [20, 22] той же научной группы, посвященных МК моделированию энергетических спектров протонов, отраженных от двухслойных мишеней, приводит к важному заключению — авторы не производят сравнения, сопоставления полученных экспериментальных данных и расчетов по МК моделированию. С подобными ситуациями мы столкнулись, анализируя данные на рис. 3 и рис. 4. В настоящей работе мы наблюдаем удовлетворительное качественное соответствие экспериментальных данных и результатов расчета по предложенной методике, однако отсутствует количественное совпадение, причиной которого, как мы считаем, является огромная погрешность существующих данных по средним потерям энергии ионов на единице длины — $\bar{\epsilon}$. Однако, причиной также могут быть данные по дифференциальным сечениям упругого рассеяния ионов — $x(\mu)$.

Авторы настоящей работы, имеющие большой опыт в расшифровке спектров электронного рассеяния, спектров рентгеновского фотоэлектронной спектроскопии, видели путь становления количественной электронной спектроскопии. Надежные данные по дифференциальным сечениям упругого рассеяния электронов — это результат экс-

периментальной верификации данных по сечениям и угловым распределениям упруго отраженных электронов, выполненной Бронштейном и Прониным [23, 24]. Анализ спектров характеристических потерь энергии электронов позволил сформулировать основные механизмы потерь энергии электронов в веществе, позволил построить дифференциальные сечения неупругого рассеяния электронов $x_{in}(\Delta)$ и определить моменты этого сечения. С особой аккуратностью выверен нулевой момент сечения неупругого рассеяния электронов — полное сечение неупругого рассеяния — σ_{in} или inelastic mean free pass — $l_{in} = \frac{1}{n\sigma_{in}}$, где n — концентрация атомов твердого тела [25, 26]. Базой для определения дифференциальных сечений неупругого рассеяния электронов стали надежные данные по дифференциальным сечениям упругого рассеяния электронов [27], апробированные на основе методик, развитых в [23, 24].

Данные, необходимые для теоретического описания спектроскопии легких ионов средних энергий, можно найти, например, в таблицах NIST. Однако данные по первому моменту дифференциального сечения неупругого рассеяния — $\bar{\epsilon}$ в них даны с огромной погрешностью. Данных по виду дифференциального сечения неупругого рассеяния ионов не существует, т.к. не были проведены эксперименты, подобные измерению спектров характеристических потерь энергии электронов, или эксперименты по измерению с высоким энергетическим разрешением области спектра, соответствующей потерям энергии ионов от нуля до сотни эВ. Если рассмотреть задачу упругого рассеяния ионов, то существует целый ряд потенциалов взаимодействия быстрых ионов с атомами твердого тела, однако строгих правил, в соответствии с которыми можно выбрать наиболее надежный вариант, не существует. Эксперименты, необходимые для апробации дифференциальных сечений упругого рассеяния ионов, подобных экспериментам Бронштейна и Пронина [23, 24], не проводились.

В настоящей работе установлено, что наибольшее качественное совпадение экспериментальных и расчетных спектров отраженных протонов наблюдается при использовании транспортного сечения упругого рассеяния протонов, предложенного в работе Фирсова [12]. Коэффициенты разложения сечения в ряд по полиномам Лежандра — x^l определялись в соответствии с потенциалом криpton-углерод (Кг-С).

Энергетические спектры отраженных протонов очень чувствительны к величине средних потерь энергии протонов на единице длины — $\bar{\epsilon}$. Развитая в настоящей работе методика представляет удобный и эффективный инструмент верификации данных по $\bar{\epsilon}$.

Работа была выполнена в рамках Госзадания № FSFW-2020-0023.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Рассеяние ионов средних энергий поверхностями твердых тел. Москва: Атомиздат, 1980.
2. *Курнаев В.А., Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Отражение легких ионов от поверхности твердого тела. Москва: Энергоатомиздат, 1985.
3. *Mashkova E.S., Molchanov V.A.* Medium energy ion reflection from solids. Amsterdam: North-Holland, 1985.
4. *Рязанов М.И., Тилинин И.С.* Исследование поверхности по обратному рассеянию частиц. Москва: Энергоатомиздат, 1985.
5. *Машкова Е.С., Молчанов В.А.* Применение рассеяния ионов для анализа твердых тел. Москва: Энергоатомиздат, 1995. 176 с.
6. *Chi W.K., Mayer J.M., Nicolet M.A.* Backscattering spectroscopy. New York: Academic Press, 1978.
7. *Afanas'ev V.P., Efremenko D.S., Kaplya P.S.* Analytical and numerical methods for computing electron partial intensities in the case of multilayer systems // *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* 2016. V. 210. P. 16–29.
8. *Afanas'ev V.P., Kaplya P.S., Lisitsyna E.D.* Small-angle approximation and Oswald-Kasper-Gaukler theory of electron reflection from solids // *J. Surf. Invest.: X-ray, Synchrotron Neutron Tech.* 2016. V. 10. № 2. P. 326–331.
9. *Oswald R., Kasper E., Gaukler K.H.* A multiple scattering theory of elastic electron backscattering from amorphous surfaces // *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* 1993. V. 61. № 3–4. P. 251–274.
10. *Salvat-Pujol F., Werner W.S.M.* Oswald-Kasper-Gaukler model for reflection electron energy loss spectroscopy // *Phys. Rev. B.* 2011. V. 83. № 19. P. 195416.
11. *Калашников Н.П., Ремизович В.С., Рязанов М.И.* Столкновения быстрых заряженных частиц в твердых телах. Москва: Атомиздат, 1980.
12. *Firsov O.B.* Scattering of ions by atoms // *Sov. Phys. JETP.* 1958. V. 34. P. 308.
13. *Ziegler J.F., Biersack J.P., Littmark U.* The stopping and range of ions in solids. New York: Pergamon Press, 1985.
14. *Булгадарян Д.Г., Синельников Д.Н., Ефимов Н.Е., Курнаев В.А.* Применение спектроскопии рассеяния протонов кэВных энергий для анализа осаждения лития на вольфрам // *Изв. РАН. Сер. физическая*, 2020. Т. 84. № 6. С. 903–907.
15. *Курнаев В.А., Тельковский В.Г.* Экспериментальные данные по обратному рассеянию заряженных частиц. Москва: МИФИ, 1982.
16. *Morita K., Akimune H., Suita T.* Scattering of Low Hydrogen Ions (H_1^+ , H_2^+ and H_3^+) and Atoms (H_1^0) from Evaporated Metallic Films // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1968. V. 7. № 8. P. 916–926.
17. *Афанасьев В.П., Манухин В.В., Науекс Д.* Полные коэффициенты отражения энергии и частиц от слоистых мишеней // *Поверхность (Физика, химия, механика)*. 1990. № 9. С. 151.
18. *Afanas'ev V.P., Naujoks D.* Energy spectra of electrons reflected from layered targets // *Z. Phys. B. Cond. Mat.* 1991. V. 84. P. 397.
19. *Афанасьев В.П., Лубенченко А.В., Паволоцкий А.Б., Федорович С.Д.* Отражение электронов киловольтных энергий от многослойных мишеней // *ЖТФ*. 2002. Т. 72. С. 100–108.
20. *Bulgadaryan D., Kurnaev V., Sinelnikov D., Efimov N.* On the possibility of thin layers thickness determination with low energy proton scattering // *J. Phys. Conf. Ser.* 2018. V. 941. № 1. P. 012022.
21. *Bulgadaryan D., Sinelnikov D., Kurnaev V., Efimov N., Borisyuk P., Lebedinskii Y.* Application of keV-energy proton scattering for thin film analysis // *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B.* 2019. V. 438. P. 54–57.
22. *Bulgadaryan D., Kolodko D., Kurnaev V., Sinelnikov D.* Facility and the method for MEIS analysis of layers redeposited in plasma devices // *J. Phys. Conf. Ser.* 2016. V. 748. № 1. P. 012016.
23. *Bronshtein I.M., Pronin V.P.* Elastic scattering of electrons during gold adsorption on beryllium and beryllium adsorption on gold // *Sov. Phys.-Solid State.* 1976. V. 17. P. 2502–2504.
24. *Pronin V.P.* Elastic and inelastic interaction of medium energy electrons with surface of solids. Thesis for the degree of Doctor of science. Herzen State Pedagogical University, 2014. URL.
25. *Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R.* Calculation of electron inelastic mean free paths (IMFPs) VII. Reliability of the TPP-2M IMFP predictive equation // *Surf. Interface Anal.* 2003. V. 35. № 3. P. 268–275.
26. *Tanuma S., Powell C.J., Penn D.R.* Calculations of electron inelastic mean free paths. IX. Data for 41 elemental solids over the 50 eV to 30 keV range // *Surf. Interface Anal.* 2011. V. 43. № 3. P. 689–713.
27. *Salvat F., Jablonski A., Powell C.J.* ELSEPA—Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules // *Comput. Phys. Commun.* 2005. V. 165. № 2. P. 157–190.

УДК 621.382.323

МОДЕЛИРОВАНИЕ КРЕМНИЕВЫХ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ С ПОЛНОСТЬЮ ОХВАТЫВАЮЩИМ ЗАТВОРОМ КМОП НАНОТРАНЗИСТОРОВ С ПЕРЕМЕННЫМ РАДИУСОМ РАБОЧЕЙ ОБЛАСТИ

© 2022 г. Н. В. Масальский*

Федеральное государственное учреждение Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва, Россия

*E-mail: volkov@niisi.ras.ru

Поступила в редакцию 15.02.2022 г.

После доработки 04.03.2022 г.

Принята к публикации 10.03.2022 г.

Обсуждается новый кремниевый КМОП нанотранзистор с цилиндрической геометрией полностью охватывающим затвором с переменным радиусом рабочей области. Разработана 2-D аналитическая модель распределения потенциала и основанные на нем модели прямого и подпорогового токов транзистора с рабочей областью в виде усеченного конуса. Изменение геометрии транзистора по сравнению с обычной цилиндрической формой улучшает электро-физические характеристики и позволяет компенсировать ограничения возникающие в следствии масштабирования. Численные исследования конических прототипов демонстрируют улучшенные электростатические характеристики при оптимизированном отношении радиусов 0.83 по сравнению с обычной цилиндрической структурой в диапазоне управляющих напряжений от 0 до 0.6 В. Коническая структура отличается более высоким током транзистора, максимальным соотношением токов I_{on}/I_{off} , низким током утечки и наклоном подпороговой характеристики, близким к теоретическому приделу. Таким образом, коническая архитектура с оптимизированным отношением радиусов может стать заменой цилиндрической структуры для высокоскоростных низковольтных приложений.

Ключевые слова: кремневая нанотранзисторная архитектура, полностью охватывающий затвор, коническая рабочая область, уравнение Пуассона, моделирование

DOI: 10.31857/S0544126922040081

1. ВВЕДЕНИЕ

Кремниевой полевой КМОП транзистор с цилиндрической геометрией и полностью охватывающим затвором является одним из членов семейства gate-all-around (GAA), которое является приоритетным для современного технологического развития нанoeлектроники [1]. Это эффективное решение для преодоления ограничений масштабирования планарных транзисторов и достижения высокой степени интеграции нанотранзисторных СБИС [2–4]. По мере масштабирования транзисторов уменьшение расстояния между истоком и стоком снижает управляемость затвора, нарушая классическое распределение потенциала и, тем самым ухудшая перенос носителей в рабочей области транзистора. При этом такие транзисторы характеризуются большим подпороговым током и высокой крутизной подпороговой характеристики [5–7]. Однако, дальнейшее масштабирование и усовершенствование конструкции GAA КМОП транзисторов продолжается для повышения про-

изводительности микросхем. Изменение геометрии транзистора по сравнению с его обычной формой может повысить его быстродействие и смягчить ограничения масштабирования, в частности из-за коротко-канальных эффектов (ККЭ).

В настоящей работе разработана цилиндрическая архитектура GAA нанотранзистора с переменным диаметром рабочей области. В данном случае со стороны стока она сужена по сравнению с диаметром со стороны истока и, таким образом, напоминает форму усеченного конуса. Этим приемом достигается экранировка стока, что снижает влияние горячих носителей, что, хорошо известно, приводит к повышению ток транзистора [8, 9]. Электростатические характеристики КМОП нанотранзисторов с переменным радиусом численно исследованы с помощью, разработанной в настоящей работе аналитической модели и получены оценки работоспособности рассматриваемой транзисторной структуры. Полученные результаты сравниваются с данными моделирования,

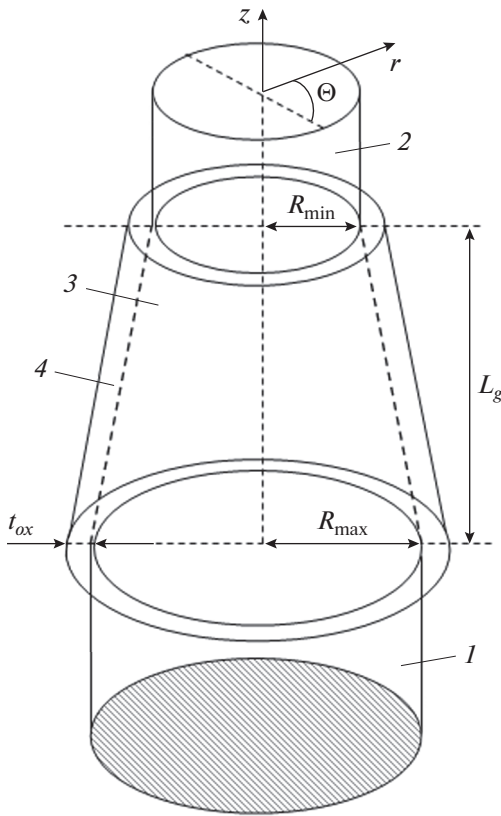


Рис. 1. Эскиз кремниевого с полностью охватывающим затвором КМОП нанотранзистора с конической рабочей областью, где 1 – исток, 2 – сток, 3 – коническая рабочая область, 4 – подзатворный диэлектрик с толщиной t_{ox} , L_g – длина рабочей области, R_{max} – радиус рабочей области со стороны истока, R_{min} – радиус рабочей области со стороны стока.

выполненного с использованием 3D-симулятора TCAD Sentaurus [10].

2. СТРУКТУРА ПРОТОТИПА

На рис. 1 показана 3D архитектура кремниевого цилиндрического с полностью охватывающим затвором КМОП нанотранзистора с коническим сечением рабочей области.

Хорошо известно, что при масштабировании цилиндрических транзисторных структур только уменьшение радиуса рабочей области (R) приводит к снижению тока транзистора [11]. При этом для подавления ККЭ в цилиндрической архитектуре должно выполняться условие [12, 13]:

$$L_g \leq 12.5\sqrt{Rt_{ox}}, \quad (1)$$

где L_g – длина рабочей области (канала) транзистора, t_{ox} – толщина подзатворного окисла.

При этом R масштабируется проще, чем толщина подзатворного диэлектрика, которая определяет и пробойное напряжение на затворе и уровень туннельного тока затвора [12].

В настоящей работе с помощью конической конструкции снимается ограничение по параметру R . В данном случае со стороны истока для большого диаметра (или R_{max}) не выполняется условие подавления ККЭ, а со стороны стока для маленького диаметра (R_{min}) оно выполняется. При этом $\Delta R \ll L_g$, где $\Delta R = R_{max} - R_{min}$. Тогда из решения уравнения Пуассона можно получить распределение потенциала, вольт-амперные характеристики (ВАХ), извлечь подпороговый наклон и сделать вывод о степени влияния ККЭ в анализируемом прототипе транзистора при заданных значениях L_g , t_{ox} , R_{min}/R_{max} . Данную задачу мы решаем в квазиклассическом приближении зарядового разделения (ПЗР) [8, 9, 14] для минимально возможных L_g и R и низколегированной рабочей области. Это условие обеспечивает примерно равномерное распределение носителей по всему поперечному сечению рабочей области. При увеличении легирования канала потенциал носителей на его поверхности будет больше, чем в центре рабочей области. Это оттянет электроны к поверхности и приведет к ухудшению протекания тока в суживающейся части рабочей области у стока.

3. МОДЕЛЬ ПОТЕНЦИАЛА И ТОКА

Рассмотрим в рамках ПЗР задачу определения распределения потенциала в конической рабочей области рассматриваемой транзисторной структуре. В предположении, что кремниевая рабочая область транзистора однородно легирована, и влияние фиксированных окисных зарядов на ее электростатику пренебрежимо мало, то для моделирования распределения потенциала традиционно используется 2D уравнение Пуассона следующего вида [9, 12]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \varphi(r, z) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \varphi(r, z) = \frac{qN_A}{\epsilon_s}, \quad (2)$$

где $\varphi(r, z)$ – электростатический потенциал в рабочей области, q – заряд электрона, ϵ_s – диэлектрическая проницаемость рабочей области (диэлектрическая проницаемость кремния), N_A – концентрация легирования рабочей области.

Решение уравнения Пуассона (2) ищется, используя метод, аналогичный методу Янга (параболического распределения потенциала вдоль оси z) [15], при следующих граничных условиях.

1) электрическое поле на границе затвор-окисел

$$\frac{\epsilon_{ox}}{R' \ln(1 + t_{ox}/R')} (U'_{gs} - \varphi_s(z)) = \epsilon_s \frac{\partial \varphi(r, z)}{\partial r} \Big|_{r=R'},$$

2) электрическое поле в центре рабочей области

$$\left. \frac{\partial \phi(r, z)}{\partial r} \right|_{r=0} = 0,$$

3) потенциал на краю рабочей области со стороны истока

$$\phi(r, 0) = U_{bi},$$

4) потенциал на краю рабочей области со стороны стока

$$\phi(r, L_g) = U_{bi} + U_{ds},$$

где $\phi(r, z)|_{r=R'} = \phi_s(z)$ – поверхностный потенциал, ϵ_{ox} – диэлектрическая проницаемость подзатворного окисла, $R'(z) = R_{max} - \frac{\Delta R}{L_g} z$,

$U'_{gs} = U_{gs} - U_{FB}$, U_{gs} – напряжение на затворе, U_{FB} – напряжение плоских зон, U_{bi} – контактная разность потенциалов, U_{ds} – напряжение сток-исток.

Следуя [9, 12] запишем решение (2) в виде

$$\phi(r, z) = \phi_c(z) + \left[\frac{\epsilon_{ox}}{2R' \epsilon_{Si}} \frac{U'_{gs} - \phi_s(z)}{\ln(1 + t_{ox}/R')} \right] r^2, \quad (3)$$

где $\phi_c(z) = \phi(0, z)$ – центральный потенциал.

Используя известное соотношение между $\phi_c(z)$ и $\phi_s(z)$ в виде [12] $\phi_c(z) = (1 + C)\phi_s(z) - CU'_{gs}$, где $C(z) = \frac{\epsilon_{ox}}{2\epsilon_{Si}} \frac{1}{\ln(1 + t_{ox}/R')}$, мы преобразуем $\phi(z, r)$ в

выражение, зависящее только от $\phi_s(z)$. Для получения выражения для потенциала в явном виде необходимо решить 1D уравнение Пуассона для $\phi_s(z)$. Его решение можно получить аналитически при использовании вышеприведенных граничных условий. Это решение можно записать так [16]:

$$\begin{aligned} \phi_s(z) &= \frac{1}{\sinh\left(\frac{L_g}{l'}\right)} \times \\ &\times \left[\Phi_1 \sinh\left(\frac{L_g - z}{l'}\right) + \Phi_2 \sinh\left(\frac{z}{l'}\right) \right] - A, \\ A &= A_0 - U'_{gs}, \\ \Phi_1 &= A_0 + U_{bi} - U'_{gs}, \\ \Phi_2 &= A_0 + U_{bi} + U_{ds} - U'_{gs}, \\ A_0 &= \frac{qN_A}{\epsilon_S} \left(\frac{1 - C \left(\left(\frac{R'}{R_{max}} \right)^2 - 1 \right)}{4C} \right) R'^2 - U'_{gs}, \\ l' &= \frac{R'}{2} \sqrt{2 \frac{\epsilon_S}{\epsilon_{ox}} \ln\left(1 + \frac{t_{ox}}{R'}\right) + 1}. \end{aligned} \quad (4)$$

В рамках ПЗР выражение для подпорогового тока рассматриваемого КМОП нанотранзистора по аналогии с [8, 9, 17] с учетом симметрии задачи координате Θ можно представить:

$$I_{ds} = 2\pi \frac{\mu_{eff}(E)kT \left(1 - e^{-\frac{qU_{ds}}{kT}}\right)}{\int_0^{L_g} \frac{dz}{\pi \int_0^R n_c(r, z) dr}}, \quad (5)$$

где, $\mu_{eff}(E)$ – “эффективная” подвижность носителей, T – температура, k – константа Больцмана, $n_c(r, z)$ – распределение эффективной концентрации носителей по всему объему рабочей области:

$$n_c(r, z) = \left(\frac{n_i^2}{N_A} \right) e^{-\frac{q\phi(r, z)}{2kT}}, \quad n_i$$
 – собственная концентрация носителей в кремнии [18].

Зависимость подвижности от электрического поля является одним из двух основных факторов, влияющих на поведение КМОП транзистора. Она имеет очень сложную зависимость и в общем случае определяется взаимодействием четырех механизмов рассеяния [18]. Каждый из этих механизмов зависит от распределения электрического поля (E) в рабочей области. Один из наиболее широко используемых имитационных подходов сочетает в себе эти четыре компонента рассеяния в виде “эффективной подвижности” $\mu_{eff}(E)$ с помощью известного правила Маттиссена [19].

В режиме сильной инверсии транзистора перенос зарядов становится более сложным. Распределение электрического поля в рассматриваемом случае отличается от простой цилиндрической геометрии. Здесь характерный размер изменений напрямую связан с величиной R_{min}/R_{max} . Отметим, что при умеренной концентрации легирования N_A распределение носителей более равномерно по всему сечению рабочей области [20]. Это несколько снижает общий уровень напряженности электрического поля, что повышает подвижность носителей и снижает эффекты рассеяния на границе [5].

В рассматриваемом приближении общий заряд в канале транзистора n -типа состоит из подвижного (электроны) и примесного. В приближении полного обеднения ток транзистора определяется переносом подвижного заряда $Q_m(r, z)$ и положением квази уровня Ферми $V_n(r, z)$. Тогда выражение для плотности тока можно записать в виде [11]

$$i_{ds} = -2\pi \mu_{eff}(E) Q_m(r, z) \frac{\partial V_n}{\partial z}. \quad (6)$$

Это выражение объединяет дрейфовую и диффузную компоненты тока. В общем случае распределение зарядов можно записать так.

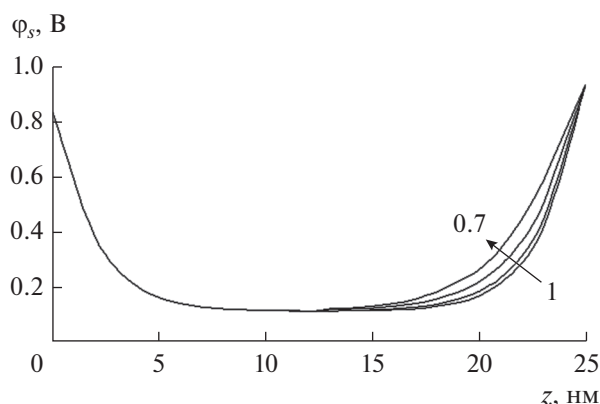


Рис. 2. Продольные распределения поверхностного потенциала при $U_{ds} = 0.1$ В в рабочей области прототипов с разными отношениями R_{min}/R_{max} от 1 (самая нижняя кривая) до 0.7 (самая верхняя кривая) с шагом 0.1.

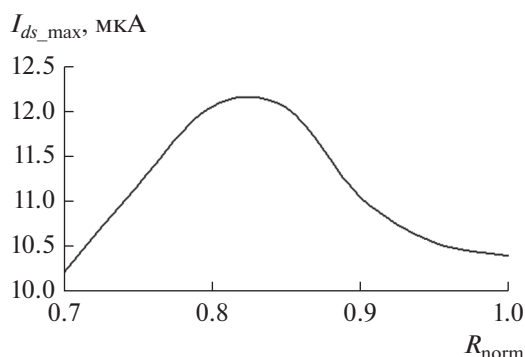


Рис. 3. Зависимость максимального тока прототипов (I_{ds_max}) при $U_{ds} = U_{gs} = 0.6$ В от отношения R_{min}/R_{max} (R_{norm}).

$n = n_i \exp\left(-\frac{q}{kT}(\phi(r, z) - V_n(r, z))\right)$. Значение тока получается двойным интегрированием выражения (6).

Следует отметить, что для получения единой ВАХ зависимости (5) и (6), “сшиваются” при помощи сглаживающих функций по широко применяемому алгоритму.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для модельных расчетов выбран прототип КМОП нанотранзистора в соответствии с условиями приведенными в п. 1. Для данной модели длина рабочей области L_g фиксирована и составляет 25 нм. Минимальный и максимальный радиусы рабочей области выбраны 3.5 и 5 нм соответственно. Минимальное отношение $R_{min}/R_{max} = 0.7$. Исток и сток равномерно легированы примесью с концентрацией $N_{SD} = 0.5 \times 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Концентрация легирования рабочей области N_A равна $1.5 \times 10^{15} \text{ см}^{-3}$.

Толщина затвора и толщина подзатворного оксида кремния t_{ox} выбраны 8 и 1.2 нм соответственно. Работа выхода металлического электрода затвора составляет 4.6 эВ.

На рис. 2 показаны продольные профили поверхностного потенциала прототипов конических КМОП транзисторов с разным отношением радиусов. Они сравниваются с потенциалом классической цилиндрической геометрии при $R_{min}/R_{max} = 1$. Хорошо видно, что профили поверхностного потенциала конических прототипов со стороны стока смещены вверх (имеет большую кривизну) из-за сужения кремниевой рабочей области. Т.е. реализуется своеобразная экранировка стока, что снижает напряженность электрического поля в этой области [4, 7].

Из результатов моделирования также следует, что для всех конических прототипов пик электрического поля меньше, чем для классической цилиндрической геометрии. Величина пика электрического поля минимальна для $R_{min}/R_{max} = 0.7$ и максимальна для $R_{min}/R_{max} = 1$. Такое снижение электрического поля положительным образом влияет на функционирование транзистора из-за уменьшения количества горячих носителей, о чем было отмечено выше.

Различные ключевые транзисторные характеристики были проанализированы в зависимости от величины отношения R_{min}/R_{max} при максимальных управляющих напряжениях.

На рис. 3 приведены результаты расчетов максимального тока транзистора при разных значениях R_{min}/R_{max} в диапазоне 0.7–1.

Из рис. 3 видно, что коническая конструкция в некотором диапазоне отношения R_{min}/R_{max} обеспечивает больший ток стока по сравнению с обычной цилиндрической рабочей областью. Это увеличение тока стока обусловлено более равномерным распределением носителей в сечении рабочей области, которое возникает из-за сужения канала у стока. В данном случае создается наиболее благоприятные условия для транспорта носителей: отсутствие горячих носителей и высокий ускоряющий потенциал, что определяет максимально эффективный перенос носителей к стоку [2, 6, 20]. В экспериментах максимальный ток составляет 12.2 мкА при $R_{min}/R_{max} = 0.83$. По сравнению с цилиндрической рабочей областью ($R_{min}/R_{max} = 1$) максимальный ток на 1.8 мкА ниже, или меньше на 14%. Дальнейшее уменьшение R_{min}/R_{max} уменьшает толщину кремния, что отрицательно влияет на подвижность и токопроводимость устройства. При больших значениях отношения радиусов ток снижается из-за увеличения горячих носителей из-за ухудшения экранировки стока.

Следует отметить, что из результатов моделирования следует, что максимум проводимости также

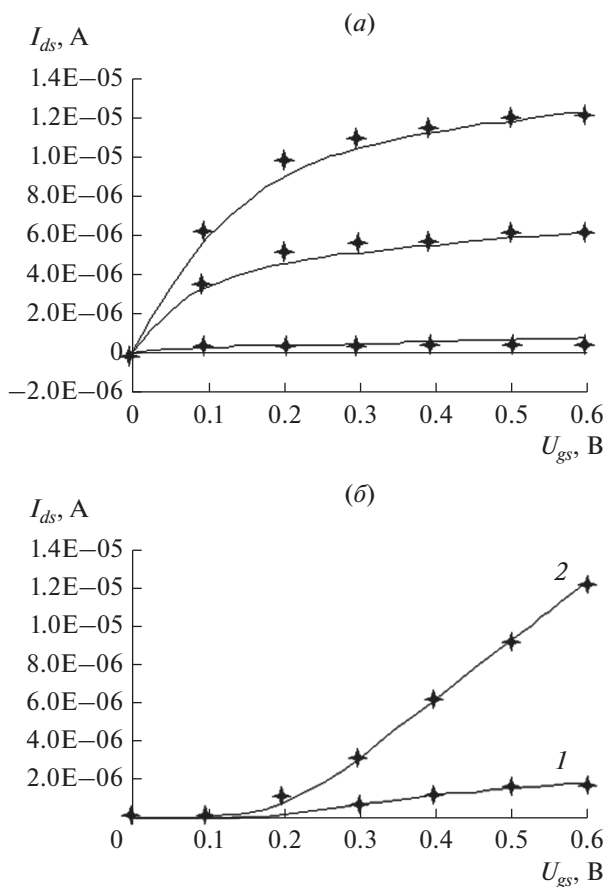


Рис. 4. ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ при $U_{gs} = 0.6$ В, где верхний – $I_{ds}(U_{ds})$ при $U_{gs} = 0.2, 0.4, 0.6$ В; нижний – $I_{ds}(U_{gs})$ $I - U_{ds} = 0.05$ В, $2 - U_{ds} = -0.6$ В. На обоих рисунках звездочками обозначены данные моделирования TCAD.

соответствует отношению $R_{min}/R_{max} = 0.83$ из-за идеальных условий транспорта носителей. Поэтому можно утверждать, что конический прототип будет иметь больший коэффициент усиления по сравнению с цилиндрическим.

Для оптимизированной транзисторной структуры рассчитаны ВАХ $I_{ds}(U_{ds})$ и $I_{ds}(U_{gs})$, которые приведены на рис. 4. Результаты расчетов сопоставляются с данными моделирования, полученными при помощи 3D-симулятора TCAD Sentaurus.

Из сравнения можно сделать вывод о приемлемом соответствии аналитической и приборно-технологической моделей. Так при максимальных управляющих напряжениях, т.е. для максимального тока рассогласование данных составляет около 3%. При $U_{ds} = U_{gs} = 0.3$ В ошибка составляет 5–8%. В подпороговом режиме рассогласование для тока утечки составляет примерно 15%, максимальное отклонение наблюдается для случая $U_{ds} = 0.01$ В и $U_{gs} = 0$ В – около 50%. В данном случае 131 фА дает аналитическая модель и 65 фА – TCAD модель.

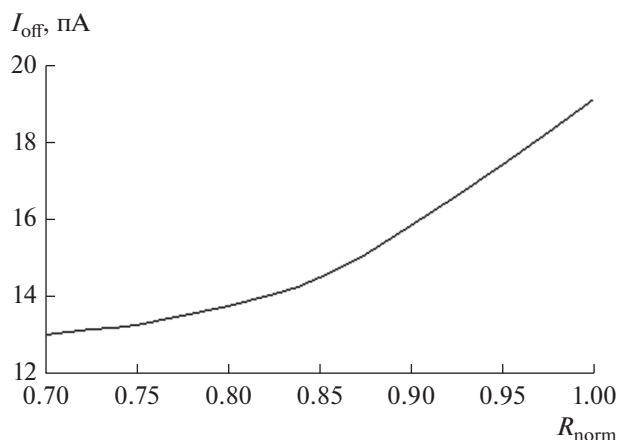


Рис. 5. Зависимость тока I_{off} от отношения радиусов R_{min}/R_{max} (R_{norm}).

Ток I_{off} играет важную роль при функционировании нанотранзистора. Этот ток уменьшает ток включения и влияет на быстродействие транзистора и микросхемы, обеспечивает ее помехозащищенность [2, 4]. Ток утечки необходимо поддерживать очень низким, чтобы уменьшить рассеивание статической мощности. Из рис. 5, где приведены результаты аналитического моделирования, можно сделать вывод, что конические прототипы обеспечивают меньший ток утечки в выключенном состоянии по сравнению с цилиндрической конструкцией.

Подпороговый наклон (SS) является важным параметром для обеспечения статических и динамических характеристик коротко-канальных нанотранзисторов. В частности, чтобы получить высокое соотношение I_{off}/I_{on} подпороговый наклон должен быть низким, близким к теоретическому пределу. На рис. 6 приведены экстрагированные значения параметра SS.

Из рис. 6 видно, что коническая конструкция имеет меньший подпороговый наклон по сравнению с цилиндрической. Для оптимизированной транзисторной структуры $R_{min}/R_{max} = 0.83$ $SS = 63.7$ мВ/дес. С повышением отношения R_{min}/R_{max} наблюдается неуклонный рост SS. После значения $R_{min}/R_{max} = 0.86$ он становится критическим. Что указывает на усиление влияния ККЭ и ограничивает диапазон возможных значений отношений R_{min}/R_{max} .

При разработке современных электронных устройств важно учитывать соотношение токов I_{on}/I_{off} [12, 14]. Поэтому транзисторная структура должна обеспечивать высокое соотношение I_{on}/I_{off} . Для оптимизированной транзисторной структуры соотношение токов составляет 6 порядков. Поэтому можно утверждать, что коническая структура характеризуется более высоким

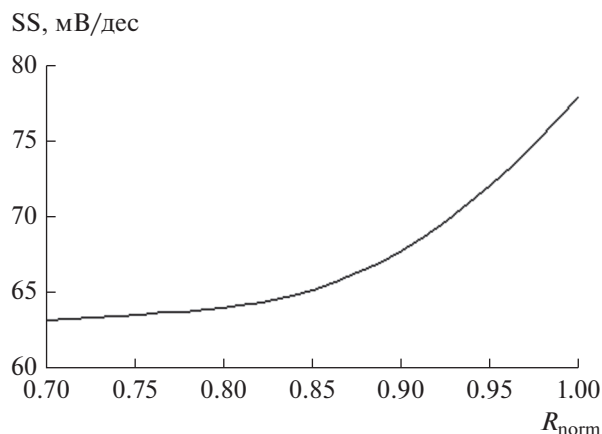


Рис. 6. Подпороговый наклон (SS) от отношения $R_{\text{min}}/R_{\text{max}}$ при $U_{ds} = 0.6$ В.

$I_{\text{on}}/I_{\text{off}}$ соотношением относительно классической цилиндрической.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована конструкция кремниевого нано размерного КМОП транзистора цилиндрической геометрии с полностью охватывающим затвором с переменным радиусом рабочей области. Рассмотрен случай когда рабочая область представляет собой усеченный конус: со стороны стока она сужена по сравнению со стороны истока. При выборе геометрии рабочей области применено условие компенсации коротко-канальных эффектов. В данном случае со стороны истока для большого диаметра не выполняется условие подавления ККЭ, а со стороны стока для маленького диаметра оно выполняется. В рамках приближения зарядового разделения разработана 2-D аналитическая модель распределения потенциала и основанные на нем модели прямого и подпорогового токов. Выбран прототип транзистора с длиной рабочей области 25 нм, большим и меньшим радиусами 5 и 3.5 нм, соответственно. В диапазоне управляющих напряжений 0–0.6 В численно исследовано поведение поверхностного потенциала, тока стока, подпорогового наклона в зависимости от значения отношения радиусов. Из результатов видно, что коническая геометрия с отношением радиусов 0.83 обеспечивает самый высокий ток стока 12.2 мА, демонстрирует максимальное соотношение $I_{\text{on}}/I_{\text{off}} \sim 10^6$ и значение крутизны подпороговой характеристики 63.7 мВ/дес. Результаты моделирования сопоставляются с данными моделирования TCAD. При этом практический во всем диапазоне управляющих напряжений ошибка в среднем не превышает 15%. Полученные результаты позволяют отнести коническую структуру к высоко конкурентным в семействе GAA.

Публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН “Проведение фундаментальных научных исследований (47 ГП)” по теме № FNEF-2021-0001 “Математическое обеспечение и инструментальные средства для моделирования, проектирования и разработки элементов сложных технических систем, программных комплексов и телекоммуникационных сетей в различных проблемно-ориентированных областях. 0580-2021-0001”, рег. № 121031300047-6.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) Interconnect, 2020 Edition. [Online] Available: <https://irds.ieee.org/editions/2020>.
2. Nanoelectronics: Devices, Circuits and Systems. Editor by Brajesh Kumar Kaushik. Elsevier. 2018.
3. Sahay S., Kumar M. Junctionless Field-Effect Transistors: Design, Modeling, and Simulation. Wiley-IEEE Press, 2019.
4. Tomar G., Barwari A. Fundamental of electronic devices and circuits. Springer. 2019.
5. Chiang T.-K. A New Quasi-3-D Compact Threshold Voltage Model for Pi-Gate MOSFETs With the Interface Trapped Charges // IEEE Transactions on Nanotechnology. 2015. V. 14. № 3. P. 555–560.
6. Gao H.-W., Wang Y.-H., Chiang T.-K. A Quasi-3-D Scaling Length Model for Trapezoidal FinFET and Its Application to Subthreshold Behavior Analysis // IEEE Transactions on Nanotechnology. 2017. V. 16. № 2. P. 281–289.
7. Масальский Н.В. Моделирование характеристик КМОП нанотранзистора с полностью охватывающим затвором и неравномерно легированной рабочей областью // Микроэлектроника. 2019. Т. 48. № 6. С. 436–444.
8. Lundstrom M., Guo J. Nanoscale Transistors: Device Physics, Modeling and Simulation. Springer: New York, 2006.
9. Colinge J.P. FinFETs and Other Multi-Gate Transistor. NewYork: Springer-Verlag, 2008.
10. TCAD Sentaurus; Synopsys Inc.: Mountain View, CA, USA, 2017.
11. Auth C.P., Plummer J.D. Scaling theory for cylindrical, fully-depleted, surrounding-gate MOSFETs // IEEE Trans. on Electron Devices. 1997. V. 18. № 2. P. 74–76.
12. Ferain I., Colinge C.A., Colinge J. Multigate transistors as the future of classical metal–oxide–semiconductor field-effect transistors // Nature. 2011. V. 479. P. 310–316.
13. Neamen D. Semiconductor physics & devices: basic principles. New York, McGaw-Hill, 2011.
14. Schwierz F., Wong H., Liou J.J. Nanometer CMOS. Pan Stanford Publishing. Singapore. 2010.
15. Young K.K. Analysis of conduction in fully depleted SOI MOSFETs // IEEE Trans. Electron Devices, 1989. V. 36. № 3. P. 504–506.

16. Wang W., Liu Z., Chiang T. A New Effective-Conducting-Path-Driven Subthreshold Behavior Model for Junctionless Dual-Material Omega-Gate Nano-MOSFETs // IEEE Transactions on Nanotechnology. 2019. V. 18. № 9. P. 904–910.
17. He J., Chan M., Zhang X., Wang Y. A carrier-based analytic model for the undoped (lightly doped) cylindrical surrounding-gate MOSFETs // Solid State Electron. 2006. V. 50. № 3. P. 416–421.
18. Sze S.M. Physics of Semiconductor Device 2nd edn, John Wiley & Sons Inc.: Hoboken, New Jersey.
19. Iniguez B., Jimenez D., Roig J., Hamidi H.-A., Marsal L.F., Pallares J. Explicit continuous model for long-channel undoped surrounding-gate MOSFETs // IEEE Trans. Electron. Devices. 2005. V. 52. № 8. P. 1868–1873.
20. Karthigai Pandian M., Balamurugan N.B. Analytical threshold voltage modeling of surrounding gate silicon nanowire transistors with different geometries // J. Electric Eng Technol. 2014. V. 9. № 6. P. 742–751.

УДК 621.391

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ УСТРОЙСТВ НА ПОВЕРХНОСТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПАКЕТА COMSOL

© 2022 г. А. С. Койгеров^а, *, А. В. Корляков^а^аСанкт-Петербургский государственный электротехнический университет “ЛЭТИ” им. В.И. Ульянова (Ленина), ул. пр. Попова, 5, Санкт-Петербург, 197376 Россия

*E-mail: a.koigerov@gmail.com

Поступила в редакцию 20.02.2022 г.

После доработки 09.03.2022 г.

Принята к публикации 09.03.2022 г.

Представлены результаты исследования и анализа волновых акустических процессов в пьезоэлектрических подложках на основе решения волновых уравнений пьезоакустики методом конечных элементов. Приведено описание тестовых структур и алгоритма работы в среде COMSOL Multiphysics. Рассмотрены три основных подхода: в области собственных частот, в заданном частотном диапазоне и во временной области. Проведен анализ свойств и параметров широко применяемых поверхностных акустических волн. Представлена визуализация ряда характеристик. Рассчитаны фазовая скорость волны и коэффициент электромеханической связи. Показано, что данные, полученные в результате численного анализа, соответствуют данным из известных источников. Выполнено сопоставление результатов расчета и экспериментальных измерений коэффициента передачи на примере линии задержки и резонаторного фильтра.

Ключевые слова: поверхностные акустические волны, встречно-штыревой преобразователь, фильтр на ПАВ, пьезоэлектрическая подложка, ниобат лития, акустоэлектроника, метод конечных элементов, COMSOL

DOI: 10.31857/S054412692204007X

1. ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время метод конечных элементов (МКЭ) является эффективным инструментом для моделирования различных физических процессов в твердых телах. Развитие современной вычислительной техники и появление современных пакетов моделирования позволяет анализировать эти процессы и разрабатывать устройства без изготовления физического прототипа. Для создания модели можно использовать различные пакеты мультифизического моделирования, такие как COMSOL Multiphysics и ANSYS. Данные пакеты успешно решают различные прикладные задачи в области разработки устройств микросистемной техники, акустических микросистем и микроприборов акустоэлектроники. Решение задач в области микроэлектромеханических систем (МЭМС) с помощью пакета ANSYS представлено в работах [1, 2], в которых представлены результаты расчета амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) МЭМС-микрофона [1] и рассмотрены вопросы моделирования термоэлектрических генераторов на основе технологии МЭМС [2]. Расчет электромеханической модели актюатора на осно-

ве ионного полимер-металлического композита с помощью COMSOL показан в работе [3]. Пакет COMSOL Multiphysics хорошо зарекомендовал себя как мощный инструмент для анализа волновых акустических процессов в пьезоэлектрических кристаллах [4, 5] и для расчета устройств на поверхностных акустических волнах (ПАВ) [6, 7].

В настоящее время микроприборы на ПАВ [8] (фильтры, линии задержки, резонаторы и т.д.) находят применение в различных радиотехнических системах. Кроме того, они используются в микросистемной технике в качестве основы для микроминиатюрных сенсоров различного назначения – датчиков физических величин (температура, микроперемещение, ускорение и т.д.). Широкое распространение устройства на ПАВ получили в диапазоне от десятков мегагерц до 2.5 ГГц. Область технических применений микроприборов на ПАВ стремительно развивается. Это стимулируется как общей тенденцией микроминиатюризации сложных электронных систем, так и уникальными свойствами поверхностных волн.

Разработка микроприборов на ПАВ основывается на знании свойств акустических волн, которые могут распространяться как в объеме твердого тела, так и вдоль поверхности. Если твердое тело ограничено плоской поверхностью, то кроме объемных волн (продольных и поперечных) в нем могут существовать упругие волны, свободно распространяющиеся вдоль поверхности — поверхностные акустические волны, локализованные вблизи границы поверхности. Известно, что в зависимости от условий распространения существуют различные типы упругих волн: волны Рэлея, Гуляева-Блюстейна, Лэмба, Стоунли, Лява [9, 10]. Волны Рэлея и вытекающие ПАВ (ВПАВ) — основные и наиболее часто встречающиеся типы поверхностных волн в телах. Главной особенностью распространения ПАВ в пьезоэлектрических подложках является тот факт, что волна механических смещений сопровождается волной электрического потенциала. Причем поверхностная волна в общем случае имеет три компонента механического смещения (две сдвиговых, одну продольную). Учет всех этих физических особенностей распространения волн в анизотропных кристаллах возможен при численном анализе.

Примеры численного расчета параметров акустических волн в пакете ANSYS можно найти в работе [11, 12]. В пакете COMSOL — работы [4–7, 13–15].

Численное 3-*D* моделирование волновых процессов помогает понять физику ПАВ, а на основе анализируемых параметров проектировать микроприборы на ПАВ с оптимальными характеристиками. Стоит заметить, что многие разработчики для расчета микроприборов на ПАВ используют модель связанных мод (МСМ) [16], но необходимые ключевые параметры извлекают численными методами [4, 5, 12].

В настоящий момент самыми широко используемыми типами поверхностных волн для микроприборов на ПАВ являются:

- 1) волны Рэлея;
- 2) вытекающие или “псевдо” поверхностные ПАВ (англ. *leaky surface acoustic wave* — *LSAW*);
- 3) квазиповерхностные *STW*-волны (англ. *surface transverse wave*) и “приповерхностные” объемные акустические волны *SSBW* (*surface skimming bulk modes*). Отметим, что в слабых пьезоэлектриках, мода волны, удерживаемая у поверхности за счет решетки металлических электродов называется *STW*, а на свободной поверхности волна перетекает в объем и называется *SSBW*.

Каждый из данных типов волн имеет свои особенности распространения и применяется для различных классов устройств. Так, волны Рэлея на подложках $128^\circ Y-X \text{ LiNbO}_3$ и $Y-Z \text{ LiNbO}_3$ часто используют для проектирования трансверсальных фильтров и дисперсионных линий задержек,

вытекающие ПАВ на подложках $64^\circ Y-X \text{ LiNbO}_3$ или $42^\circ Y-X \text{ LiTaO}_3$ — резонаторных фильтров, а *STW* на $36^\circ Y-X+90^\circ \text{ Quartz}$ — узкополосных резонаторных фильтров и резонаторов. Возможность проектирования того или иного класса микроприборов на ПАВ и определяется выбором пьезоэлектрических подложек. Таким образом, в настоящий момент задача анализа и численного моделирования волновых процессов для анализа параметров различного рода ПАВ является актуальной. Кроме того, COMSOL позволяет не только анализировать параметры волн, но и рассчитывать рабочие характеристики устройств в целом как в 2-*D*, так и 3-*D* размерности.

Целью работы является демонстрация возможностей пакета COMSOL по решению ряда прикладных задач по анализу волновых акустических процессов в пьезоэлектрических подложках, расчет рабочих характеристик устройств в частотной области и сопоставление их с экспериментальными данными.

2. ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ В COMSOL

На рис. 1а изображен пример устройства на ПАВ в виде линии задержки. Типовое устройство на ПАВ состоит из пьезоэлектрической подложки, на поверхности которой расположены металлические электродные структуры. В данном случае линия задержки на ПАВ состоит из входного и выходного встречно-штыревых преобразователей (ВШП). Для моделирования устройства на ПАВ в статье рассматривается пакет COMSOL, работа которого основана на МКЭ. Расчет рабочих характеристик можно осуществлять как в 3-*D*, так и 2-*D* размерности. Кроме того, возможен расчет простых тестовых конструкций (рис 1б), на основе которых удобно анализировать различные параметры ПАВ.

Пакет COMSOL с помощью встроенных функций решает системы дифференциальных уравнений, связывающие упругие и пьезоэлектрические свойства среды распространения ПАВ.

Уравнения пьезоакустики в тензорной форме [10]:

$$\begin{cases} T_{ij} = C_{ijkl}S_{kl} - e_{kij}E_k \\ D_i = \epsilon_{ij}E_j + e_{ijk}S_{jk}, \end{cases} \quad (1)$$

где T , S — тензоры напряжений и деформаций; E , D — векторы напряженности и индукции электрического поля; C , e , ϵ — тензоры модулей упругости, пьезомодулей и диэлектрической проницаемости соответственно.

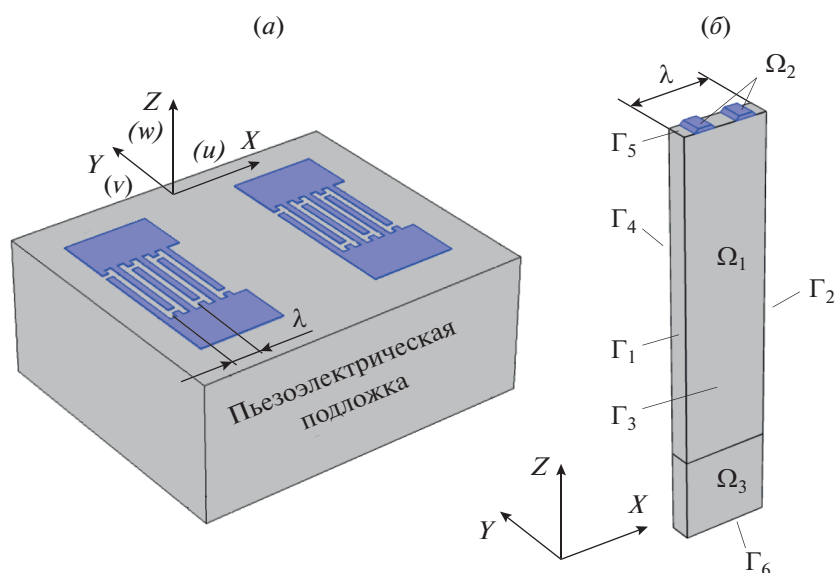


Рис. 1. Общий вид устройства на ПАВ: а – линия задержки на ПАВ; б – тестовая ячейка в виде одного периода ВШП.

Также уравнения (1) и (2) можно представить в виде [10]:

$$\begin{cases} \rho \frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} = C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} + e_{kij} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k}, \\ e_{ikl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_i \partial x_l} - \varepsilon_{ik} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x_i \partial x_k} = 0, \quad i, j, k, l = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (2)$$

где показана связь компонент механического смещения u в декартовой системе координат x и электрического потенциала Φ , ρ – плотность материала.

При расчете в программном пакете для каждого узла выбранной сетки ищется 4 неизвестных – 3 механических компоненты смещения (u_1, u_2, u_3) и Φ – электрический потенциал. При условии задания соответствующих начальных и граничных условий данные уравнения полностью определяют возможные волновые процессы в объеме упругого анизотропного тела, обладающего пьезоэлектрическими свойствами.

Алгоритм анализа и расчета в среде COMSOL включает несколько шагов:

1. Выбор размерности модели 2-D/3-D;
2. Прорисовка геометрии устройства;
3. Выбор материала;
4. Ввод углов Эйлера;
5. Задание области идеально согласующего слоя;
6. Установка периодических и граничных условий;
7. Генерация сетки;
8. Выбор и настройка “Решателя”;
9. Запуск расчета;

10. Постобработка – визуализация и обработка результатов численного моделирования в разделе “Результаты”.

Рассмотрим некоторые особенности алгоритма более подробно.

Геометрия. Рассматриваем трехмерную систему координат (X, Y, Z) – в обозначении COMSOL, или в “привычной” декартовой системе координат (x_1, x_2, x_3), где X – направление распространения ПАВ, Z – нормаль к поверхности (см. рис 1б), тогда плоскость (X, Z) будет сагиттальной плоскостью. При решении задачи распространения ПАВ в этой системе координат будут соответствовать компоненты механического смещения: w – вертикальная сдвиговая Z -компонента, u – продольная X -компонента, v – горизонтальная сдвиговая Y -компонента.

Ограничим рабочее пространство по координате X (см. рис 1б) в одну длину волны – λ ($\lambda = 2$ мкм), по координате Y в $\lambda/4$, применяя к границам периодические граничные условия, а по координате Z установим значение порядка 5λ , поскольку известно, что ПАВ сосредоточена у приповерхностного слоя. Таким образом, формируем расчетную область Ω_1, Ω_2 – область металлических электродов.

Свойства материала. Пьезоэлектрические материалы, обычно применяемые в качестве подложек, являются анизотропными. При описании материала необходимо задавать не только сам материал, но и выбранный срез, и направление распространения акустических волн. Напомним, что в акустоэлектронике универсальным способом задания среза монокристалла и направления распространения волны является применение так называемых углов Эйлера [17, 18]. COMSOL име-

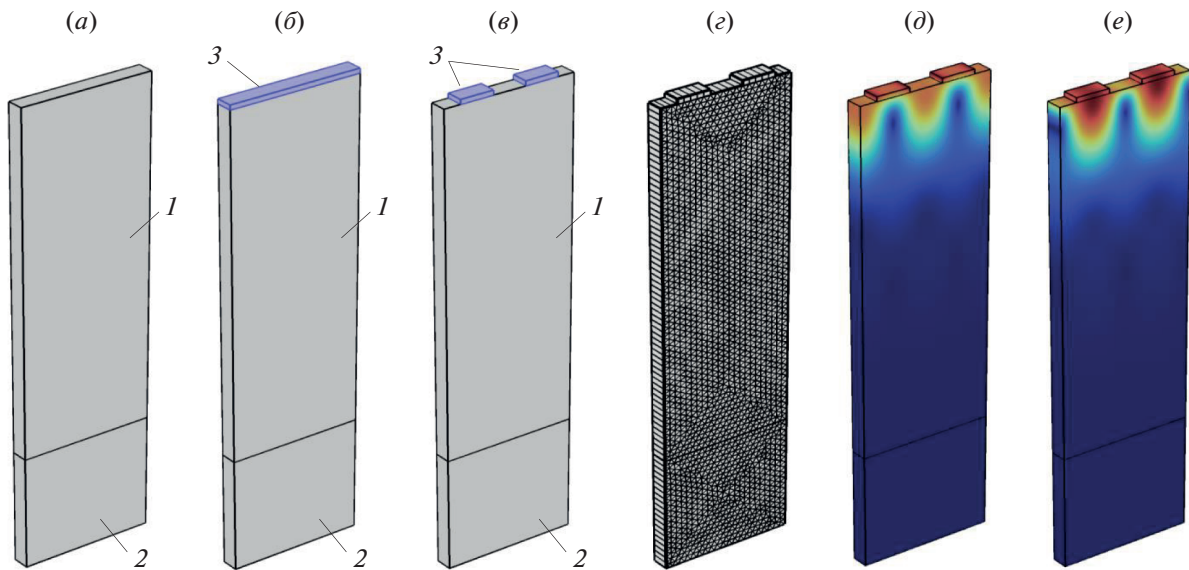


Рис. 2. Тестовые ячейки для анализа параметров ПАВ на свободной поверхности (а), под металлизированной поверхностью (б) и под металлическими электродами (в), сетка (г), результаты численного анализа первой собственной частоты (д) и второй собственной частоты (е). Геометрия: 1 – пьезоэлектрический материал, 2 – идеально согласованный слой, 3 – металл.

ет встроенные средства по преобразованию материальных констант в соответствии с указанными углами Эйлера. Углы Эйлера для наиболее широко применяемых в акустоэлектронике пьезоэлектрических материалов можно найти в литературе [18]. Кроме того, необходимо указать и сами константы для модулей упругости, пьезомодулей и диэлектрической проницаемости соответственно. Основные требуемые константы для различных пьезоэлектрических материалов представлены в [17, 19], также можно воспользоваться готовой библиотекой материалов COMSOL.

Сетка. Пример построенной сетки представлен на рис. 2г. Плотность сетки – 20 элементов на длину волны. В данной работе представлена сетка в виде призм.

Граничные условия. Рассмотрим пример задания граничных условий для простой тестовой ячейки, представленной на рис. 1б. Механические и электрические граничные условия представлены в табл. 1.

Периодические граничные условия применяются к границам (Γ_1, Γ_2) и (Γ_3, Γ_4), вследствие чего ячейка является бесконечной и периодической (рис. 1б).

Механические и электрические условия для задания периодичности на границах:

$$\begin{cases} U_i|_{\Gamma_1} = U_i|_{\Gamma_2}, \\ \phi|_{\Gamma_1} = \phi|_{\Gamma_2}, i = 1, 2, 3, \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} U_i|_{\Gamma_3} = U_i|_{\Gamma_4}, \\ \phi|_{\Gamma_3} = \phi|_{\Gamma_4}, i = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (4)$$

Условия отсутствия механического и электрического поля на границе:

$$\begin{cases} U_i|_{\Gamma_6} = 0, \\ \phi|_{\Gamma_6} = 0, i = 1, 2, 3. \end{cases} \quad (5)$$

На границах в области отсутствия металлических электродов – условия свободной поверхности:

$$D_j n_j|_{\Gamma_5} = 0, \quad (6)$$

где n – нормаль к соответствующей границе.

Таблица 1. Механические и электрические граничные условия

Граница	Механические условия	Электрические условия
Γ_1, Γ_2	Периодические	Периодические
Γ_3, Γ_4	Периодические	Периодические
Γ_5	Свободные	Нулевой заряд
Γ_6	Фиксированные	Нулевой заряд

Таблица 2. Параметры ПАВ в материалах

Параметры ПАВ в материале	Материал и срез		Источник
	LiNbO ₃ , 64° Y-X	LiNbO ₃ , 128° Y-X	
Основной тип волны	ВПАВ	Волна Рэлея	–
Скорость ПАВ на свободной поверхности V_f , м/с	4696.6 4690.4	3981 3979.3	Д.р. [22]
Скорость ПАВ на металлизированной поверхности V_m , м/с при $H_m/\lambda = 0.01\%$	4450.8 4450	3870 3870.7	Д.р. [22]
КЭМС K^2 , %	10.47 10.25	5.54 5.46	Д.р. [22]

Примечание: Д.р. – данная работа.

На нижнем торце подложки расположен идеально согласованный слой (область Ω_3 , рис. 1б), поглощающий распространяющиеся волны, наличие которого позволяет ограничить область численного моделирования.

3. РАСЧЕТ ПРОСТЫХ ТЕСТОВЫХ ЯЧЕЕК

Элементами топологии микроприборов на ПАВ являются электродные структуры, и, как правило, они имеют некоторую периодичность, поэтому удобно анализировать параметры ПАВ именно либо для одного периода такой структуры, либо для участка в одну длины волны (λ). Анализируемые в пакете тестовые ячейки – периодические электродные структуры с периодом $p = \lambda/2$.

Пакет COMSOL для периодических тестовых ячеек позволяет осуществлять: 1) анализ собственных значений акустических мод (*Eigenfrequency*) [20], в результате которого получается набор собственных значений частот для всех акустических мод, возбуждаемых в данной периодической ячейке; 2) частотный анализ, в процессе которого вычисляется полная проводимость (*Harmonic admittance*) [21] тестовой периодической ячейки в заданном частотном диапазоне. При анализе учитываются такие эффекты второго порядка, как рассеивание волны в глубину подложки, возбуждение различных акустических мод и др.

3.1. Анализ в области собственных частот

В пакете COMSOL расчет собственных частот осуществляется с помощью решателя *Study – Eigenfrequency*. На основе полученных значений собственных частот рассчитываются такие параметры ПАВ, как

- фазовая скорость на свободной и металлизированной поверхности;
- фазовая скорость под системой электродов;

– коэффициент отражения и прохождения для одиночного электрода;

– коэффициент электромеханической связи.

Геометрия тестовых ячеек, для которых будут анализироваться параметры ПАВ, представлены на рис. 2, это – свободная поверхность (рис. 2а), металлизированная поверхность (рис. 2б), поверхность с электродами (рис. 2в). H_m – толщина металлизации.

На основе полученного набора собственных частот (f_1 и f_2) можно рассчитать параметры ПАВ на основе формул [5]:

$$V = \frac{f_1 + f_2}{2} \lambda, \quad (7)$$

$$r = \pi \frac{f_2 - f_1}{f_2 + f_1}. \quad (8)$$

По известным скоростям для свободной и металлизированной поверхности можно оценить КЭМС как:

$$K^2 = 2 \frac{V_0 - V_m}{V_0}, \quad (9)$$

где V_0 – скорость на свободной поверхности, V_m – скорость под металлизированной поверхностью (при $H_m/\lambda = 0.01\%$).

Результаты расчета скорости ПАВ для свободной и металлизированной поверхностей и КЭМС для анализируемых материалов сведены в табл. 2. Анализ данных таблицы показывает хорошее согласование полученных результатов с данными литературы.

3.2. Анализ в заданном частотном диапазоне

Кроме анализа собственных частот, простую тестовую ячейку можно исследовать через анализ полной проводимости в заданном частотном диапазоне с помощью решателя *Study – Frequency response*. Анализ графика полной проводимости пе-

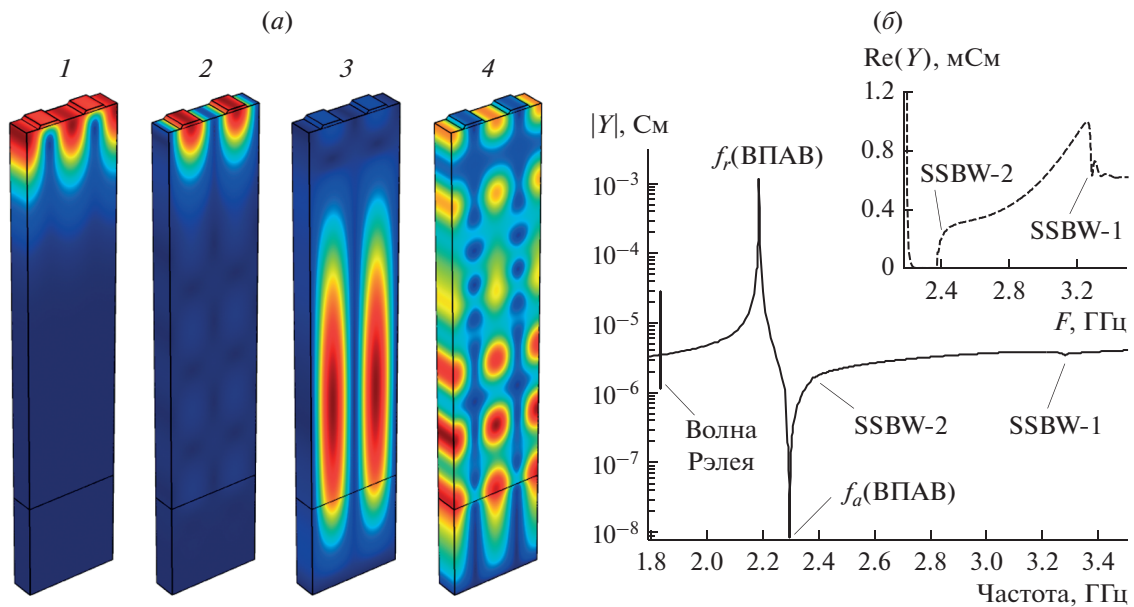


Рис. 3. Результаты анализа $64^\circ Y-X LiNbO_3$: *a* – анализ собственных частот в виде картин полного механического смещения для волны Рэлея (1), ВПАВ (2), моды SSBW-2 (3) и моды SSBW-1 (4); *б* – анализ в частотной области характеристики проводимости.

риодической тестовой структуры на примере подложки $64^\circ Y-X LiNbO_3$ (рис. 3б) показывает, что кроме основной моды – ВПАВ, в правой части частотной характеристики присутствует излучение ОАВ, а в левой – волна Рэлея. Излучение ОАВ ярко видно на вещественной части проводимости ($Re(Y)$). В данном случае, все дополнительные моды могут вносить искажения в частотную характеристику устройства. Процедура анализа и оценки влияния ОАВ может быть полезна для оптимизации параметров (например, выбора оптимальной толщины электродов) при минимальном излучении в объем кристалла для каждого конкретного среза материала. Причем анализ в области собственных частот и анализ характеристики проводимости, по сути, являются эквивалентны-

ми. Результаты анализа акустических мод по собственным частотам (рис. 3а) сведены в табл. 3, откуда видно, что результаты совпадают с данными, представленными на рис. 3б.

Также проводимость тестовой ячейки позволяет определить эффективный КЭМС. Для этого необходимо определить частоты резонанса (последовательный резонанс – f_r) и антирезонанса (параллельный резонанс – f_a) для выбранной акустической моды, в нашем случае это ВПАВ, тогда эффективный КЭМС (K^2) вычисляется как [23]:

$$K^2 = \frac{\pi f_r / (2f_a)}{\text{tg}(\pi f_r / (2f_a))}. \tag{10}$$

Процесс распространения ВПАВ сопровождается утечкой или рассеиванием волны в глубину

Таблица 3. Результат анализа скорости волн

Параметры тестовой ячейки	Собственные частоты и результаты анализа скорости волн				
	f_r , ГГц	f_a , ГГц	V , м/с	тип волны	рисунок
$64^\circ Y-X LiNbO_3$ $P = \lambda/2$ $H_m/\lambda = 3\%$ $K_m = 0.5$	1.8233	0	3658.9	Рэлея	Рис. 3а (1)
	1.8356	0			–
	2.1872	0.00029	4479.3	ВПАВ	Рис. 3а (2)
	2.2921	0.00249			–
	2.381	0.0022	4762	SSBW-2	Рис. 3а (3)
	2.381	0.0023			–
	3.2857	0.0097	6575	SSBW-1	Рис. 3а (4)
	3.2893	0.0174			–

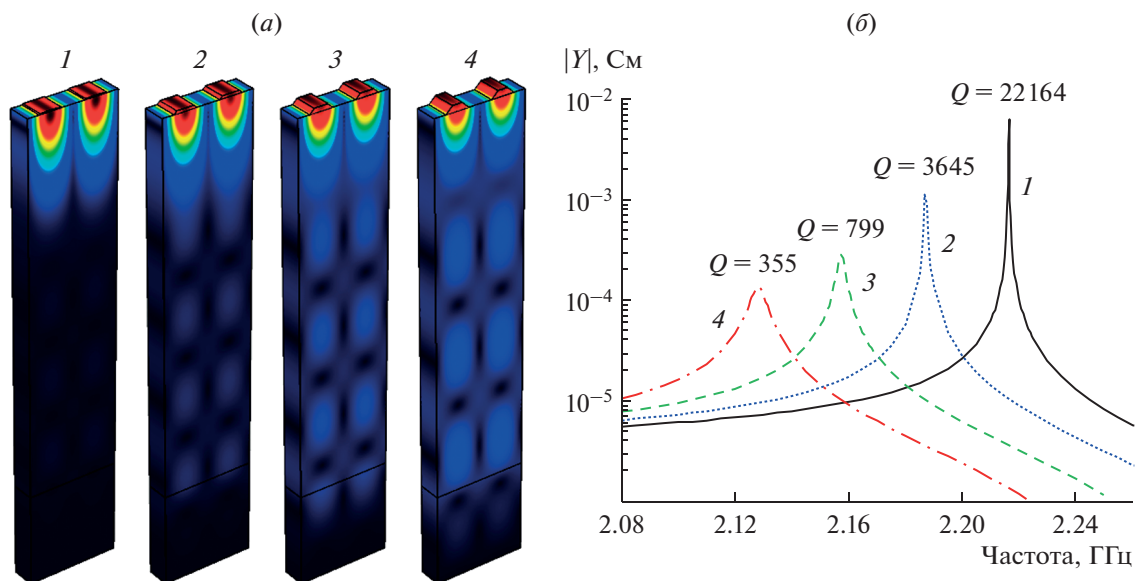


Рис. 4. $64^\circ Y-X \text{LiNbO}_3$. Картины механических смещений для ВПАВ (а) и соответствующие частотные зависимости модуля проводимости периодического преобразователя в окрестности частоты f_1 (б) различных значений H_m/λ : 1 – 1%, 2 – 3%, 3 – 5%, 4 – 7%.

подложки. Данные потери можно оценивать двумя способами: на основе анализа собственных частот (рис. 4а) и по частотной характеристике полной проводимости (рис. 4б). Получение частотных характеристик проводимости для всего возможного набора коэффициентов металлизации, толщин металлизации и профиля электродов требует большого времени расчета. Анализ собственных частот, который можно обеспечить для таких же конфигураций электродов может быть намного быстрее и эффективнее, поскольку необходимо знать минимальный набор собственных частот в исследуемой частотной окрестности.

Комплексные значения собственных частот позволяют определить добротность по простой формуле [24]:

$$Q = f_r / (2f_i), \quad (11)$$

где f_r – действительная часть собственного значения частоты, f_i – мнимая часть собственного значения частоты.

По анализу резонансного пика характеристики проводимости (рис. 4б) добротность определяется как

$$Q = f_r / \Delta f_{-3dB}, \quad (12)$$

где f_r – резонансная частота, Δf_{-3dB} – полоса характеристики по уровню -3 дБ.

В табл. 4 приведены сравнительные значения полученных двумя способами добротностей для различных относительных толщинах электродов. Как видно из таблицы, относительное расхождение значений добротности для относительной толщины электродов 3–7% не превышает 5%. Большое расхождение для толщины электродов 1% можно объяснить не достаточной точностью определения Q -фактора по узкому резонансному пику.

3.3. Практическое применение результатов анализа параметров

Практическая значимость состоит в использовании полученных параметров ПАВ при разработке

Таблица 4. Расчет добротности

H_m/λ , %	Анализ резонансных пиков по характеристике проводимости			Анализ собственных частот		
	f_r , ГГц	Δf_{-3dB} , МГц	Q	f_r , ГГц	f_i , МГц	Q
1	2.2164	0.100	22164	2.2164	0.02	55400
3	2.1872	0.6	3645	2.1872	0.2972	3600
5	2.1574	2.7	799	2.1574	1.3638	790
7	2.1283	6	355	2.1283	2.8388	374

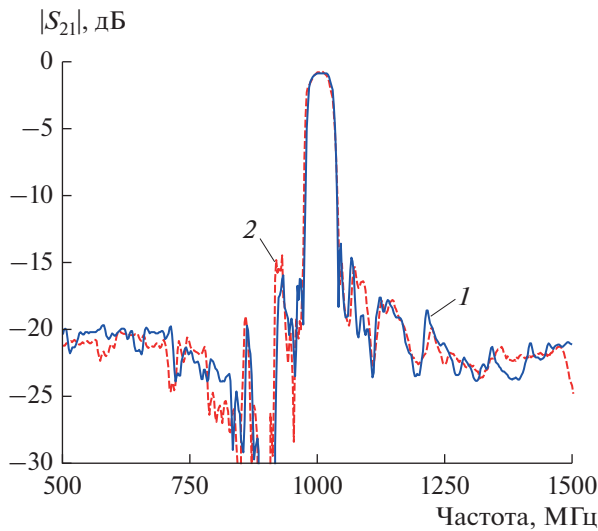


Рис. 5. Расчетная и экспериментальная АЧХ фильтра на ПАВ: 1 – расчет МСМ; 2 – эксперимент.

различных классов акустоэлектронных устройств. Данный подход позволяет получить все параметры ПАВ волны Рэлея и ВПАВ, необходимые для моделирования и предварительного расчета характери-

стик устройств с помощью популярного у разработчиков метода связанных мод [16]. Результаты расчетной и экспериментальной АЧХ резонаторного фильтра на продольных резонансных модах (в англ. литературе – это *dual-mode SAW filters (DMS)*) [25] на базе модели связанных мод и ее формализации на основе Р-матриц представлены на рис. 5. Как видно, расчет и эксперимент имеют хорошее совпадение.

4. РАСЧЕТ ПОЛНОГО УСТРОЙСТВА В ЧАСТОТНОЙ ОБЛАСТИ

Пакет COMSOL позволяет рассчитывать рабочие характеристики (проводимость, АЧХ и др.) устройства в целом. Геометрия линии задержки, которую необходимо рассчитать представлена (рис. 6а и рис. 6б). В данном случае требуется настройка электрических портов и их соответствующая коммутация (рис. 6б), чтобы получить полный набор Y-параметров ($Y_{11}, Y_{21}, Y_{12}, Y_{22}$) (рис. 7а), от которого по известным формулам [26] можно перейти к набору S-параметров, и, например, построить АЧХ линии задержки (рис. 7б). Результаты сравнения показывают хорошее совпадение расчетной и экспериментальной характеристики.

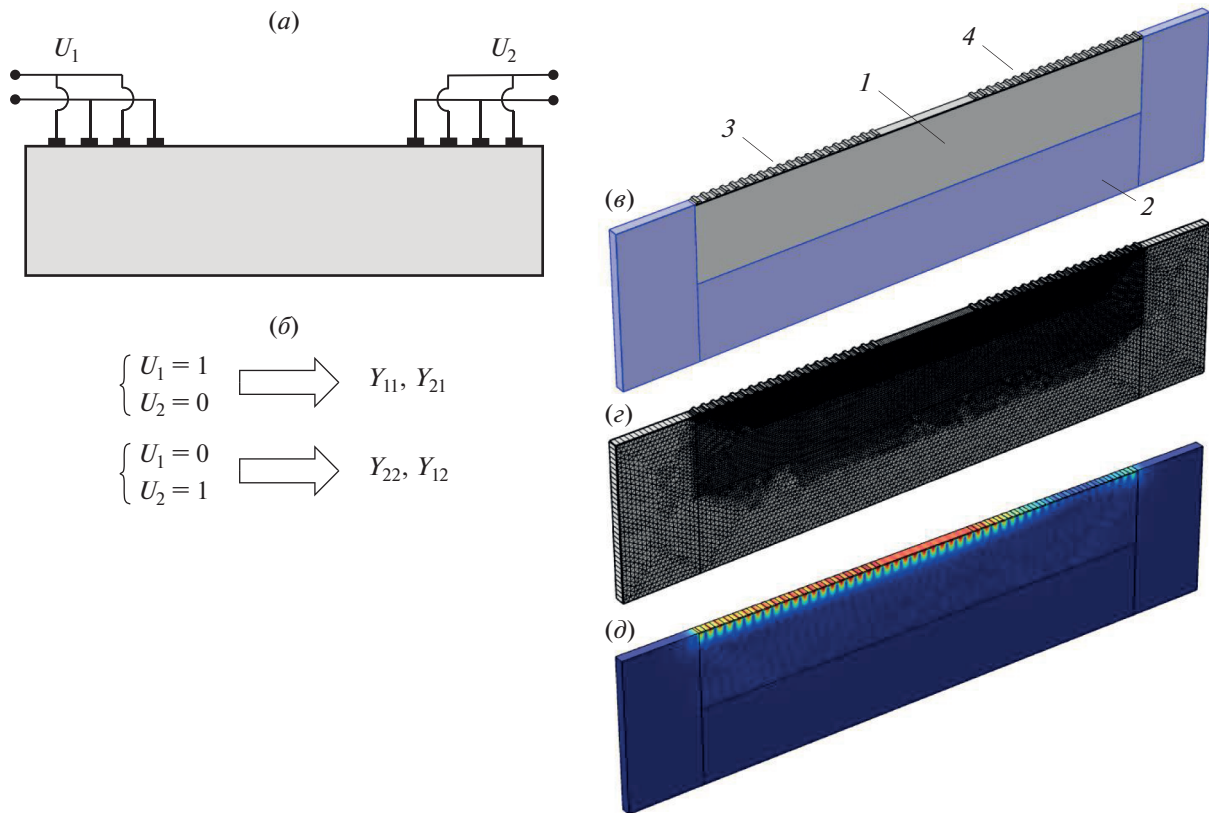


Рис. 6. Модель линии задержки для МКЭ-анализа в COMSOL: а – условный вид линии задержки с подключенными электрическими портами; б – принцип коммутации портов; в – геометрия; г – сетка; д – результаты расчета полного механического смещения для одной частотной точки. Особенности геометрии: 1 – пьезоэлектрический материал, 2 – идеально согласованный слой, 3 – электроды входного ВШП, 4 – электроды выходного ВШП.

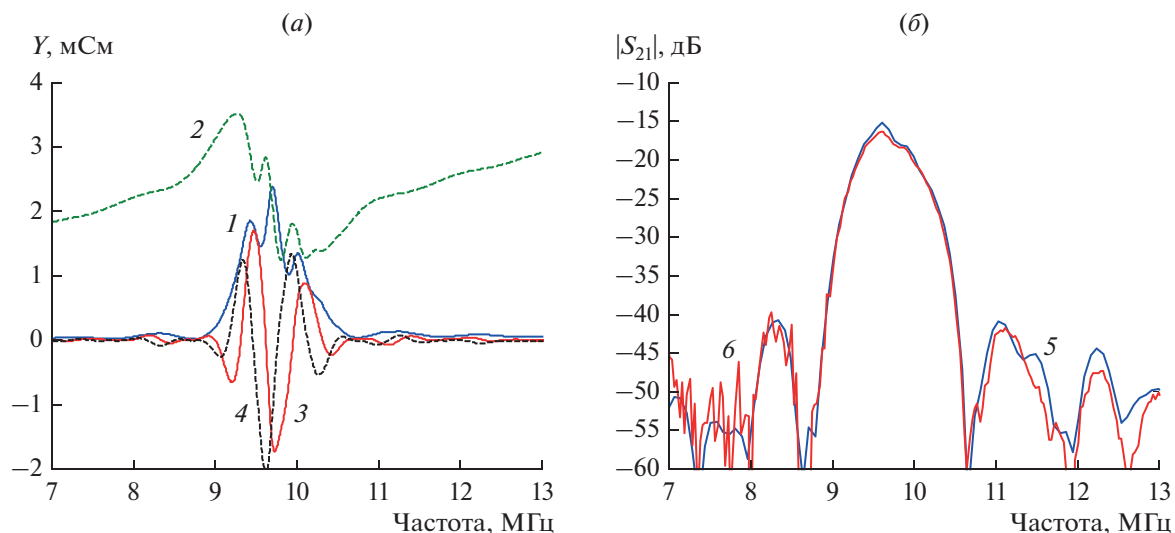


Рис. 7. Расчетные и экспериментальные характеристики линии задержки на ПАВ: (а) расчетная проводимость: 1 – $\text{Re}Y_{11}$, 2 – $\text{Im}Y_{11}$, 3 – $\text{Re}Y_{21}$, 4 – $\text{Im}Y_{21}$; (б) АЧХ: 5 – расчет МКЭ; 6 – эксперимент.

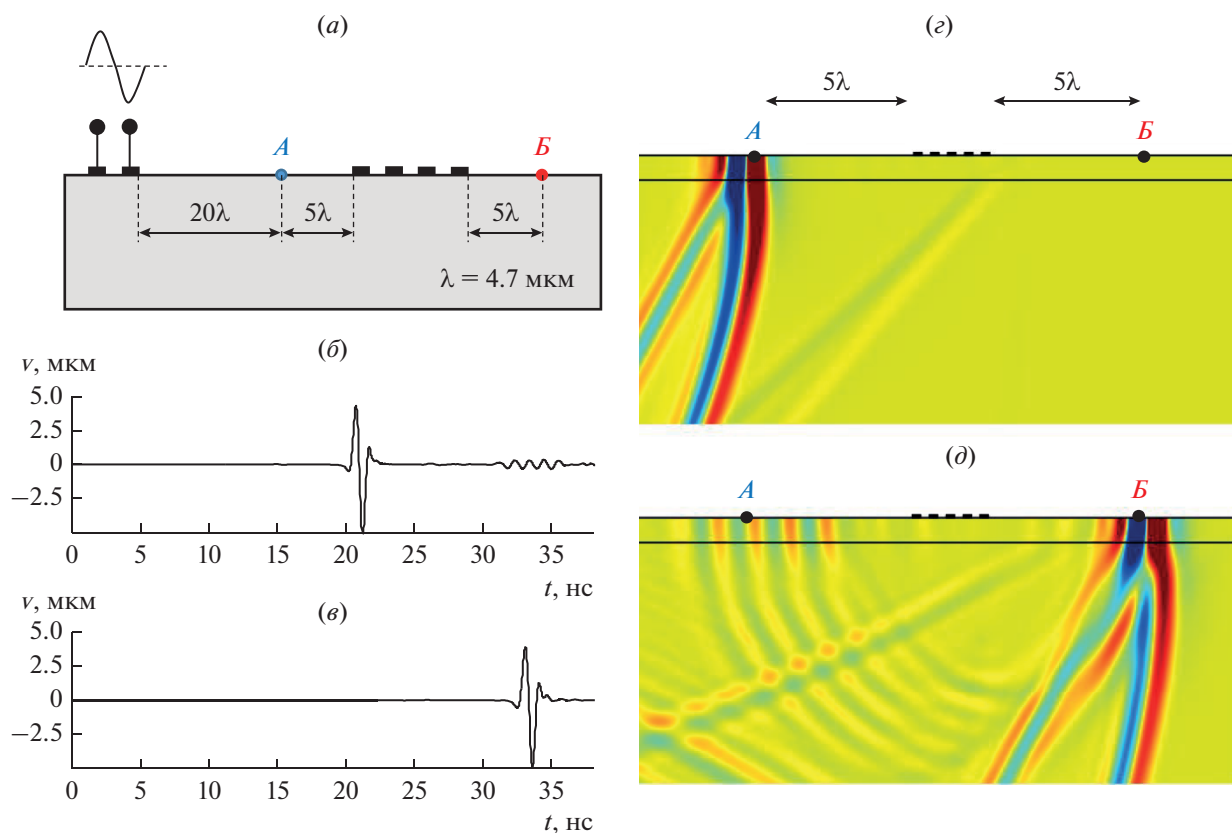


Рис. 8. Анализ во временной области для $64^\circ Y\text{-}X \text{LiNbO}_3$. а – геометрия тестовой ячейки; б – амплитуда поперечной компоненты (Y -компоненты) механического смещения в точке А; в – амплитуда Y -компоненты в точке В; г – распределение Y -компоненты в момент времени 21 нс; д – распределение Y -компоненты в момент времени 33 нс.

5. АНАЛИЗ ВО ВРЕМЕННОЙ ОБЛАСТИ

В пакете COMSOL возможно исследование волновых процессов и во временной области. Особенность данного подхода состоит в том, что мож-

но визуализировать акустические моды, которые возбуждаются в пьезоэлектрической подложке. Рассмотрим тестовую ячейку, представленную на рис. 8а. Для данного расчета в качестве источ-

ника сигнала используется одна пара ВШП, на вход которого подается короткий радиоимпульс (рис. 8а), вследствие чего возбуждается широкий спектр акустических мод, распространяющихся по подложке.

В результате входного воздействия в обе стороны от входного ВШП будут распространяться волновые пакеты. Нас интересует область распространения вправо от ВШП, где мы установим точки (А и Б) контроля/анализа амплитуды механического смещения. Также расположим на поверхности подложки группу металлических отражателей. Таким образом, мы сможем проконтролировать процесс распространения и отражения акустических волн. Как видно из рис. 8б в контролируемой точке А волна появляется два раза, первый раз примерно на 21 нс, когда ВПАВ распространяется от входного ВШП в сторону отражателей и второй раз – примерно 33 нс, когда волна частично отразится от группы металлических электродов. В точке Б волна появляется примерно через 33 нс от начала отсчета (см. рис. 8в). Распределение Y-компонент механического смещения в моменты времени 21 и 33 нс можно наблюдать на рис. 8г и рис. 8д соответственно. Некоторые искажения вносят объемные моды, отраженные от нижней границы исследуемого кристалла.

Используя данные характеристики во временной области можно оценивать параметры распространения волны (коэффициенты отражения, прохождения, рассеивание в объем подложки) по методике, предложенной в литературе [27]. Кроме того, исследуя каждую компоненту механического смещения акустической моды, можно оценить поляризацию волны, как это показано в [4].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный анализ показывает, что для моделирования волновых процессов и анализа рабочих характеристик устройств на ПАВ вполне подходит программный пакет COMSOL Multiphysics, в котором применяется МКЭ. Пакет COMSOL позволяет эффективно использовать встроенные модули для решения различных физических задач и широко используется на практике. Работа в трех основных режимах: области собственных частот, временной анализ и анализ в частотной области позволяет эффективно решать ряд прикладных задач как по анализу параметров акустических волн в пьезоэлектрической подложке (скорость, КЭМС и др.), так и по анализу характеристик устройств (проводимость, коэффициент передачи). Учет множества параметров при 3-D моделировании реальных полноапертурных устройств приводит к резкому росту требований к вычислительным ресурсам и увеличению времени анализа, но этот недостаток компенсируется высокой точностью расчета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Григорьев Д.М., Годовицын И.В., Амеличев В.В., Генералов С.С. Расчет АЧХ МЭМС-микрофона с помощью конечно-элементного моделирования // Микроэлектроника. 2018. Т. 47. № 3. С. 238–243.
2. Коротков А.С., Лобода В.В., Макаров С.Б., Фельдхофф А. Моделирование термоэлектрических генераторов с использованием программной платформы ANSYS: методики, практические приложения, перспективы // Микроэлектроника. 2017. Т. 46. № 2. С. 142–150.
3. Lagosh A.V., Broyko A.P., Kalyonov V.E., Khmelniitskiy I.K., Luchinin V.V. Modeling of IPMC actuator // 2017 IEEE Conference of Russian Young Researches in Electrical and Engineering (ElConRus). 2017. P. 916–918.
4. Sveshnikov B., Koigerov A., Yankin S. Unveiling the polarization of the multimode acoustic fields // Ultrasonics. 2018. V. 82. P. 209–216.
5. Койгеров А.С., Балышева О.Л. Численный анализ параметров псевдоповерхностных акустических волн в кристаллах ниобата лития и танталата лития // РЭ. 2021. Т. 66. № 12. С. 1224–1232.
6. Реут В.Р., Койгеров А.С., Андрейчев С.С., Дорохов С.П., Салов А.С. Новая конструкция многоканальной ПАВ-радиометки на основе многополоскового ответвителя // Нано- и микросистемная техника. 2019. Т. 21. № 10. С. 579–593.
7. Койгеров А.С. Лестничные фильтры на вытекающих поверхностных акустических волнах на подложке ниобата лития // Нано- и микросистемная техника. 2021. Т. 23. № 3. С. 139–147.
8. Аристархов Г.М., Гуляев Ю.В., Дмитриев В.Ф. и др. Фильтрация и спектральный анализ радиосигналов. Алгоритмы. Структуры. Устройства. М.: Радиотехника. 2020. 504 с.
9. Викторов И.А. Звуковые поверхностные волны в твердых телах. М.: Наука. 1981. 287 с.
10. Дьельсеан Э., Руайе Д. Упругие волны в твердых телах. Применение для обработки сигналов. Пер. с франц. / Под ред. Леманова В.В. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. 1982. 424 с.
11. Kannan T. Finite Element Analysis of Surface Acoustic Wave Resonators. Master Thesis. University of Saskatchewan. 2006.
12. Tikka A., Al-Sarawi S., Abbott D. Acoustic Wave Parameter Extraction with Application to Delay Line Modelling Using Finite Element Analysis // Sensors & Transducers Journal. 2008. V. 95. № 8. P. 26–39.
13. Ke H., Shan Q., Qin P. SAW Resonator with Grooves for High Temperature Sensing Application // 2019 IEEE International Ultrasonics Symposium (IUS). 2019. P. 2549–2552.
14. Zhang Y., Jin J., Li H. et al. A novel method to extract COM parameters for SAW based on FEM // 2019 13th Symposium on Piezoelectricity, Acoustic Waves and Device Applications (SPAWDA). 2019. P. 1–5.
15. Осетров А.В., Нгуен В.Ш. Расчет параметров поверхностных акустических волн в пьезоэлектриках методом конечных элементов // Вычислительная механика сплошных сред. 2011. Т. 4. № 4. С. 71–80.

16. *Дмитриев В.Ф.* Теория связанных волн – универсальный метод расчета устройств на поверхностных акустических волнах // *ЖТФ*. 2004. Т. 74. № 10. С. 94–102.
17. *Бальшева О.Л. и др.* Акустоэлектронные устройства обработки и генерации сигналов. Принципы работы, расчета и проектирования принципы работы, расчета и проектирования / под ред. Гуляева Ю.В. М.: Радиотехника. 2012. 576 с.
18. *Morgan D.* Surface Acoustic Wave Filters With Applications to Electronic Communications and Signal Processing. Academic Press. London. 2010. 448 p.
19. *Kovacs G., Anhorn M., Engan H. et al.* Improved Material Constants for LiNbO_3 and LiTaO_3 // Proc. 1990 IEEE Ultrason. Symp. Honolulu. Hawaii. Dec. 1990. V. 1. P. 435–438.
20. *Yantchev V., Turner P., Plessky V.* COMSOL modeling of SAW resonators // Proc. IEEE Ultrason. Symp. 2016. P. 1–4.
21. *Koskela J., Plessky V.P., Salomaa M.M.* SAW/LSAW COM parameter extraction from computer experiments with harmonic admittance of a periodic array of electrodes // in IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. July 1999. V. 46. № 4. P. 806–816.
<https://doi.org/10.1109/58.775644>
22. *Qiao D., Liu W., Smith P.M.* General Green's functions for SAW device analysis // IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control. Sept. 1999. V. 46. №. 5. P. 1242–1253.
23. *Koigerov A.S., Balysheva O.L.* Numerical Approach for Extraction COM Surface Acoustic Wave Parameters from Periodic Structures Analysis // Wave Electronics and its Application in Information and Telecommunication Systems (WECONF). 2021. P. 1–6.
24. *Shen J. et al.* 3D Layout of Interdigital Transducers for High Frequency Surface Acoustic Wave Devices // in IEEE Acces. 2020. V. 8. P. 123262–123271.
25. *Morita T., Watanabe Y., Tanaka M., Nakazawa Y.* Wideband low loss double mode SAW filters // IEEE 1992 Ultrasonics Symposium Proceedings. 1992. V. 1. P. 95–104.
26. *Hong J., Lancaster M.J.* Microstrip Filters for RF/Microwave Applications. John Wiley & Sons. Inc. 2001. 457 p.
27. *Graczykowski B.* The reflection of Rayleigh surface waves from single steps and grooves // J. Appl. Phys. 112 (2012) 103520.

ФОРМИРОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР НА ПОВЕРХНОСТИ КРЕМНИЯ КОМБИНАЦИЕЙ МЕТОДОВ ФОКУСИРОВАННЫХ ИОННЫХ ПУЧКОВ И ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ

© 2022 г. В. С. Климин^а, Ю. В. Морозова^а, *, И. Н. Коц^а, З. Е. Вакулов^б, О. А. Агеев^а

^аИнститут нанотехнологий, электроники и приборостроения,
Южный федеральный университет, ул. Шевченко, 2, Таганрог, 347928 Россия

^бФедеральный исследовательский центр Южный научный центр
Российской академии наук, пр. Чехова, 41, Ростов-на-Дону, 344006 Россия

*E-mail: ulamrzv@gmail.com

Поступила в редакцию 10.11.2021 г.

После доработки 10.01.2022 г.

Принята к публикации 11.01.2022 г.

Целью данной работы является исследование режимов и определение закономерностей плазмохимической обработки во фторидной плазме поверхности кремния, локально модифицированной ионами галлия. Проведены экспериментальные и теоретические исследования взаимодействия поверхности кремниевых пластин с фокусированными ионными пучками и фторидной плазмой. Определены общие закономерности влияния режимов ФИП и ПХТ на скорость травления, шероховатость поверхности и угол наклона стенок структур, установлено проявление эффектов активации и маскирования при плазмохимическом травлении поверхности кремния, локально модифицированной фокусированными ионными пучками. Установлено, что при проявлении эффекта маскирования селективность составила 195.26, скорость формирования структур комбинацией методов ФИП и ПХТ составила 3.23 нм/с.

Ключевые слова: нанотехнологии, наноразмерные структуры, наноразмерное профилирование, плазмохимическое травление, низкотемпературная плазма, фокусированные ионные пучки, кремний

DOI: 10.31857/S0544126922030061

1. ВВЕДЕНИЕ

Современные темпы развития электроники приводят к ужесточению требований к прецизионным методам формирования элементов микро- и нанoeлектроники. В связи с этим исследования и разработки новых методов наноразмерного профилирования является актуальной задачей [1–8].

Одними из наиболее перспективных являются методы, основанные на использовании потоков ионов высоких энергий, среди которых выделяются методы фокусированных ионных пучков (ФИП) [9–12] и плазмохимического травления (ПХТ) [13–16]. Метод ФИП основан на прецизионном воздействии на поверхность подложки пучком ионов, что позволяет модифицировать приповерхностную область с нанометровым разрешением. Достоинствами метода ПХТ являются: высокая разрешающая способность, минимальный эффект бокового подтравливания и высокая производительность [17–20].

Комбинация этих методов представляется перспективной для повышения эффективности формирования наноразмерных структур, однако для выяв-

ления общих закономерностей происходящих при этом процессов необходимо проведение дополнительных исследований.

Целью работы является исследование режимов и определение закономерностей плазмохимической обработки во фторидной плазме поверхности кремния, локально модифицированной ионами галлия.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

При проведении экспериментальных исследований были использованы пластины n-Si (100), с удельным сопротивлением 0.001–0.005 Ом/см.

Подложки проходили химическую очистку в ацетоне и изопропиловом спирте при температуре 70°C в течение 10 мин и выдержку в водном растворе HF (10%) в течение 30 с, после которой на их поверхности методом фотолитографии локально формировалось маскирующее покрытие из плазмостойкого фоторезиста SPR-220.

Локальная модификация методом ФИП проводилась на растровом электронном микроскопе

Таблица 1. Режимы экспериментальных исследований

Этап	Локальная модификация				Плазмохимическая обработка						
	$U_{ус}$, кВ	$I_{ип}$, пА	n	D , пКл/мкм ²	N_{SF_6} , см ³ /мин	N_{Ar} , см ³ /мин	P , Па	$W_{исп}$, Вт	$W_{есп}$, Вт	$U_{см}$, В	t , с
1 этап	—	—	—	—	15	100	2	250	35	24	15–120
2 этап	30	10	10–100	2.5–25	15	100	2	250	35	24	15–120
3 этап	10–30	10	50	12.5	15	100	2	250	35	24	15–60

Примечание N_{SF_6} – поток гексофторида серы, N_{Ar} – поток аргона, P – давление в реакторе, $W_{исп}$ – мощность источника индуктивно-связанной плазмы, $W_{есп}$ – мощность источника емкостной плазмы, $U_{см}$ – напряжение смещения, t – время плазмохимической обработки, $U_{ус}$ – ускоряющее напряжение ФИП, $I_{ип}$ – ток ионного пучка, D – доза, n – количество проходов ионного пучка.

(РЭМ) NovaNanoLab 600 с ионной колонной (FEI, Нидерланды), плазмохимическое травление проводилась на установке STE ICPe 68 (ЗАО “НТО”, г. Санкт-Петербург), позволяющей проводить обработку в комбинированном разряде емкостной и индуктивно-связанной плазмы, исследование морфологии полученных структур проводилось методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) на зондовой нанолаборатории NtegraVita (ЗАО “НТ-МДТ”, Россия).

Плазмохимическая обработка поверхности проводилась во фторидной плазме, формируемой разложением гексофторида серы (SF₆), так как основными активными частицами при травлении кремния являются атомы фтора и частично радикалы SF₅. В хлоридной плазме травление происходит только за счет ионной бомбардировки и как следствие, при низких скоростях травления наблюдается высокая анизотропия. При плазмохимическом травлении в хлор-фторидной плазме скорость травления увеличивается за счет бомбардировки атомами фтора, при этом сохраняется высокая анизотропия за счет пассивации хлором [21, 22].

Экспериментальные исследования плазмохимической обработки во фторидной плазме поверхности кремния, локально модифицированной ионами Ga⁺ проводились в три этапа, режимы которых были выбраны на основе исследований, проведенных нами ранее [11, 23] и представлены в табл. 1.

На первом этапе формировались контрольные образцы и проведены исследования по определению закономерностей влияния времени плазмохимического травления на толщину вытравленного слоя и шероховатость поверхности подложек после.

На втором этапе проведены исследования по определению закономерностей плазмохимического травления областей, предварительно модифицированных фокусированным пучком ионов Ga⁺, в частности определялось влияние времени полученных плазмохимического травления на высоту и угол наклона стенок структур.

На третьем этапе проведены исследования по определению зависимостей высоты полученных

структур от ускоряющего напряжения ионного пучка.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены результаты экспериментальных исследований на первом этапе, отражающие влияние времени обработки во фторидной плазме на толщину вытравленного слоя кремния и шероховатость поверхности.

Анализ показал, что при заданных режимах зависимость толщины вытравленного слоя от времени имеет линейный характер, при этом скорость травления кремния составляет 3.71 нм/с. При увеличении длительности плазмохимической обработки шероховатость поверхности возрастает, при этом, для структур глубиной 110.5 нм шероховатость составляет 2.31 нм, а для структур глубиной 337.7–5.27 нм.

Полученные результаты были использованы на втором и третьем этапах исследований, при оценке скорости травления структур после применения комбинации методов ФИП и ПХТ.

На рис. 2 представлены полученные на втором этапе исследований АСМ и РЭМ-изображения локально-модифицированных методом ФИП областей до плазмохимической обработки.

Представленные результаты демонстрируют, что при выбранных режимах обработки методом ФИП (табл. 1) в приповерхностном слое подложки кремния процессы внедрения ионов галлия, аморфизации и дефектообразования преобладают над процессами ионного травления.

Дальнейшие экспериментальные исследования на втором этапе показали, что в зависимости от сочетания режимов ФИП и ПХТ проявляются два эффекта:

- активация ПХТ травления подложки;
- маскирование поверхности подложки при ПХТ.

На рис. 3 представлено РЭМ и АСМ – изображения поверхности образцов с модифицированными областями после ПХТ травления: при дозе воздей-

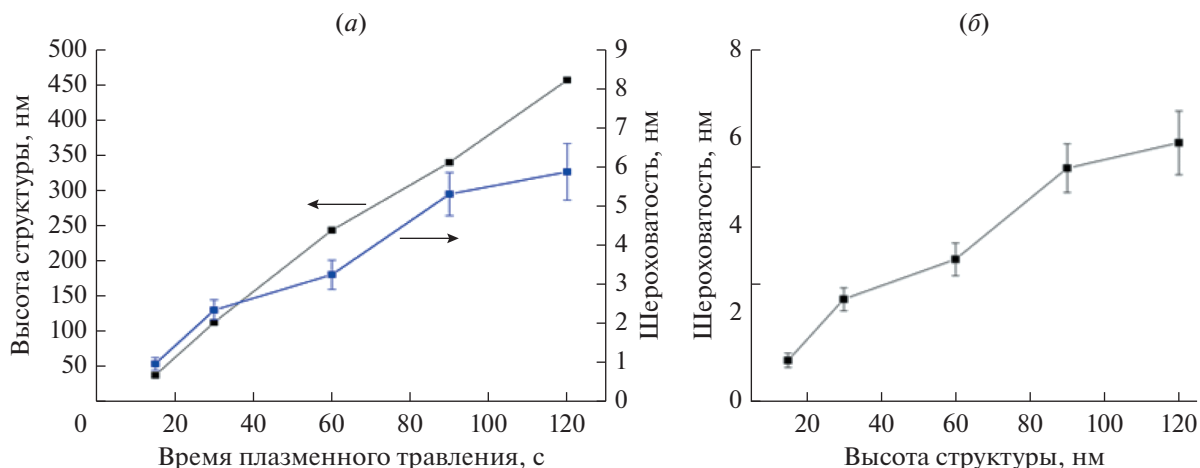


Рис. 1. Зависимости толщины вытравленного слоя кремния и шероховатости поверхности от времени плазмохимического травления (а) и шероховатости поверхности от толщины вытравленного слоя кремния (б).

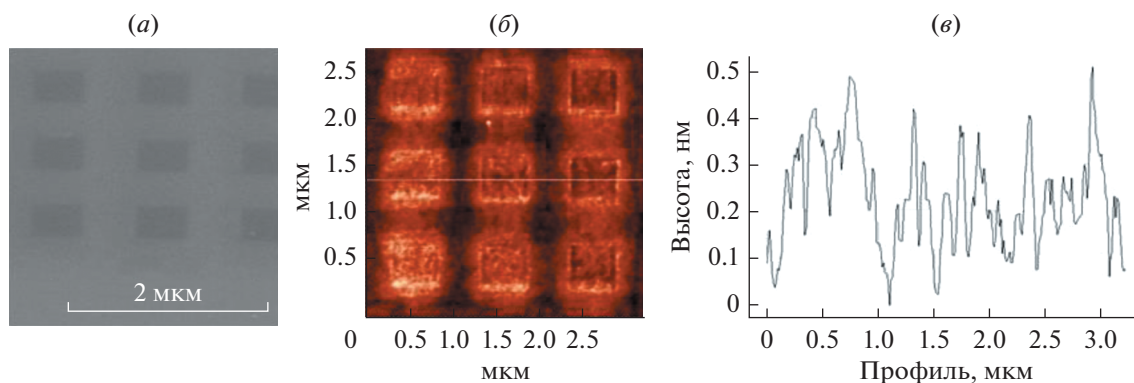


Рис. 2. Локально-модифицированные методом ФИП области: РЭМ-изображение (а), АСМ-изображение (б), профиллограмма (в).

ствия ионного пучка 5 пКл/мкм^2 , после плазмохимической обработки в течение 30 с (4а, б); при дозе воздействия ионного пучка 25 пКл/мкм^2 , после плазмохимической обработки в течении 120 с (4в, г).

Активация. На рис. 4 представлены зависимости высоты и шероховатости поверхности локальных структур от количества проходов ионного пучка и дозы облучения при времени плазмохимического травления 30 с.

Анализ показывает наличие участков с “отрицательной” высотой структур, формируемых при количестве проходов до 40 (соответствует дозе до 10 пКл/мкм^2). Сопоставление результатов с данными, представленными на рис. 1 позволяет оценить для этого участка скорости травления и селективность (3.92 и 0.948 нм/с соответственно). Полученные результаты (рис. 3а, 3б и рис. 4) отражают проявление эффекта активации процесса плазмохимического травления в локально-модифицированной области, за счет формирования ра-

диационных дефектов в приповерхностном слое при ионно-лучевом воздействии.

Для оценки глубины проникновения ионов в кремнии, с помощью программного пакета SRIM, методом стохастического моделирования Монте-Карло было проведено моделирование, результаты которого представлены на рис. 5.

При расчете глубины нарушенного слоя учитывалось, что он составляет 65% от среднего проективного пробега, согласно [24].

Результаты расчетов (рис. 5) позволяют характеризовать дефектообразование в приповерхностной области подложки кремния после обработки ионным пучком методом ФИП – оценить глубину максимальной концентрации внедренных ионов галлия и толщину нарушенного слоя.

Маскирование. Наличие на рис. 4 участка с “положительной” высотой структур (количество проходов более 40, что соответствует дозе более 10 пКл/мкм^2) и характер структур на рис. 3в, 3г

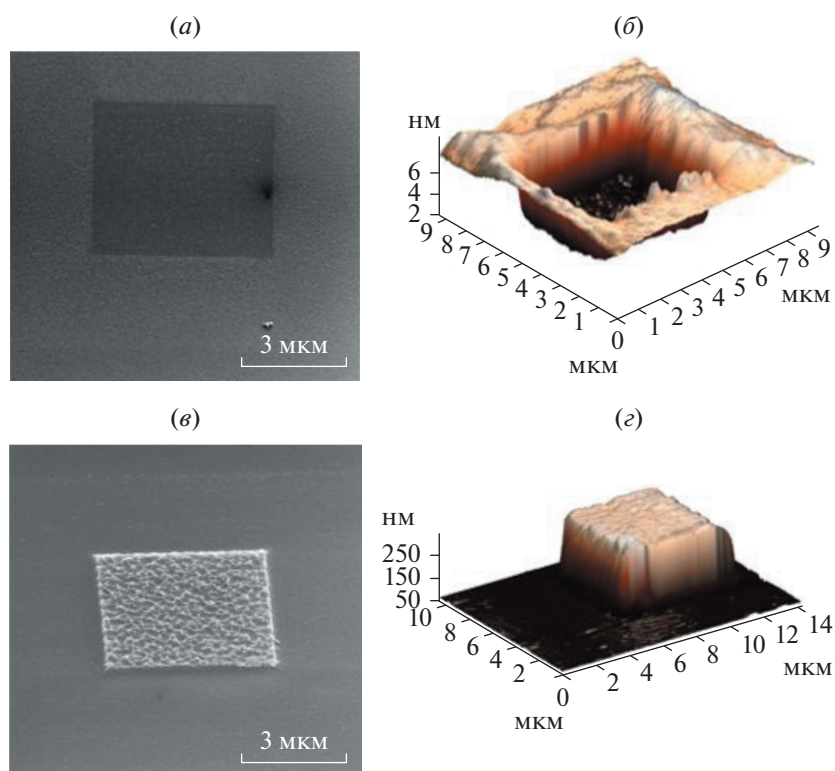


Рис. 3. Структуры, полученные плазмохимическим травлением локально-модифицированных областей: (а, в) РЭМ-изображение; (б, г) АСМ-изображение.

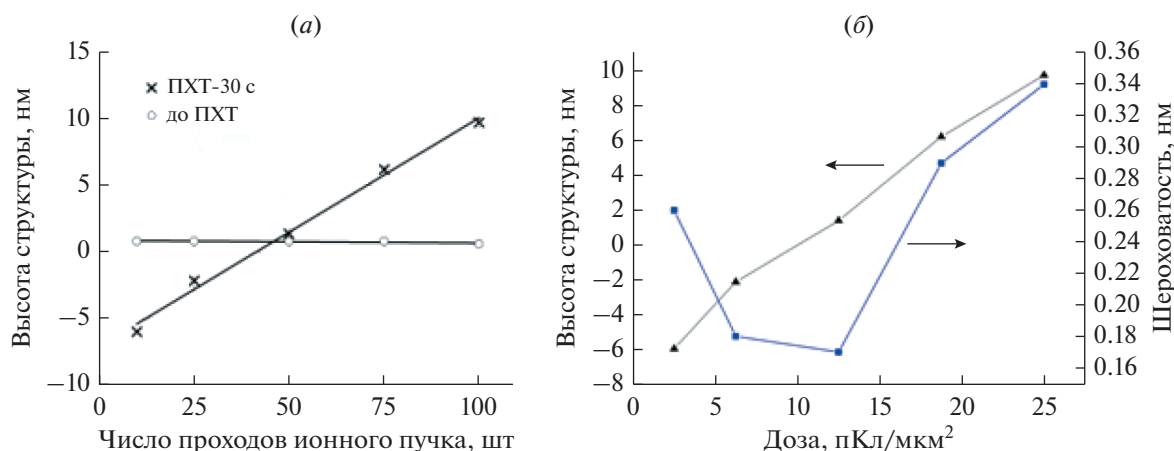


Рис. 4. Зависимости высоты структур и шероховатости от количества проходов (а) и дозы облучения ФИП (б) при времени плазмохимического травления 30 с.

отражает проявление эффекта маскирования в локально-модифицированной области при ПХТ, который можно объяснить формированием слоя с внедренными ионами галлия при ионно-лучевом воздействии (рис. 5), который химически инертен для ионов фторсодержащего газа, формируемых при плазмохимическом травлении при данных режимах. Маскирующая область (рис. 3в, г) имеет более развитый рельеф поверхности (шерохова-

тость 13.7 нм), по отношению к окружающей области (шероховатость 2.5 нм), что связано с преобладанием физической компоненты при реактивном ионном травлении.

Зависимости, представленные на рис. 6 показывают, что при времени ПХТ травления 120 с в локально-модифицированной области нарушенный слой травится полностью, а оставшийся слой

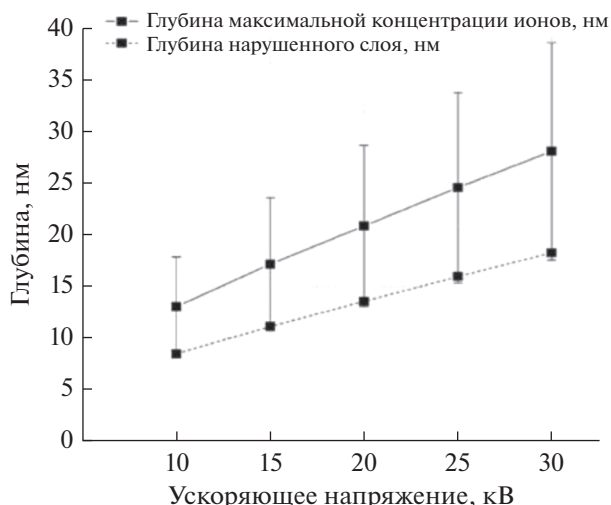


Рис. 5. Зависимости глубины максимальной концентрации ионов и толщины нарушенного слоя от ускоряющего напряжения.

с внедренными ионами галлия выступает в качестве маскирующего. Сравнение с результатами, полученными на контрольном образце (рис. 1), позволяет оценить параметры плазмохимического травления. Так, при дозе облучения 18.75 пКл/мкм² скорость плазмохимического травления слоя с внедренными ионами составила 0.019 нм/с, при этом селективность травления составила 195.26.

Схематическое изображение эффектов активации и маскирования, наблюдавшихся на поверхности кремниевых подложек при комбинации методов фокусированных ионных пучков и плазмохимического травления во фторидной плазме при исследуемых режимах, представлено на рис. 7.

При формировании наноразмерных структур элементов микро- и нанoeлектроники важным параметром является угол наклона стенки структур, характеризующий растравливание и, в конечном итоге, разрешение метода [3, 4, 25].

В данном исследовании, в результате анализа методами АСМ параметров структур с эффектом маскирования, были получены зависимости высоты и угла наклона стенок структур от времени плазмохимической обработки (рис. 8а). Локальная модификация областей 5 × 5 мкм фокусированным пучком ионов осуществлялась при количестве проходов пучка 50, с дозой 12.5 пКл/мкм², токе ионного пучка 10 пА, ускоряющем напряжении 30 кэВ.

Из рис. 8а, с использованием результатов первого этапа исследований можно определить скорость травления структур при данных режимах, которая составляет 3.23 нм/с и коррелирует со значением скорости травления немодифицированных (рис. 1) областей с учетом толщины нарушенного слоя и слоя с внедренными ионами галлия (рис. 5).

Полученные зависимости (рис. 8а) количественно характеризуют известный эффект растравливания при травлении локально неоднородных поверхностей, применительно к структурам и режимам наших экспериментальных исследований [20–23].

Экспериментальные исследования на третьем этапе позволили выявить зависимости высоты полученных структур от ускоряющего напряжения ионного пучка, одного из основных параметров при локальной модификации методом ФИП.

Результаты анализа параметров структур, полученных с эффектом маскирования, позволили выявить зависимости высоты структур от ускоряющего напряжения ионного пучка, при различном времени плазмохимического травления (рис. 9).

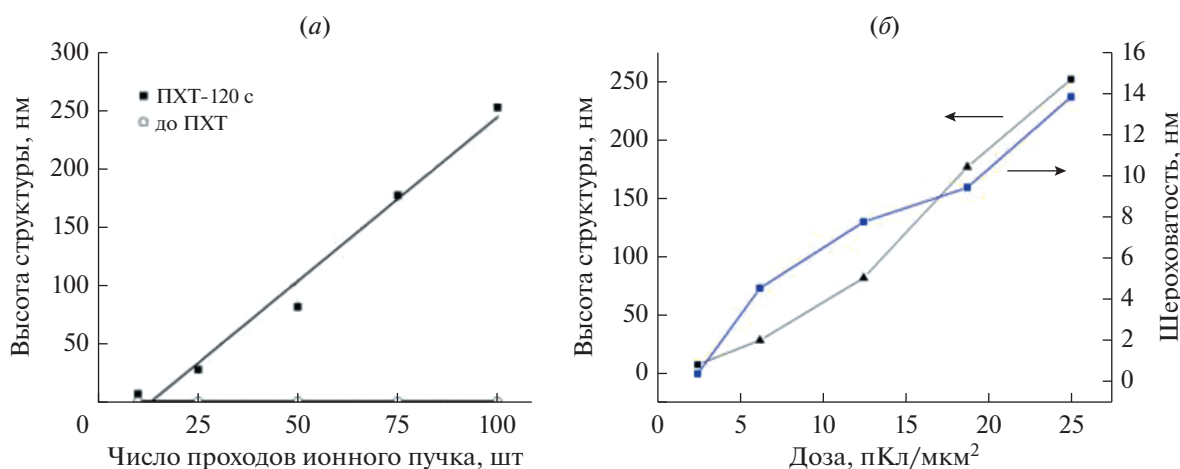


Рис. 6. Зависимости высоты и шероховатости структур от количества проходов (а) и дозы облучения ФИП (б) при времени плазмохимического травления 120 с.

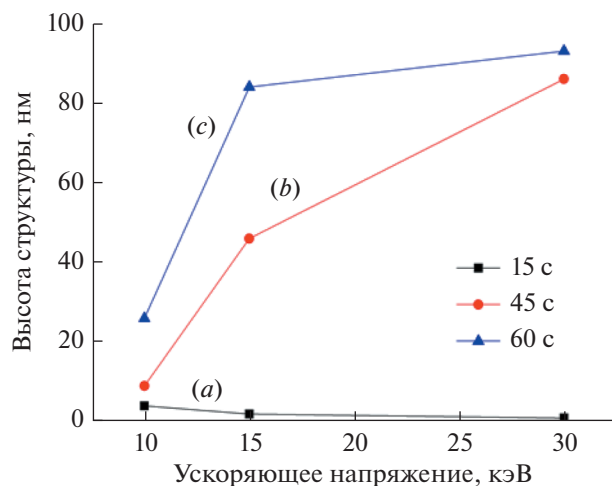


Рис. 9. Зависимости высоты структур от ускоряющего напряжения ионного пучка при различных временах плазмохимического травления.

режимов ФИП и ПХТ. Определены общие закономерности влияния режимов ФИП и ПХТ на скорость травления, шероховатость поверхности и угол наклона стенок структур. В результате экспериментальных исследований установлено проявление эффектов активации и маскирования при плазмохимическом травлении поверхности кремния, локально модифицированной фокусированными ионными пучками. Определены общие закономерности плазмохимической обработки локально-модифицированных методом ФИП областей на подложке кремния. Установлено, что при проявлении эффекта маскирования селективность составила 195.26. Скорость формирования структур комбинацией методов ФИП и ПХТ составила 3.23 нм/с, что коррелирует со скоростями травления немодифицированных областей, с учетом толщины нарушенного слоя и слоя с внедренными ионами галлия. Представленные результаты могут быть использованы при разработке технологии изготовления приборных структур микро- и нанoeлектроники по самосовмещенной технологии.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 20-69-46076). Результаты получены с использованием инфраструктуры Научно-образовательного центра “Нанотехнологии” Южного федерального университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Giannuzzi L.A., Stevie F.A.* Introduction to focused ion beams: instrumentation, theory, techniques and practice. N.Y.: Springer, 2004. P. 357.
2. *Лучинин В.В.* Нанотехнологии: физика, процессы, диагностика, приборы. М: Физматлит, 2006. 552 с.

3. Нанотехнологии в микроэлектронике. Под ред. Агеева О.А., Коноплёва Б.Г. М.: Наука, 2019. 511 с. ISBN 978-5-02-040201-0
4. *Bhushan B.* Springer Handbook of Nanotechnology (3rd edition) / Ed. by Bharat Bhushan. N.Y.: Springer, 2010. № 1964.
5. *Colligon J.S.* Energetic condensation Processes, properties, and products // J. Vac. Sci. Technol. A. 1995. V. 13. № 3. P. 1649–1657.
6. *Vakulov Z., Khakhulin D., Geldash A., Tominov R.V., Klimin V.S., Smirnov V.A., Ageev O.A.* Impact of laser pulse repetition frequency on nucleation and growth of LiNbO₃ thin films // J. Advanced Dielectrics. 2021. № 2160019.
7. *Vakulov Z., Geldash A., Khakhulin D., Il'ina M.V., Il'in O.I., Klimin V.S., Dzhuplin V.N., Konoplev B.G., He Z., Ageev O.A.* Piezoelectric energy harvester based on LiNbO₃ thin films // Materials. 2020. V. 13(18). № 3984.
8. *Vakulov Z., Khakhulin D., Zamburg E., Mikhaylichenko A., Smirnov V.S., Tominov R.V., Klimin V.A., Ageev O.A.* Towards scalable large-area pulsed laser deposition // Materials. 2021. V. 14(17). № 3984.
9. *Salvati E., Brandt L.R., Papadaki C., Zhang H., Mousavi S.M., Wermeille D., Korsunsky A.M.* Nanoscale structural damage due to focused ion beam milling of silicon with Ga ions // Mater. Lett. 2018. V. 213. P. 346–349.
10. *Korsunsky A.M., Guérolé J., Salvati E., Sui T., Mousavi M., Prakash A., Bitzek E.* Quantifying eigenstrain distributions induced by focused ion beam damage in silicon // Mater. Lett. 2016. V. 185. P. 47–49.
11. *Kots I.N., Kolomiitsev A.S., Lisitsyn S.A., Polyakova V.V., Klimin V.S., Ageev O.A.* Studying the Regimes of Silicon Surface Profiling by Focused Ion Beams // Russian Microelectronics. 2019. V. 48. № 2. P. 72–79.
12. *Lisitsyn S.A., Balakirev S.V., Avilov V.I., Kolomiitsev A.S., Klimin V.S., Solodovnik M.S., Konoplev B.G., Ageev O.A.* Study of Nanoscale Profiling Modes of GaAs Epitaxial Structures by Focused Ion Beams // Nanotechnologies in Russia. 2018. V. 13. № 1–2. P. 26–33.
13. *Hwanyeol Park, Ho Jun Kim.* Theoretical Analysis of Si₂H₆ Adsorption on Hydrogenated Silicon Surfaces for Fast Deposition Using Intermediate Pressure SiH₄ Capacitively Coupled Plasma // Coatings. 2021. V. 11(9). № 1041.
14. *Yong-Hyun K., Ji-Ho C., Jong-Sik K., Jong-Bae P., Dae-Chul K., Young-Woo K.* Comprehensive Data Collection Device for Plasma Equipment Intelligence Studies // Coatings. 2021. V. 11(9). № 1025.
15. *Zeze D., Forrest R., Carey J., Cox D., Robertson I., Weiss B.* Ion etching of quartz and Pyrex for microelectronic application // J. Applied Physics – October. 2002. V. 92. P. 3624–3629.
16. *Winkler T., Kirchhoff V., Goedicke K.* Requirements of new pulse power-supplies regarding reactive sputtering processes and adjustment of layer properties. Presentation at European Workshop on Pulsed Plasma Surface Technologies. Dresden. Germany, 2002.
17. *Han C.F., Lin C.C., Lin J.F.* Applications of energy flux and numerical analyses to the plasma etching of silicon deep trench isolation (DTI) structures // Precision Engineering. 2021. V. 71. P. 141–152.

18. *Alvarez H.S., Cioldin F.H., Silva A.R., Espínola L.C.J., Vaz A.R., Diniz J.A.* Silicon Micro-Channel Definition via ICP-RIE Plasma Etching Process Using Different Aluminum Hardmasks // *J. Microelectromechanical Systems*. 2021. V. 30. № 9459194. P. 668–674.
19. *Gusmão Cacho M.G., Benotmane K., Pimenta-Barros P., Tiron R., Possémé N.* Selective plasma etching of silicon-containing high chi block copolymer for directed self-assembly (DSA) application // *J. Vacuum Science and Technology B: Nanotechnology and Microelectronics*. 2021. V. 39(41). № 042801.
20. *Choi J.H., Yoon J., Jung Y., Im W.B., Kim H.-J.* Analysis of plasma etching resistance for commercial quartz glasses used in semiconductor apparatus in fluorocarbon plasma // *Materials Chemistry and Physics*. 2021. V. 2721. № 125015.
21. *Соловецкий Д.И.* Механизмы плазмохимического травления материалов. Энциклопедия низкотемпературной плазмы. Книга III. М.: Наука, 2000. 346 с.
22. *Орликовский А.А., Словецкий Д.И.* Проблемы плазмохимического травления в микроэлектронике // *Микроэлектроника*. 1987. Т. 16. № 6. С. 497.
23. *Kots I.N., Klimin V.S., Polyakova V.V., Vakulov Z.E., Ageev O.A.* Masking coating formation by the focused ion beams method for plasma chemical treatment // *J. Physics: Conference Series*. 2018. V. 1124(8). № 081035.
24. *Комаров Ф.Ф., Новиков А.П., Ширяев С.Ю.* Дефекты структуры в ионно-имплантированном кремнии. Минск: Университетское, 1990. 320 с.
25. *Amirov I.I., Shumilov A.S.* Profile Evolution of Silicon Nanostructures in Argon-Plasma Sputtering // *J. Surface Investigation*. 2020. V. 14. № 5. P. 935–9431.

ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОЕ И РЕАКТИВНО-ИОННОЕ ТРАВЛЕНИЕ
КРЕМНИЯ В СРЕДЕ ТЕТРАФТОРМЕТАНА С АРГОНОМ© 2022 г. Д. Б. Мурин^а, *, С. А. Пивоваренок^а, А. С. Козин^а^аФедеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Ивановский государственный химико-технологический университет”, Иваново, Россия

*E-mail: dim86@mail.ru

Поступила в редакцию 07.07.2021 г.

После доработки 11.01.2022 г.

Принята к публикации 11.01.2022 г.

Проведено экспериментальное исследование влияния времени травления и внешних параметров разряда (потенциал смещения, вкладываемая мощность, давление газа) на скорость травления кремния в смеси CF_4/Ar . Показано, что процесс травления кремния протекает в стационарном режиме. Установлено, что при подаче на подложкодержатель потенциала смещения (-100 или -160 В) происходит существенное увеличение скорости травления кремния.

Ключевые слова: травление, плазма, кинетика, кремний, тетрафторметан, аргон

DOI: 10.31857/S0544126922030097

1. ВВЕДЕНИЕ

Развитие технологии микроэлектроники во второй половине XX в. привело к необходимости поиска альтернативы жидкостным методам травления и очистки поверхностей. Выбор был сделан в пользу плазменных технологий. Начиная с конца 70-х гг. XX в., плазмохимическое и реактивно-ионное травление получили широкое распространение в технологии сверхбольших интегральных схем (СБИС) и ультрабольших интегральных схем (УБИС). По мере того как размеры приборов в интегральных схемах (ИС) продолжают уменьшаться, и наступает эра технологии ультрасверхбольших интегральных схем (УСБИС), плазменное травление используется все чаще и чаще. Это связано, в первую очередь, с тем, что данный способ переноса изображения характеризуется высокой анизотропией и осуществляется при относительно низких температурах, вследствие чего повышается качество выпускаемых ИС. В настоящее время — эпоху быстрого развития нанотехнологий — плазмохимическое травление (ПХТ) остается практически единственным инструментом для переноса рисунка ИС на материал подложки. Однако, требования к количеству вносимых плазмой дефектов, селективности, управлению шириной линии и однородности травления становятся все более строгими и более сложными для их реализации [1].

Как уже говорилось ранее, основной областью применения плазменных процессов в современной технологии микро- и нанoeлектроники является травление поверхностей полупроводниковых

пластин и различных слоев. Под термином “плазменное травление” понимают контролируемое удаление материала с поверхности образца под воздействием активных частиц плазмы. В зависимости от типов активных частиц процессы плазменного травления можно разделить на плазмохимические, ионно-плазменные и реактивно ионно-плазменные. Другой характерной чертой современной технологии плазменного травления является использование сложных газовых систем. В таких системах реализуется комплексное воздействие плазмы на обрабатываемый материал, с одновременной реализацией физического и химического взаимодействия. Это открывает возможности гибкой настройки и оптимизации выходных параметров процесса травления.

В настоящее время фторуглеродные газовые системы являются перспективными плазмообразующими средами для травления полупроводников, в частности кремния. В данной работе в качестве плазмообразующего газа был использован тетрафторметан (CF_4) или фреон R-14 и его смесь с аргонном. Фреон R-14 — бесцветный газ, без запаха, относится к так называемым озонобезопасным фреонам группы “С”. Данный газ инертен в химическом отношении, не горит на воздухе, невзрывоопасен даже при контакте с открытым пламенем и при диссоциации не взаимодействует с озоном, устойчив к действию кислот и щелочей. Фреон R-14 играет важную роль в промышленности плазменного травления, так как может легко диссоциировать на химически активные частицы фтора (F) и

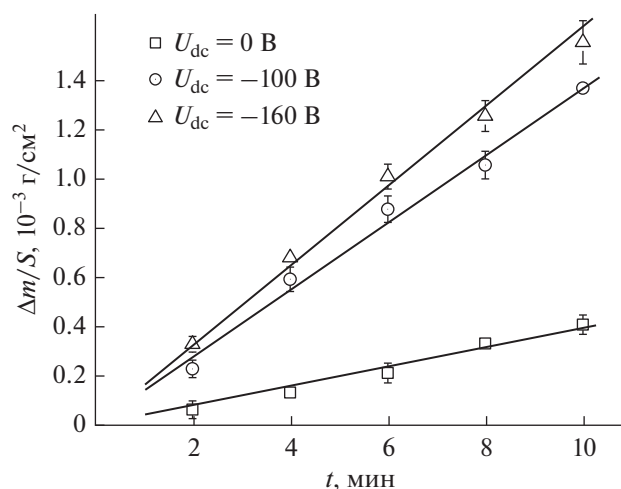


Рис. 1. Кинетические зависимости травления кремния в ВЧ-плазме CF_4/Ar : $W_{RF} = 950$ Вт, $p = 3.6$ мТорр (CF_4/Ar : 40/12 $\text{см}^3/\text{мин} = 2.8/0.8$ мТорр).

CF_n радикалы. Также известно, что разбавление плазмообразующего газа вторым газом (инертным или химически активным) позволяет достигать дополнительных эффектов при травлении ряда материалов, например, приводить к увеличению скорости травления или незначительному уменьшению [2–6]. Этот эффект представляет большой технологический интерес. Целью данной работы являлось исследование кинетики травления кремния в ВЧ-плазме фреона R-14 с аргоном.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Для исследования плазмохимических процессов в условиях ВЧ-разряда (13.56 МГц, 1.25 кВт) использовалась установка “Платран-100ХТ”. Она предназначена для плазмохимического травления полупроводниковых материалов, а также металлических пленок. Установка обеспечивает возможность обработки пластин диаметром до 100 мм, а также меньших размеров толщиной от 0.3 до 2 мм.

Откачка системы производилась механическим пластинчато-роторным (Leybold BCS, производительность 30 $\text{м}^3/\text{ч}$) и турбомолекулярным (TMP 803 LMTC, производительность 800 л/с) насосами. Контроль рабочего давления в реакторе осуществлялся баратроном с верхним пределом измерения 0.1 Торр. Измерение и контроль расхода плазмообразующего газа проводились при помощи расходомеров с верхним пределом 200 $\text{см}^3/\text{мин}$. Фреон R-14 и аргон брали из баллонов с маркой “чистый” (МРТУ 51–77–66), содержание основного газа не менее 99.985%.

В рамках данной работы варьирование внешних (задаваемых) параметров осуществлялось следующим образом: вкладываемая в разряд мощность со-

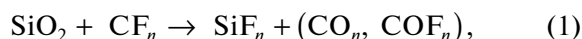
ставляла интервал (550–950) Вт с шагом 100 Вт; давление газа (2–8) мТорр с шагом 1.4 мТорр; расход плазмообразующего газа CF_4 и Ar являлся величиной постоянной и составлял 40 и 12 $\text{см}^3/\text{мин}$ (~2.8 и 0.8 мТорр соответственно). Время травления изменялось от 40 до 600 с с интервалом 120 с. Партии образцов обрабатывались в отсутствие потенциала смещения на подложкодержателе, а также при величинах смещения на подложкодержатель –100 и –160 В.

Образцы кремния вырезались из кремниевой пластины марки КЭФ–4.5 (100). На выходе получались пластинки квадратной формы со стороной ~1 см (площадь образца ~1 см^2). До помещения в реактор поверхность образцов очищалась от масляных, пылевых и жировых загрязнений в толуоле и ацетоне.

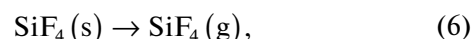
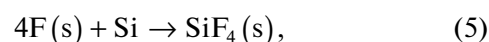
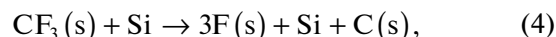
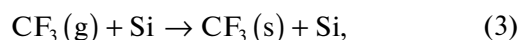
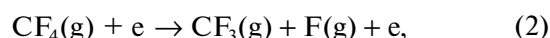
3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Эксперименты показали, что кинетические зависимости убыли массы образца носят линейный характер (рис. 1), что свидетельствует о стационарном режиме протекания процесса травления. Данный факт может быть обусловлен следующим:

1) на начальном этапе присутствует небольшой индукционный период (~40 с), который по нашему мнению обусловлен процессом взаимодействия оксидной пленки SiO_2 с радикалами CF_n (где $n = 1, 2, 3$), т.е. происходит деструкция пассивирующей оксидной пленки с образованием летучих соединений вида SiF_n (где $n = 2, 4$):



2) после удаления оксидной пленки происходит взаимодействие активных частиц плазмы с поверхностью кремния. Основными химически активными частицами являются атомы фтора, которые на поверхность кремния поступают в виде фторуглеродных радикалов CF_3 (индекс g – газообразное состояние, s – адсорбированное состояние):



Из полученных зависимостей видно, что при подаче потенциала смещения на подложкодержатель (–100 и –160 В) убыль массы образца значительно увеличивается (например, при 5 мин обработки в 3.5 раза и в 4 раза соответственно) вследствие того, что появляется дополнительная составляющая процесса (физическое распыление

Таблица 1. Скорости травления кремния (R , нм/мин) в зависимости от времени травления и внешних параметров разряда

Скорости травления кремния (R , нм/мин) в зависимости от времени травления в смеси CF_4/Ar :
 $W_{RF} = 950$ Вт, $p = 3.6$ мТорр (CF_4/Ar): $40/12$ см³/мин = $2.8/0.8$ мТорр)

t , мин	$U_{dc} = 0$ В	$U_{dc} = -100$ В	$U_{dc} = -160$ В
2	155.19	602.56	708.15
4	149.48	597.42	729.61
6	150.21	589.54	722.46
8	157.04	549.14	695.97
10	155.97	570.98	696.61

Скорости травления кремния (R , нм/мин) в зависимости от давления смеси CF_4/Ar :
 $W_{RF} = 950$ Вт, $t = 4$ мин, p (Ar) = 0.8 мТорр (const)

p , мТорр	$U_{dc} = 0$ В	$U_{dc} = -100$ В	$U_{dc} = -160$ В
2.2	78.42	350.13	425.61
3.6	110.87	459.83	563.55
5	110.87	495.59	649.38
6.4	132.33	555.89	636.65
7.8	132.33	580.60	659.61

Скорости травления кремния (R , нм/мин) в зависимости от мощности, вкладываемой в разряд, в смеси CF_4/Ar : $t = 4$ мин, $p = 3.6$ мТорр (CF_4/Ar): $40/12$ см³/мин = $2.8/0.8$ мТорр)

W_{RF} , Вт	$U_{dc} = 0$ В	$U_{dc} = -100$ В	$U_{dc} = -160$ В
550	28.81	239.63	375.77
650	78.04	312.14	444.20
750	106.85	375.77	495.83
850	142.87	445.40	551.05
950	171.68	507.83	597.87

под действием бомбардировки поверхности образца ионами Ar^+ (скорости травления кремния в зависимости от времени обработки приведены в табл. 1). Из данных таблицы видно, что скорости травления остаются практически постоянными во всем исследуемом временном диапазоне, что согласуется с литературными данными для аналогичных условий [7–10].

На рис. 2 приведены зависимости скорости травления кремния от давления плазмообразующей смеси. Из полученных зависимостей видно, что наблюдается линейное увеличение скорости травления от давления газа (2–8 мТорр), а именно, при отсутствии смещения на подложкодержателе скорость травления возрастает ~ в 1.7 раза с 0.65×10^{16} до 1.09×10^{16} см⁻² с⁻¹, а при смещениях $U_{dc} = -100$ и -160 В: ~ в 1.7 раза с 2.9×10^{16} до 4.8×10^{16} см⁻² с⁻¹ и ~ в 1.6 раза 3.5×10^{16} до $5.5 \times$

$\times 10^{16}$ см⁻² с⁻¹ соответственно. Линейный рост скорости травления связан с увеличением концентрации химически активных частиц с увеличением доли фреона R-14 в смеси и эффективной очисткой поверхности за счет физической и химической составляющей процесса [4, 11]. Данные по скоростям травления в нм/мин в зависимости от давления плазмообразующей смеси приведены в таблице.

Зависимости скорости травления от мощности, вкладываемой в разряд, приведены на рис. 3, из которого видно, что при использовании смещений -100 В и -160 В увеличение вкладываемой мощности в разряд от 550 до 950 Вт приводит к линейному росту скорости травления кремния. Данный факт обусловлен тем, что рост мощности, вкладываемой в плазму, приводит к росту как плотности потока нейтральных частиц, так и к росту плотно-

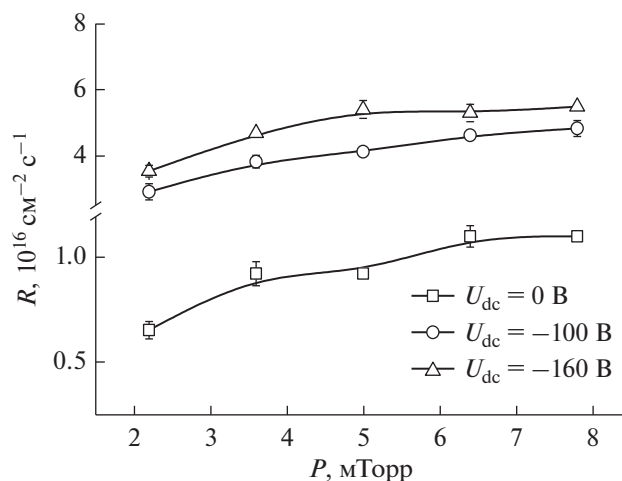


Рис. 2. Зависимости скорости травления кремния в ВЧ-плазме CF_4/Ar от давления плазмообразующей смеси: $W_{RF} = 950$ Вт, $t = 4$ мин, p (Ar) = 0.8 мТорр (const).

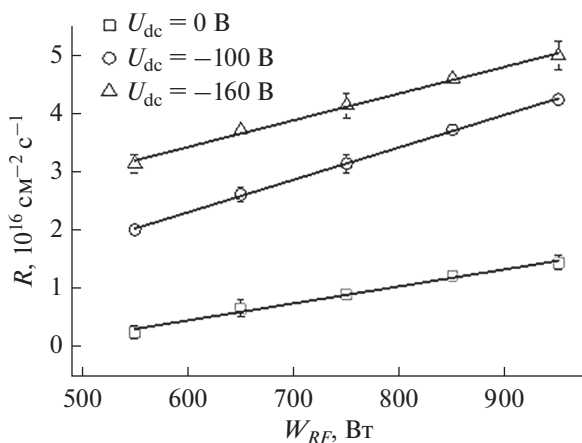


Рис. 3. Зависимости скорости травления кремния в ВЧ-плазме CF_4/Ar от мощности, вкладываемой в разряд: $t = 4$ мин, $p = 3.6$ мТорр (CF_4/Ar : 40/12 см³/мин = 2.8/0.8 мТорр).

сти потока ионов на поверхность обрабатываемого материала, что и вызывает увеличение скорости травления [4, 5, 11]. При отсутствии смещения на подложкодержателе скорость травления кремния с ростом вкладываемой мощности в разряд имеет меньшие значения, чем при использовании смещений (например, для мощности 750 Вт скорость травления кремния меньше в 3.5 раза, чем при смещении -100 В и в 4.6 раза при смещении -160 В), что свидетельствует о менее эффективной физической составляющей процесса. Данные по скоростям травления в нм/мин в зависимости от мощности, вкладываемой в разряд, приведены в таблице. Из ее данных видно, что скорость травления кремния в системе CF_4/Ar при варьировании мощ-

ности, вкладываемой в разряд, увеличивается: при $U_{dc} = 0$ В \sim в 6 раз, $U_{dc} = -100$ В \sim в 2.1 раза и $U_{dc} = -160$ В \sim в 1.6 раза.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено экспериментальное исследование кинетики травления кремния в ВЧ-плазме смеси фреона R-14 с аргонном. В ходе экспериментального исследования было выявлено, что кинетические зависимости носят линейный характер, что свидетельствует о стационарном режиме протекания процесса травления кремния. На начальном этапе наблюдался индукционный период, который связан с травлением естественного оксида на поверхности кремния посредством CF_n радикалов. После удаления данного оксида при взаимодействии химически активных частиц с кремнием на поверхности образовывались летучие соединения вида SiF_n , что приводило к интенсивной газификации продуктов взаимодействия с обрабатываемой поверхности. Исследовано влияние внешних параметров ВЧ-плазмы смеси CF_4/Ar (вкладываемая мощность, потенциал смещения, давление плазмообразующей смеси) на скорость травления кремния. При использовании потенциалов смещения (-100 и -160 В) наблюдается существенное увеличение скорости травления кремния за счет физической составляющей процесса.

Работа выполнена в рамках государственного задания на выполнение НИР. Тема № FZZW-2020-0007. Исследование проведено с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием ИГХТУ (при поддержке Минобрнауки России, соглашение № 075-15-2021-671).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галперин В.А., Данилкин Е.В., Мочалов А.И. Процессы плазменного травления в микро- и нанотехнологиях / Под ред. Тимошенко С.П. М.: БИНОМ, 2018. 283 с.
2. Данилин Б.С., Киреев В.Ю. Применение низкотемпературной плазмы для травления и очистки материалов / Под ред. Данилин Б.С. М.: Энергоатомиздат, 1987. 264 с.
3. Светцов В.И., Ефремов А.М. Вакуумная и плазменная электроника: учеб. пособие. Иван. гос. хим.-технол. ун-т. Иваново, 2003. 171 с.
4. Пивоваренко С.А. Влияние добавок Ag и He на кинетику травления GaAs в плазме CF_2Cl_2 // Микроэлектроника. 2017. Т. 46. № 3. С. 231–235.
5. Пивоваренко С.А. Влияние добавки N_2 на скорость травления GaAs в плазме CF_2Cl_2 // Микроэлектроника. 2019. Т. 48. № 4. С. 279–283.
6. Пивоваренко С.А., Королькова К.А. Влияние внешних параметров разряда на скорость травления полиимида // Сборник тезисов докладов на III Все-

- российской молодежной конференции “Успехи химической физики”. М.: Издательство “Граница”, 2016. С. 124.
7. *Christophorou L.G., Olthoff J.K., Rao M.* Electron interactions with CF_4 // *J. Physical and Chemical Reference Data*. 1996. V. 25. № 5. P. 1341–1388.
 8. *Christophorou L.G., Olthoff J.K.* Electron Interactions With Plasma Processing Gases: An Update for CF_4 , CHF_3 , C_2F_6 , and C_3F_8 // *J. Physical and Chemical Reference Data*. 1999. V. 28. № 4. P. 967–982.
 9. *Efremov A.M., Kim D.P., Kim C.I.* Effect of gas mixing ratio on gas-phase composition and etch rate in an inductively coupled CF_4/Ar plasma // *Vacuum*. 2004. V. 75. № 2. P. 133–142.
 10. *Zhang D., Kushner M.J.* Mechanisms for CF_2 radical generation and loss on surfaces in fluorocarbon plasmas // *J. Vacuum Science & Technology A.: Vacuum, Surfaces, and Films*. 2000. V. 18. № 6. P. 2661–2668.
 11. *Ефремов А.М., Пивоваренок С.А., Светцов В.И.* Параметры плазмы и механизмы травления металлов и полупроводников в хлороводороде // *Микроэлектроника*. 2009. Т. 38. № 3. С. 147–159.

ПАРАМЕТРЫ ПЛАЗМЫ И КИНЕТИКА РЕАКТИВНО-ИОННОГО
ТРАВЛЕНИЯ КРЕМНИЯ В СМЕСИ $C_6F_{12}O + Ar$ © 2022 г. А. М. Ефремов^а, *, В. Б. Бетелин^б, К.-Н. Кwon^с^аФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»,
Шереметевский просп., 7, Иваново, 153000 Россия^бФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Нахимовский просп., 36, к. 1, Москва, Россия^сKorea University, Sejong, 339-700 South Korea

*E-mail: amefremov@mail.ru

Поступила в редакцию 18.01.2022 г.

После доработки 22.02.2022 г.

Принята к публикации 28.02.2022 г.

Изучены характеристики газовой фазы и кинетика реактивно-ионного травления кремния в плазме 50% $C_6F_{12}O + 50\% Ar$. Схема исследования включала диагностику плазмы с помощью зондов Ленгмюра и оптической эмиссионной спектроскопии, а также измерение скоростей травления при варьировании вкладываемой мощности (200–600 Вт) и давления газа (4–12 мтор). Показано, что а) характер изменения параметров электронной и ионной компонент плазмы в целом соответствует закономерностям, известным для других фторуглеродных газов; и б) кинетика образования атомов фтора испытывает заметное влияние со стороны объемных процессов вида $CF_x + O \rightarrow COF_{x-1} + F$. Установлено, что изменение скорости травления кремния определяется кинетикой гетерогенной реакции $Si + xF \rightarrow SiF_x$, протекающей в режиме лимитирования потоком атомов фтора. Предположено, что эффективная вероятность этой реакции в условиях постоянной температуры определяется процессами конкурентной адсорбции атомов кислорода и/или окисления поверхности.

Ключевые слова: плазма, диагностика плазмы, активные частицы, кинетика, гетерогенное взаимодействие

DOI: 10.31857/S0544126922040044

1. ВВЕДЕНИЕ

Неравновесная газоразрядная плазма фторуглеродных ($C_xH_yF_z$) газов исторически играет важную роль в технологии приборов интегральной микро- и нано-электроники при проведении процессов структурирования поверхности кремниевых пластин и функциональных слоев различной природы [1, 2]. Основным инструментом здесь являются процессы реактивно-ионного травления (РИТ), сочетающие эффекты физического и химического воздействия на обрабатываемую поверхность. Регулирование физических и химических факторов при варьировании условий обработки (состав плазмообразующего газа, его давление, вкладываемая мощность и мощность смещения на обрабатываемой поверхности) позволяют эффективно оптимизировать скорость травления, анизотропию профиля и селективность по отношению к материалу маски [3, 4].

Очевидно, что оптимизация выходных характеристик РИТ невозможна без понимания механизмов физико-химических явлений, обеспечивающих газификацию атомов обрабатываемой по-

верхности. Это, в свою очередь, требует выявления взаимосвязей между параметрами газовой фазы (электрофизическими характеристиками и составом плазмы) и кинетикой ионно-стимулированных гетерогенных процессов. Многочисленные исследования соответствующих вопросов для плазмы «традиционных» фторуглеродных газов – CF_4 , CHF_3 , C_4F_8 и др. – изложены в обзорных статьях [5–8] и обобщены в монографиях [1–4]. В целом, для каждого из таких газов а) разработаны кинетические схемы, адекватно описывающие кинетику плазмохимических процессов и состав газовой фазы; б) установлены типы доминирующих частиц и определены их роли в процессе травления; в) проведен анализ факторов, определяющих полимеризационную нагрузку плазмы на контактирующие с ней поверхности, состав и стационарную толщину фторуглеродной полимерной пленки; и г) разработаны способы регулирования баланса травление/полимеризация варьированием внешних параметров и газов-добавок.

Исследования последних лет показали, что значимым недостатком «традиционных» фторуглерод-

ных газов является высокий потенциал глобального потепления (ПГП) [9, 10]. Так, например, значение индекса ПГП (параметра, показывающего во сколько раз вклад данного газа в формирование парникового эффекта превышает аналогичное действие CO_2) составляет более 5000 для тетрафторметана и более 7000 для трифторметана [10, 11]. Таким образом, актуальной задачей является поиск новых плазмообразующих газов, которые, с одной стороны, отличаются меньшим негативным воздействием на окружающую среду, а с другой — удовлетворяют требованиям технологии. По результатам работ [11, 12] можно заключить, что одним из возможных кандидатов здесь может являться $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$, который имеет единичный индекс ПГП и сохраняет жидкое состояние при температурах ниже 50°C . Последнее свойство значительно облегчает экстракцию непрореагировавшего фторуглеродного компонента из отходящих газов плазмохимических реакторов. В то же время, свойства плазмы $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$ и возможности ее технологических приложений изучены крайне слабо. Основными причинами такой ситуации являются недостаток экспериментальных данных по кинетике процессов РИТ в данном газе, а также объективные сложности анализа электрофизических параметров и состава плазмы на фоне неопределенной кинетической схемы. Разработка последней существенно затруднена отсутствием достоверной информации по механизмам и кинетическим характеристикам (сечениям, константам скоростей) диссоциации как самого $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$, так и продуктов его распада.

Ранее в работе [13] было проведено сравнительное исследование параметров плазмы и кинетики РИТ Si и SiO_2 в смесях $\text{CF}_4 + \text{Ag}$ и $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + \text{Ag}$. Было найдено, что при идентичных условиях возбуждения разряда обе плазменные системы а) характеризуются близкими концентрациями заряженных частиц; и б) демонстрируют отсутствие принципиальных различий состава и толщины осаждаемой фторуглеродной полимерной пленки. Отличительной особенностью плазмы $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + \text{Ag}$ при этом являются более низкие скорости травления Si и SiO_2 , что согласуется с различиями в концентрациях атомов фтора. В то же время, очевидным недостатком этой работы служит отсутствие данных по абсолютным концентрациям атомов. Это ограничивает возможности анализа кинетики нейтральных частиц в объеме плазмы и гетерогенных процессов на обрабатываемой поверхности. Основная идея настоящего исследования заключалась в дальнейшем развитии экспериментального и теоретического подходов для изучения свойств плазмы $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + \text{Ag}$ в условиях, характерных для процессов РИТ кремния и его соединений. Соответственно, целями работы являлись 1) получение данных по абсолютным концентрациям атомов фтора и кислорода при варьировании вкладываемой мощности

и давления газа; и 2) анализ механизма травления кремния в приближении эффективной вероятности взаимодействия. Как было показано ранее в наших работах [14–16], характер изменения этого параметра в условиях термостатирования обрабатываемого материала позволяет выявлять сторонние факторы, влияющие на кинетику гетерогенной химической реакции.

2. МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

2.1. Оборудование и методика эксперимента

Эксперименты проводились в условиях индукционного ВЧ (13.56 МГц) разряда, в реакторе планарного типа с рабочей камерой из анодированного алюминия [14–16]. В качестве варьируемых величин выступали давление газа ($p = 4\text{--}12$ мтор) и вкладываемая мощность ($W = 200\text{--}600$ Вт), что соответствовало диапазону удельной мощности $\sim 0.2\text{--}0.6$ Вт/см³. Набор постоянных параметров включал общий расход плазмообразующего газа ($q = 40$ станд. см³/мин), начальный состав смеси $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + \text{Ag}$, задаваемый равными парциальными расходами ее компонентов, и мощность смещения на нижнем электроде ($W_{dc} = 200$ Вт). Последнее условие соответствовало переменному значению напряжению смещения $-U_{dc}$, которое отслеживает изменение плотности потока положительных ионов.

Данные по электрофизическим параметрам плазмы получали с помощью двойного зонда Лангмюра DLP2000 (Plasmat Inc., Korea). Для минимизации искажений зондовых вольт-амперных характеристик (ВАХ) из-за полимеробразования на зондах использовалась системой импульсной очистки ионной бомбардировкой. Кроме этого, перед каждым измерением зонды дополнительно обрабатывались в плазме 50% Ag + 50% O_2 в течении ~ 2 мин. Анализ измеренных ВАХ с использованием известных положений зондовой теории для разрядов низкого давления [4, 17] обеспечивал данные по температуре электронов (T_e) и плотности ионного тока (J_+). Суммарную концентрацию положительных ионов оценивали по соотношению $n_+ \approx J_+/0.61ev_B$ [4], где $v_B \approx \sqrt{eT_e/m_i}$ — скорость ионов на внешней границе двойного электрического слоя у поверхности зонда, а m_i — эффективная масса иона [15, 16]. При определении m_i мы полагали, что доминирующим ионом в плазме $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$ является CF_3^+ . Косвенными подтверждениями этого факта являются а) отсутствие принципиальных различий в абсолютных значениях J_+ , измеренных в $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$ и CF_4 при одинаковых условиях возбуждения разряда [13]; и б) доминирование CF_4 среди стабильных продуктов термического разложения $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$, в том числе — в

условиях искрового пробоя газового промежутка [18, 19]. Величину $-U_{dc}$ контролировали высоковольтным зондом AMN-CTR (Youngsin Eng, Korea).

Стационарные концентрации атомов F и O определяли методом оптической актинометрии с использованием аналитических пар F 703.8 нм/Ag 750.4 нм и O 777.2 нм/Ag 750.4 нм [20, 21]. Для всех указанных спектральных линий характерны а) возбуждение прямым электронным ударом; и б) низкое время жизни возбужденного состояния, что позволяет пренебречь процессами не излучательной релаксации [21]. Расчеты концентраций атомов проводили из соотношения

$$\frac{n_X}{n_{Ar}} = C_{Ar}^X \frac{I_X}{I_{Ar}},$$

где I_X и n_X – интенсивность излучения и концентрация определяемой частицы X ($X = F$ или O), а C_{Ar}^X – актинометрический коэффициент, определяемый отношением констант возбуждения и вероятностей оптических переходов. Сечения возбуждения и параметры оптических переходов хорошо известны по литературным данным [21, 22]. В частности, в работе [21] показано, что параметры C_{Ar}^X являются постоянными в диапазоне температур электронов 3–4 эВ (~ 2 для пары F 703.8 нм/Ag 750.4 нм и ~ 1.6 для пары O 777.2 нм/Ag 750.4 нм), при этом результаты актинометрического определения концентраций атомов имеют хорошее согласие с результатами масс-спектральных измерений.

Подвергаемые травлению образцы располагались в центральной части нижнего электрода и представляли собой фрагменты пластин Si(100) размером $\sim 2 \times 2$ см. Встроенная система водяного охлаждения обеспечивала поддержание постоянной температуры электрода после зажигания плазмы. Скорость травления определяли как $R = h/\tau$, где h – высота ступеньки на границе маскированной и немаскированной областей обрабатываемой поверхности и τ – время травления. Величина h измерялась профилометром Alpha-step D-500 (KLA-Tencor, USA), при этом в качестве маскирующего покрытия использовался фоторезист AZ1512 толщиной ~ 1.5 мкм. Значение времени травления выбиралось в пределах квазилинейного участка кинетической зависимости $h = f(\tau)$, соответствующего стационарному режиму травления. Очевидно, что существование такого режима обеспечивается постоянством температуры образца и отсутствием эффекта маскирования обрабатываемой поверхности фторуглеродным полимером. По результатам предварительных экспериментов было установлено также, что увеличение площади обрабатываемой поверхности не приводит к снижению скорости травления и не сопровождается заметными изменениями зондо-

вых ВАХ. Это позволяет заключить, что процесс травления протекает в кинетическом режиме и характеризуется пренебрежимо малым влиянием продуктов травления на параметры газовой фазы.

2.2. Подходы к анализу кинетики травления

Анализ взаимосвязей параметров газовой фазы и кинетики гетерогенного взаимодействия базировался на литературных данных по механизмам реактивно-ионных процессов в плазме фторуглеродных газов [4–7, 14, 23]. Для типичных условий РИТ (давление газа < 20 мтор, энергия ионной бомбардировки 200–600 эВ) эти данные могут быть обобщены в виде следующих положений:

1) Наблюдаемая скорость РИТ может быть представлена как $R_{phys} + R_{chem}$, где слагаемые представляют собой скорости физического распыления и химического травления целевого материала.

2) Физическая составляющая процесса травления (как R_{phys} , так любой ионно-стимулированный процесс, например десорбция продуктов взаимодействия или деструкция фторуглеродной полимерной пленки) характеризуется скоростью $Y_S \Gamma_+$, где Y_S – выход процесса (атом/ион) и $\Gamma_+ \approx J_+/e$ – плотность потока ионов. Изменение параметра Y_S при варьировании условий РИТ пропорционально $\sqrt{\epsilon_i}$, где $\epsilon_i = e| -U_f - U_{dc} |$ – энергия бомбардирующих ионов, U_f – плавающий потенциал.

3) Химическая составляющая процесса травления (как R_{chem} , так любая гетерогенная реакции с участием нейтральных активных частиц, например формирование фторуглеродной полимерной пленки или ее травление атомами кислорода) характеризуется скоростью $\gamma_X \Gamma_X$, где γ_X – эффективная вероятность взаимодействия, а Γ_X – плотность потока соответствующих нейтральных частиц. Изменение параметра γ_X для целевого материала при варьировании условий РИТ определяется кинетикой процессов заполнения и очистки активных центров. Ключевыми факторами здесь являются температура поверхности, летучесть продуктов взаимодействия и наличие процессов, приводящих к ингибированию или маскированию активных центров. В качестве первого механизма обычно рассматривается конкурентная адсорбция нереагирующих частиц, а в качестве второго – высаживание фторуглеродной полимерной пленки.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

По результатам зондовой диагностики плазмы $C_6F_{12}O + Ag$ было найдено, что характер изменения параметров электронной и ионной компонент плазмы соответствует закономерностям, известным для других фторуглеродных газов. Так, из

Таблица 1. Параметры электронной и ионной компонент плазмы $C_6F_{12}O + Ar$

p , мтор	4	12	4	12	4	12	4	12
W , Вт	T_e , эВ		J_+ , мА/см ²		n_+ , 10^{10} см ⁻³		$-U_{dc}$, В	
200	3.6	3.5	0.20	0.16	0.91	0.74	414	441
400	3.8	3.7	0.46	0.39	2.03	1.79	368	409
600	4.0	3.8	0.64	0.59	2.79	2.61	336	365

Примечание: T_e – температура электронов; J_+ – плотность ионного тока; n_+ – суммарная концентрация положительных ионов; $-U_{dc}$ – отрицательное смещение на обрабатываемой поверхности.

табл. 1 можно видеть, что температура электронов и плотность ионного тока увеличиваются с ростом складываемой мощности при $p = const$, но снижаются с ростом давления газа в условиях $W = const$. Характер зависимости $T_e = f(W)$ обусловлен ростом степеней диссоциации молекулярных компонент плазмы, что приводит к обогащению газовой фазы атомными частицами и менее насыщенными радикалами CF_x . Поэтому имеет место снижение потерь энергии электронов в низкороговых процессах колебательного и электронного возбуждения. Соответственно, падение T_e с ростом давления газа отражает противоположное изменение потерь энергии электронов по причине увеличения частоты их столкновений с “тяжелыми” частицами. Можно видеть также, что зависимости $J_+ = f(p, W)$ всегда являются более резкими по сравнению с величиной $\sqrt{T_e}$, которая отслеживает поведение скорости ионов на границе двойного электрического слоя у поверхности зонда. Таким образом, наблюдаемые отклики плотности ионного тока на изменение условий возбуждения разряда в целом формируются аналогичными зависимостями суммарной концентрации положительных ионов n_+ и, следовательно, скорости ионизации. Рост вкладываемой мощности при $p = const$ увеличивает суммарную скорость ионизации из-за аналогичного изменения концентрации электронов в плазме. Однозначная зависимость $n_e = f(W)$ следует из уравнения баланса вкладываемой мощности, анализ которого приводится в работах [4, 24]. Напротив, рост давления газа в условиях $W = const$ подавляет ионизацию за счет снижения T_e и констант скоростей соответствующих процессов k_{iz} . Характерные значения пороговых энергий процессов вида $CF_x + e \rightarrow CF_x^+ + 2e$ (и, тем более, для ионизации атомарных частиц) превышают среднюю энергию электронов в плазме $\epsilon \approx 3/2T_e$. Поэтому даже малые изменения температуры электронов сопровождаются резкими зависимостями $k_{iz} = f(T_e)$. Еще одним фактором, снижающим эффективность образования положительных ионов с ростом давления газа, может служить падение концентрации

электронов из-за роста электроотрицательности плазмы. Причина этого может быть связана, в том числе, с увеличением концентраций молекул F_2 и O_2 , образующихся при рекомбинации атомов фтора и кислорода. Отметим также, что величина отрицательного смещения в условиях $W_{dc} = const$ всегда изменяется противоположно J_+ . Это обусловлено частичной компенсацией наведенного отрицательного заряда за счет гетерогенной электрон-ионной рекомбинации.

При исследовании спектров излучения плазмы было найдено, что интенсивности излучения атомных линий F 703.8 нм, O 777.2 нм и Ar 750.4 нм резко увеличиваются с ростом вкладываемой мощности, но слабо снижаются при увеличении давления газа (рис. 1а). Очевидно, что оба эффекта представляют собой суперпозицию изменений концентраций этих частиц и функций возбуждения $k_{ex}n_e$, где $k_{ex} = f(T_e)$ – константа скорости возбуждения. Реальные концентрации атомов F и O, определенные по результатам актинометрических измерений (рис. 1б), имеют менее выраженную зависимость от величины W , но возрастают при увеличении давления газа. Причиной противоположного эффекта давления на интенсивность излучения и концентрацию атомов является более резкое снижение соответствующих функций возбуждения.

Анализ данных рис. 1б позволяет предположить некоторые особенности кинетики атомов фтора и кислорода в плазме $C_6F_{12}O + Ar$. Во-первых, эффект вкладываемой мощности на концентрацию атомов фтора всегда проявляется значительно сильнее, чем для атомов кислорода. При низких давлениях это выражается в различных тенденциях роста концентраций соответствующих частиц (в ~ 2.5 раза для n_F и в ~ 1.5 раза для n_O при $p = 4$ мтор и $W = 200-600$ Вт), а при высоких – в еще более резком росте n_F при $n_O \approx const$. По нашему мнению, такая ситуация означает, что существенный вклад в образование атомов фтора вносят объемные процессы вида R1: $CF_x + O \rightarrow COF_{x-1} + F$ ($k_1 \sim 3 \times 10^{-11}$ см³/с для $x = 3, 2$ и $\sim 6 \times 10^{-11}$ см³/с для $x = 1$ [25, 26]). Соответствен-

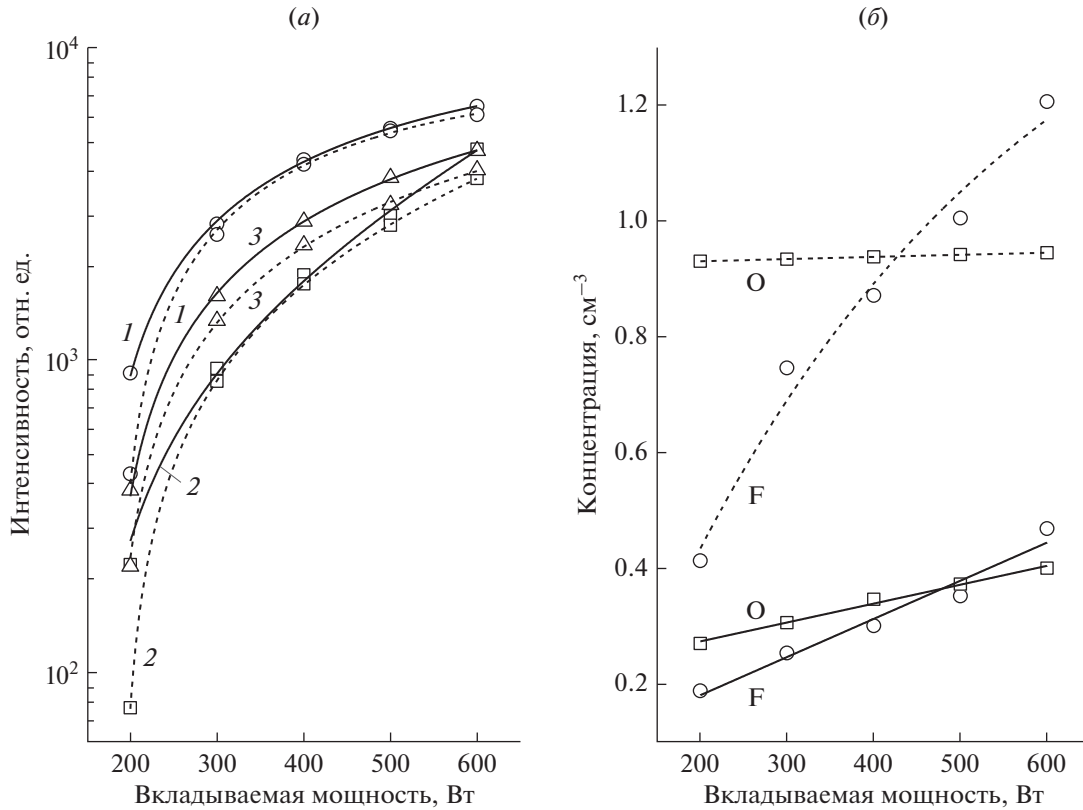


Рис. 1. Интенсивности излучения аналитических линий (а) и концентрации атомов (б) в плазме смеси 50% $C_6F_{12}O$ + 50% Ag. На рис. (а) 1 – Ag 750.4 нм (уменьшена в 10 раз); 2 – F 703.8 нм; 3 – O 777.2 нм. Сплошные линии соответствуют давлению газа 4 мтор, пунктирные – 12 мтор.

но, переход в область высоких давлений увеличивает скорость расходования кислорода из-за роста концентраций радикалов CF_x . Во-вторых, обращает на себя внимание тот факт, что в области $W < 450\text{--}500$ Вт всегда выполняется условие $n_O > n_F$. Логично предположить, что диссоциация исходной молекулы $C_6F_{12}O$ преимущественно идет с разрывом наиболее слабых связей C–C (~610 КДж/моль или 6.4 эВ) и C–F (~552 КДж/моль или 5.8 эВ) [22], при этом сильная двойная связь C=O (~1060 КДж/моль или 11 эВ) обеспечивает образование молекул CO в качестве одного из стабильных продуктов диссоциации. Таким образом, более высокие концентрации атомов кислорода могут быть обусловлены связыванием фтора в объемных процессах R2: $CO + F \rightarrow CFO$ ($k_2 \sim 3 \times 10^{-11}$ см³/с) и R3: $CFO + F \rightarrow CF_2O$ ($k_3 \sim 8 \times 10^{-11}$ см³/с) [26, 27]. Очевидно, что рост вкладываемой мощности снижает эффективность этих каналов из-за увеличения скоростей диссоциации CO электронным ударом.

На рис. 2 представлены данные, иллюстрирующие влияние условий возбуждения разряда на кинетику травления кремния. Измеренные скорости травления R_{Si} монотонно возрастают как с ростом

вкладываемой мощности, так и давления газа, что противоречит характеру изменения плотности потока ионов (табл. 2). Таким образом, в исследованном диапазоне условий процесс травления не имеет ионно-лимитируемых стадий и определяется кинетикой гетерогенной реакции R4: $Si + xF \rightarrow SiF_x$. Последний вывод подтверждается оценками скоростей распыления R_{phys} с использованием литературных данных по зависимости коэффициента распыления от энергии ионов [28] (табл. 2). Расчеты эффективной вероятности гетерогенного взаимодействия $\gamma = R_{chem}/\Gamma_F$, где $R_{chem} = R_{Si} - R_{phys}$ – химическая составляющая скорости травления и $\Gamma_F \approx 0.25n_F(8RT_{gas}/\pi M_F)^{1/2}$ – плотность потока атомов фтора, показали зависимость данного параметра от условий возбуждения разряда даже в условиях термостатирования образца в реакторе (рис. 2б). Ранее в работе [13] было установлено, что полимеризационная способность плазмы $C_6F_{12}O + Ag$ не имеет принципиальных отличий от аналогичных характеристик системы $CF_4 + Ag$. Так как свойства последней хорошо известны, можно с достаточной степенью уверенности полагать, что условие $\epsilon_i > 200$ эВ обеспечивает существование тонкой или даже не сплошной полимерной пленки,

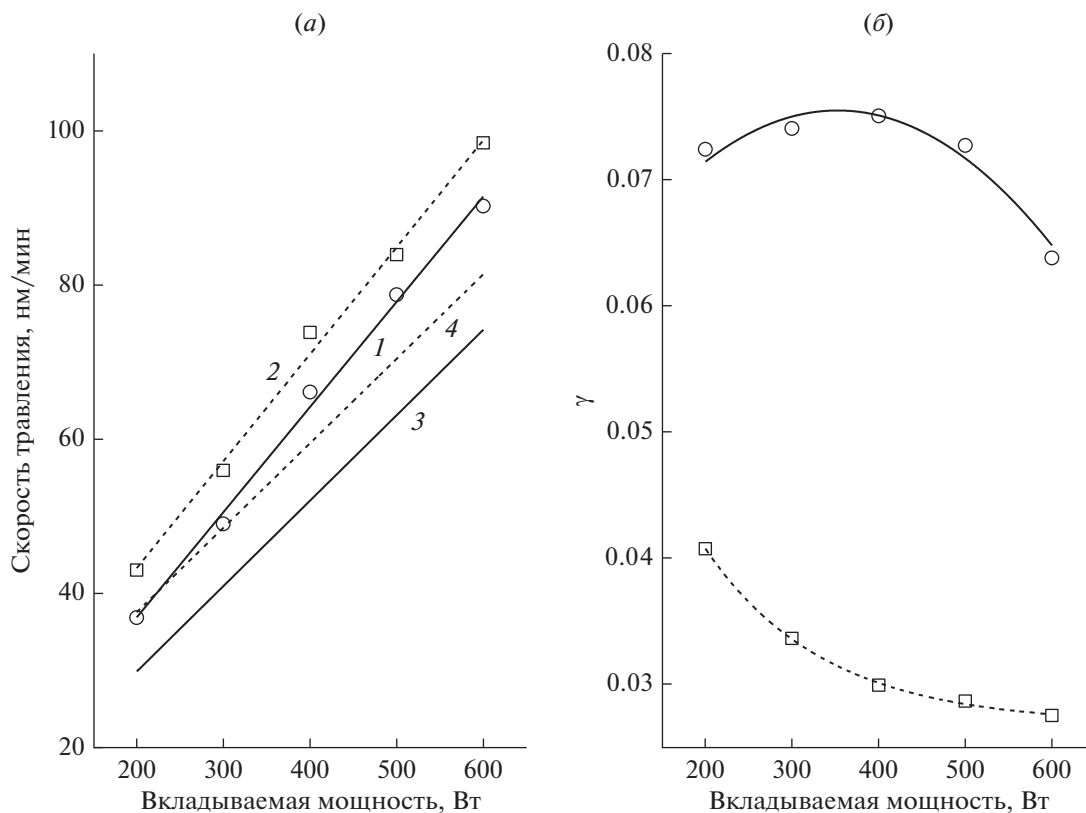


Рис. 2. Скорости травления кремния (а) и эффективная вероятность гетерогенной реакции $\text{Si} + x\text{F} \rightarrow \text{SiF}_x$ (б) в плазме смеси 50% $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + 50\%$ Ar . На рис. (а) 1, 2 – измеренные скорости травления R ; 3, 4 – химическая составляющая скорости травления R_{chem} , определенная как $R_{Si} - R_{phys}$. Сплошные линии соответствуют давлению газа 4 мтор, пунктирные – 12 мтор.

которая не лимитирует доступ атомов фтора к обрабатываемой поверхности [4]. По нашему мнению, причиной снижения параметра γ при увеличении вкладываемой мощности и давления газа является конкурентная адсорбция атомов кислорода, приводящая к снижению доли свободных активных центров. Кроме этого, логично предположить протекание химических процессов с участием кислорода, снижающих реакцию по отношению к атомам фтора. В качестве таких процессов можно рассматривать а) окисление самой поверхности, приводящее к образованию связей $\text{Si}-\text{O}$, что формально соответствует увеличению пороговой энергии R_4 ; и б) окисление продуктов R_4 в менее летучие соединения вида SiF_xO_y , что приводит к снижению доли активных центров, способных адсорбировать атомы фтора. Отметим, что подобные гетерогенные эффекты обсуждались ранее для смесей “традиционных” фторуглеродных газов с кислородом. Так, в работе [29] наблюдалась похожая корреляция между концентрацией атомов кислорода и вероятностью взаимодействия при травлении SiO_2 в плазме смеси $\text{CF}_4 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ при варьировании со-

отношения O_2/Ar . Аналогичная ситуация сообщалась также для Si и SiO_2 в смеси $\text{C}_4\text{F}_8 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ в условиях, когда скорость травления не лимитируется диффузией атомов фтора в слое полимера [15, 30]. В свете вышесказанного, незначительный рост эффективной вероятности взаимодействия в области низких давлений при $W = 200-400$ Вт (рис. 2б) предположительно является результатом ионной активации процесса через очистку активных центров и разрыв оксидных связей. В области высоких давлений этому препятствует сочетание низкой плотности потока ионов и высокой – атомов кислорода. По этой же причине имеет место снижение параметра γ с ростом давления газа в условиях $W = \text{const}$.

В заключении отметим, что сделанные в данной работе выводы о механизмах газозависимых и гетерогенных процессов в плазме $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O} + \text{Ar}$ носят, скорее, предположительный характер из-за отсутствия прямых экспериментальных подтверждений. В то же время, они в целом согласуются с результатами исследований других фторуглеродных газов и, по-видимому, адекватно отражают специфику исследуемой системы.

Таблица 2. Параметры физической (ионной) составляющей травления Si в плазме $C_6F_{12}O + Ar$

p , мтор	4	12	4	12	4	12	4	12
W , Вт	Γ_+ , $10^{15} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$		ϵ_i , эВ		Y_s , атом/ион		R_{phys} , нм/мин	
200	1.3	1.0	437	441	0.42	0.44	6.3	5.3
400	2.9	2.5	392	409	0.38	0.42	13.0	12.5
600	4.0	3.7	361	365	0.35	0.38	16.8	16.6

Примечание: Γ_+ – плотность потока ионов; ϵ_i – энергия ионной бомбардировки; Y_s – коэффициент распыления [28]; R_{phys} – физическая составляющая скорости травления (скорость распыления).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено исследование электрофизических параметров плазмы, концентраций атомных компонентов и кинетики реактивно-ионного травления кремния в смеси $C_6F_{12}O + Ar$. Интерес к $C_6F_{12}O$ обусловлен перспективами замещения “традиционных” фторуглеродных газов, характеризующихся высокими потенциалами глобального потепления. При экспериментальном исследовании газовой фазы методами зондов Лангмюра и оптической эмиссионной спектроскопии было найдено, что а) характер изменения параметров электронной и ионной компонент плазмы соответствует закономерностям, известным для других фторуглеродных газов; б) концентрация атомов фтора монотонно возрастает при увеличении вкладываемой мощности и давления газа; и в) объемные процессы вида $CF_x + O \rightarrow COF_{x-1} + F$ оказывают влияние на кинетику образования атомов фтора. Показано, что доминирующий вклад в процесс травления кремния вносит химическая составляющая, при этом кинетика гетерогенной реакции $Si + xF \rightarrow SiF_x$ характеризуется не постоянной эффективной вероятностью взаимодействия. Предположено, что снижение эффективной вероятности с ростом давления газа обусловлено ингибирующим действием атомов кислорода через процессы конкурентной адсорбции и/или окисления поверхности.

Публикация выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН (проведение фундаментальных научных исследований) по теме НИР № FNEF-2022-0006 “11021060909091-4-1.2.1 Фундаментальные и прикладные исследования в области литографических пределов полупроводниковых технологий и физико-химических процессов травления 3D нанометровых диэлектрических структур для развития критических технологий производства ЭКБ. Исследование и построение моделей и конструкций элементов микроэлектроники в расширенном диапазоне температур (от -60 до $+300^\circ\text{C}$)”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Roosmalen J., Baggerman J.A.G., Brader H.S.J.* Dry etching for VLSI. New-York: Plenum Press, 1991.
2. *Wolf S., Tauber R.N.* Silicon Processing for the VLSI Era. Volume 1. Process Technology, New York: Lattice Press, 2000.
3. *Nojiri K.* Dry etching technology for semiconductors, Tokyo: Springer International Publishing, 2015.
4. *Lieberman M.A., Lichtenberg A.J.* Principles of plasma discharges and materials processing. New York: John Wiley & Sons Inc., 1994.
5. *Jansen H., Gardeniers H., de Boer M., Elwenspoek M., Fluitman J.* A survey on the reactive ion etching of silicon in microtechnology // J. Micromech. Microeng. 1996. V. 6. P. 14–28.
6. *Stoffels W.W., Stoffels E., Tachibana K.* Polymerization of fluorocarbons in reactive ion etching plasmas // J. Vac. Sci. Tech. A. 1998. V. 16. P. 87–95.
7. *Kay E., Coburn J., Dilks A.* Plasma chemistry of fluorocarbons as related to plasma etching and plasma polymerization. In: Veprek S., Venugopalan M. (eds) Plasma Chemistry III. Topics in Current Chemistry. V. 94. Berlin, Heidelberg: Springer, 1980.
8. *Donnelly V.M., Kornblit A.* Plasma etching: Yesterday, today, and tomorrow // J. Vac. Sci. Technol. 2013. V. 31. P. 050825–48.
9. *Muhle J., Ganesan A.L., Miller B.R. et al.* Perfluorocarbons in the global atmosphere: tetrafluoromethane, hexafluoroethane, and octafluoropropane // Atmos. Chem. Phys. 2010. V. 10. P. 5145–5164.
10. *Tran-Quinn T., Lakritz M.* Unsaturated fluorocarbons in the etching process, environmental benefit, technical hurdles // Proceedings of 2008 IEEE/SEMI Advanced Semiconductor Manufacturing Conference, Cambridge, USA, 5–7 May 2008, P. 37–42.
11. *Mocella M.T.* PFC emission control options for plasma processing tools: A current Assessment // MRS Online Proceedings Library. 1996. V. 447. P. 29–34.
12. *Krishnan N., Smati R., Raoux S., Dornfeld D.* Alternatives to reduce perfluorinated compound (PFC) emissions from semiconductor dielectric etch processes: Meeting environmental commitments while minimizing costs // Proceedings of IEEE International Symposium on Electronics and the Environment, Boston, USA, 19–22 May, 2003, P. 19–24.
13. *Lim N., Cho Y.S., Efremov A., Kwon K.-H.* Dry Etching Performance and Gas-Phase Parameters of $C_6F_{12}O + Ar$

- Plasma in Comparison with $\text{CF}_4 + \text{Ar}$ // *Materials*. 2021. V. 14. P. 1595 (1–16).
14. *Efremov A., Murin D., Kwon K.-H.* Concerning the Effect of Type of Fluorocarbon Gas on the Output Characteristics of the Reactive-Ion Etching Process // *Russian Microelectronics*. 2020. V. 49, № 3. P. 157–165.
 15. *Lee B.J., Efremov A., Nam Y., Kwon K.-H.* Plasma Parameters and Silicon Etching Kinetics in $\text{C}_4\text{F}_8 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ Gas Mixture: Effect of Component Mixing Ratios // *Plasma Chem. Plasma Process.* 2020. V. 40. P. 1365–1380.
 16. *Efremov A., Murin D., Kwon K.-H.* Plasma parameters, densities of active species and etching kinetics in $\text{C}_4\text{F}_8 + \text{Ar}$ gas mixture // *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2019. V. 62. № 2. P. 31–37.
 17. *Shun'ko E.V.* Langmuir probe in theory and practice. Boca Raton: Universal Publishers, 2008.
 18. *Li Y., Zhang X., Tian S., Xiao S., Li Y., Chen D.* Insight into the decomposition mechanism of $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}-\text{CO}_2$ gas mixture // *Chem. Eng. J.* 2019. V. 360. P. 929–940.
 19. *Zhang X., Tian S., Xiao S., Deng Z., Li Y., Tang J.* Insulation Strength and Decomposition Characteristics of a $\text{C}_6\text{F}_{12}\text{O}$ and N_2 Gas Mixture // *Energies*. 2017. V. 10. P. 1170(1–11).
 20. *Booth J.P., Sadeghi N.* Oxygen and fluorine atom kinetics in electron cyclotron resonance plasmas by time-resolved actinometry // *J. Appl. Phys.* 1991. V. 70. P. 611–620.
 21. *Lopaev D.V., Volynets A.V., Zyryanov S.M., Zotovich A.I., Rakhimov A.T.* Actinometry of O, N and F atoms // *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2017. V. 50. P. 075202 (1–17).
 22. *Handbook of chemistry and physics*. Boca Raton: CRC press, 1998.
 23. *Gray D.C., Tepermeister I., Sawin H.H.* Phenomenological modeling of ion-enhanced surface kinetics in fluorine-based plasma-etching // *J. Vac. Sci. Technol. B*. 1993. V. 11. P. 1243–1257.
 24. *Efremov A.M., Kim G.H., Kim J.G., Bogomolov A.V., Kim C.I.* Applicability of self-consistent global model for characterization of inductively coupled Cl_2 plasma // *Vacuum*. 2007. V. 81. № 5. P. 669–675.
 25. *Kimura T., Noto M.* Experimental study and global model of inductively coupled CF_4/O_2 discharges // *J. Appl. Phys.* 2006. V. 100. P. 063303(1–9).
 26. *Efremov A., Lee J., Kim J.* On the Control of Plasma Parameters and Active Species Kinetics in $\text{CF}_4 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ Gas Mixture by CF_4/O_2 and O_2/Ar Mixing Ratios // *Plasma Chem. Plasma Process.* 2017. V. 37. P. 1445–1462.
 27. *Chun I., Efremov A., Yeom G.Y., Kwon K.-H.* A comparative study of $\text{CF}_4/\text{O}_2/\text{Ar}$ and $\text{C}_4\text{F}_8/\text{O}_2/\text{Ar}$ plasmas for dry etching applications // *Thin Solid Films*. 2015. V. 579. P. 136–143.
 28. A Simple Sputter Yield Calculator. <https://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/sputteryield> (20.01.2022).
 29. *Son J., Efremov A., Chun I., Yeom G.Y., Kwon K.-H.* On the LPCVD-Formed SiO_2 Etching Mechanism in $\text{CF}_4/\text{Ar}/\text{O}_2$ Inductively Coupled Plasmas: Effects of Gas Mixing Ratios and Gas Pressure // *Plasma Chem. Plasma Process.* 2014. V. 34. P. 239–257.
 30. *Lee B.J., Efremov A., Kwon K.-H.* Gas-phase chemistry and reactive-ion etching kinetics for silicon-based materials in $\text{C}_4\text{F}_8 + \text{O}_2 + \text{Ar}$ plasma // *Plasma Processes and Polymers*. 2021. V. 18. № 7. P. e2000249 (1–17).

О МЕХАНИЗМЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПРОВОДЯЩЕЙ СРЕДЫ В МЕМРИСТОРАХ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОФОРМОВАННЫХ ОТКРЫТЫХ “СЭНДВИЧ”-МДМ-СТРУКТУР

© 2022 г. В. М. Мордвинцев^а, *, Е. С. Горлачев^а, С. Е. Кудрявцев^а

^аЯрославский филиал Физико-технологического института им. К.А. Валиева РАН, Ярославль, Россия

*E-mail: Mordvintsev-Viktor@yandex.ru

Поступила в редакцию 21.12.2021 г.

После доработки 22.02.2022 г.

Принята к публикации 28.02.2022 г.

Элементы энергонезависимой электрически перепрограммируемой памяти, в которых информация кодируется величиной сопротивления (мемристоры), на основе электроформованных открытых “сэндвич”-структур TiN-SiO₂-W изготавливались по тонкопленочной технологии. Показано существенное влияние наличия органических молекул в изолирующей щели открытых “сэндвич”-МДМ-структур на характер процесса их электроформовки. Удаление органики путем отжига в безмасляном вакууме с последующей электроформовкой приводит к протеканию только первой ее стадии – образования зародыша будущей проводящей наноструктуры. Вторая стадия – накопление частиц проводящей фазы и образование проводящей среды при этом отсутствует, что проявляется в малых токах через структуру. В то же время, вторая стадия электроформовки легко выполняется после помещения отожженных структур в масляный вакуум, в котором обеспечивается поступление органических молекул на поверхность изолирующей щели. Полученные результаты означают, что в процессе электроформовки таких структур решающую роль играет углеродистая проводящая среда, образуемая из органических молекул. Предложен новый способ электроформовки, который позволяет практически исключить пробой структур при резком увеличении тока, что повышает эффективность выполнения этой операции.

Ключевые слова: мемристоры, МДМ-структуры, электроформовка, отжиг, проводящая среда, проводящая наноструктура, углеродистая проводящая среда

DOI: 10.31857/S0544126922040093

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследования мемристоров, т.е. элементов энергонезависимой памяти, в которой информация кодируется величиной сопротивления, а переключения выполняются импульсами напряжения, в настоящее время считаются перспективным направлением микро- и нанoeлектроники [1–4]. Мемристорный эффект наблюдается в различных материалах, одним из которых являются оксиды кремния [5–7], что привлекательно с точки зрения хорошего согласования со стандартной кремниевой технологией. Они применяются в виде тонких пленок с толщинами несколько десятков нанометров в структурах металл-диэлектрик-металл (МДМ), которые предварительно подвергаются электроформовке путем подачи напряжения по определенному алгоритму, после чего структуры приобретают N-образные вольтамперные характеристики (ВАХ) и эффекты бистабильности [8, 9], что и позволяет использовать их в качестве элементов памяти.

В МДМ-структурах на основе стехиометрического оксида (SiO₂) для успешного выполнения электроформовки необходимо наличие не просто слоя диэлектрика, а участка его поверхности, открытого в газовую среду и расположенного между металлическими электродами (изолирующей щели), что позволяет обмениваться молекулами между поверхностью SiO₂ и газовой фазой. Это обеспечивает образование частиц проводящей фазы (ЧПФ) за счет деструкции молекул, находящихся на поверхности изолирующей щели, при электронном ударе, последующего накопления ЧПФ и образования таким образом проводящей среды, которая определяет сопротивление структуры в целом [8–10]. Технологически такие, “открытые”, структуры удобно формировать из обычных (“закрытых”) МДМ-“сэндвич”-структур путем локального удаления слоев верхнего электрода и диэлектрика. При этом свободный торец слоя диэлектрика, расположенный между металлическими электродами, образует изолирующую щель, ширина которой задается толщиной слоя диэлектрика [8]. Поскольку

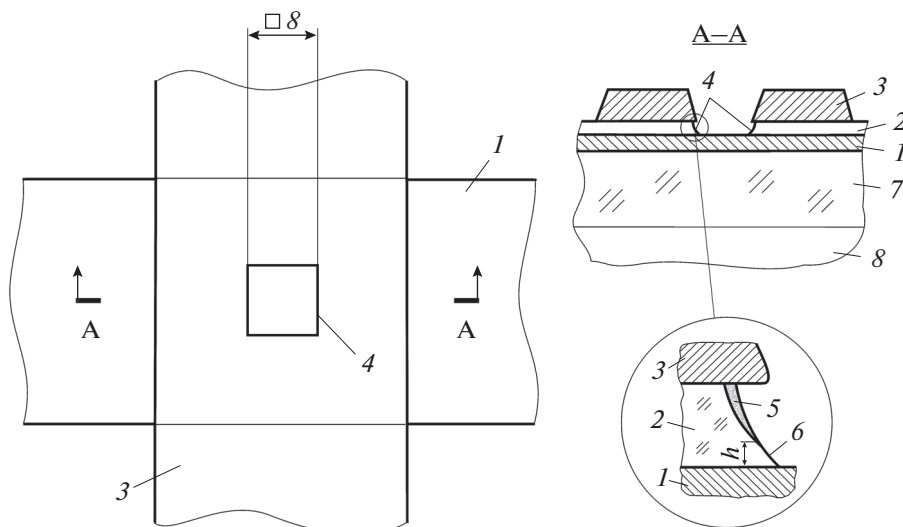


Рис. 1. Схематическое изображение открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W после выполнения электроформовки. 1 – нижний электрод (TiN); 2 – диэлектрик (SiO₂) толщиной около 25 нм; 3 – верхний электрод (W); 4 – изолирующая щель в форме открытого торца слоя диэлектрика; 5 – проводящая среда на поверхности открытого торца; 6 – изолирующий зазор с переменной шириной h ; 7 – слой толстого (0.6 мкм) диоксида кремния; 8 – подложка кремния. Размер приведен в микрометрах.

она имеет порядок 10 нм, при используемых напряжениях между электродами (5–10 В) в изолирующей щели достигаются высокие электрические поля (около 10^6 В/см), которые необходимы для протекания тока и в процессе электроформовки, и при переключениях между состояниями проводимости.

Понятно, что особенностью открытых “сэндвич”-МДМ-структур должна быть их чувствительность к составу и давлению газовой среды, поскольку от этого зависит наличие на поверхности изолирующей щели различных компонентов, способных влиять на образование ЧПФ и их накопление. Это касается как процесса переключений уже готовых элементов памяти [11], так и электроформовки [12], которая фактически является последней технологической операцией в ходе их изготовления.

В данной работе исследуется влияние предварительного отжига, который тоже может менять состав адсорбированного на поверхности изолирующей щели слоя, на процесс электроформовки в различных газовых средах. Полученные при этом результаты позволили уточнить механизм образования проводящей среды.

2. ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОБРАЗЦОВ И МЕТОДИКА ВЫПОЛНЕНИЯ ЭЛЕКТРОФОРМОВКИ

Мемристоры в виде открытых “сэндвич”-МДМ-структур TiN-SiO₂-W (рис. 1) изготавливались по тонкопленочной технологии. В качестве нижнего электрода 1 применялся слой нитрида титана толщиной 40–50 нм. Слой естественного

окисла, образующегося на поверхности TiN (порядка 1 нм), в данной работе не играл принципиальной роли. В любом случае, на всех структурах он был одинаковым. Диэлектриком 2 служила тонкая пленка диоксида кремния, толщина которой находилась в пределах 23–27 нм. Верхний электрод 3 выполнялся из вольфрама толщиной 100–120 нм. Изолирующая щель в виде открытого торца 4 слоя SiO₂ в плане представляла собой квадрат со стороной 8 мкм, ее ширина определялась толщиной слоя диоксида кремния. Проводящие дорожки к электродам открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W (на рис. 1 они не показаны) и контактные площадки к чипу выполнялись в виде пленки алюминия толщиной около 0.6 мкм.

В качестве исходной подложки 8 использовались пластины монокристаллического кремния, окисленного во влажном кислороде. Толщина слоя 7 термического диоксида кремния составляла 0.6–0.7 мкм. Пленка TiN осаждалась методом реактивного магнетронного распыления титана в атмосфере азота. Затем, тоже реактивным магнетронным распылением кремния в атмосфере кислорода, получался слой тонкого SiO₂. Пленки W и Al осаждались магнетронным распылением соответствующих металлов. Рисунок во всех слоях создавался методами контактной фотолитографии. Изолирующая щель 4 в виде открытого торца слоя диэлектрика формировалась прецизионным жидкостным травлением сначала верхнего электрода, а затем тонкого диоксида кремния с контролем момента окончания процесса по измеряемой *in situ* величине адмитанса специальной структуры на поверх-

ности пластины, что обеспечивало воспроизводимое получение нужного профиля травления в нанометровом масштабе.

Кремниевая пластина скрайбировалась и разделялась на чипы, которые приклеивались и разваривались в круглые металлостеклянные корпуса. Корпуса не герметизировались, что позволяло в дальнейшем размещать структуры в газовой среде вакуумной установки. Структуры хранились на воздухе под защитным слоем фоторезиста, удаленным непосредственно перед выполнением электроформовки, которая была последней операцией в процессе изготовления элементов памяти.

Стандартная электроформовка включает помещение структур в вакуум с остаточным давлением порядка 10^{-2} Па и подачу на их электроды напряжения по определенному алгоритму. Применялись два варианта вакуумной камеры: первая — с откачкой последовательно механическим и диффузионным насосами, использующими вакуумные масла (“масляный” вакуум — он содержит молекулы органических соединений, содержащихся в вакуумных маслах), и вторая — с откачкой турбомолекулярным насосом (“безмасляный” вакуум). Внутри камеры с масляным вакуумом размещалось нагревательное устройство, которое позволяло греть корпус с чипом до температур 250°C . Камера с безмасляным вакуумом (ее габариты составляли $150 \times 100 \times 90 \text{ мм}^3$) могла нагреваться целиком с использованием наружного нагревателя до температуры тоже 250°C . Для ее очистки от загрязнений раз в несколько месяцев проводился отжиг при максимальной температуре в течение 1 часа.

При самом простом алгоритме электроформовки на структуру подавался треугольный импульс напряжения (применялся прибор ИППП-1/2) с амплитудой 10–15 В (“плюс” на верхнем вольфрамовом электроде) и скоростью изменения напряжения 2 В/с. Одновременно фиксировалась вольтамперная характеристика (ВАХ), что позволяло контролировать ход процесса электроформовки. Использовалось ограничение тока на уровне порядка 100 мкА, чтобы минимизировать вероятность пробоя структуры при резком нарастании тока. Типичная кривая, отражающая процесс электроформовки, показана на рис. 2. Резкий скачок тока происходит на обратном ходе напряжения (участок 1), демонстрируя появление N-образной ВАХ, после чего структура остается в высокопроводящем состоянии (участок 2). Кроме возникновения N-образной ВАХ, критерием успешности электроформовки является возможность переключения структуры из высоко- в низкопроводящее состояние (“отключение”) и обратно (“включение”). Поэтому далее на нее подавался отключающий трапециевидный импульс напряжения с амплитудой 8 В и длительностями фронтов и “полочки” — по 100 нс (применялся генератор

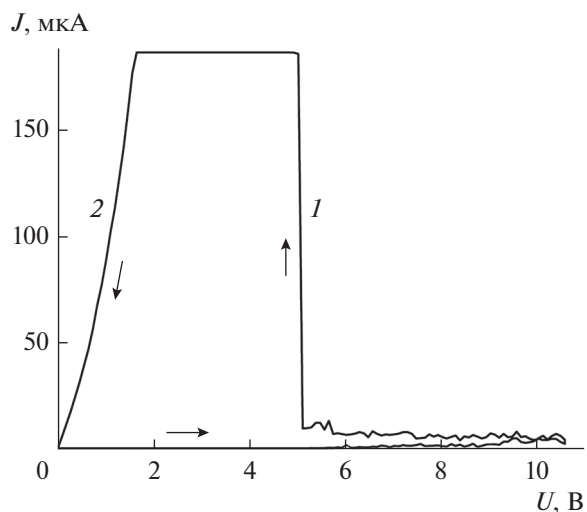


Рис. 2. Типичная ВАХ (U — напряжение между проводящими электродами, “плюс” на W электроде, J — ток через структуру) процесса электроформовки открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W треугольным импульсом со скоростью изменения напряжения 2 В/с. Ограничение тока на уровне 190 мкА. Структура находилась в масляном вакууме.

импульсов WW2572A). Структура переводилась в низкопроводящее состояние, что контролировалось последующим снятием ВАХ в диапазоне напряжений от 0 до 5 В. Кривая рис. 3 демонстрирует успешность “отключения” на предыдущем шаге и “включение” структуры при напряжении U_{th} около 3 В, соответствующем пороговому напряжению образования ЧПФ за счет электронного удара. При таком простейшем способе электроформовки вероятность успешного ее выполнения составляла около 90%, в 10% случаев структура пробивалась при напряжениях в диапазоне от 6 до 10 В.

По существующим представлениям, механизм электроформовки включает следующие процессы [8]. Сначала, на первой стадии, происходит образование ЧПФ за счет деструкции молекул SiO₂ на поверхности изолирующей шели при электронном ударе. Кислород удаляется в газовую фазу, а поверхность диэлектрика обогащается атомами кремния, которые, в первом приближении, и можно рассматривать как ЧПФ. На ВАХ этой стадии соответствует небольшое необратимое увеличение проводимости структуры (участок со скачками тока при больших напряжениях на рис. 2). На второй стадии накопление ЧПФ приводит к образованию связанного кластера — проводящей среды, что на ВАХ отражается резким увеличением тока (участок 1 на рис. 2), и разогреву структуры за счет джоулева тепла, запускающему балансировку процессов образования и исчезновения ЧПФ для определенного значения напряжения. При этом ток определяет шириной h (рис. 1) нанометрового изолирующего

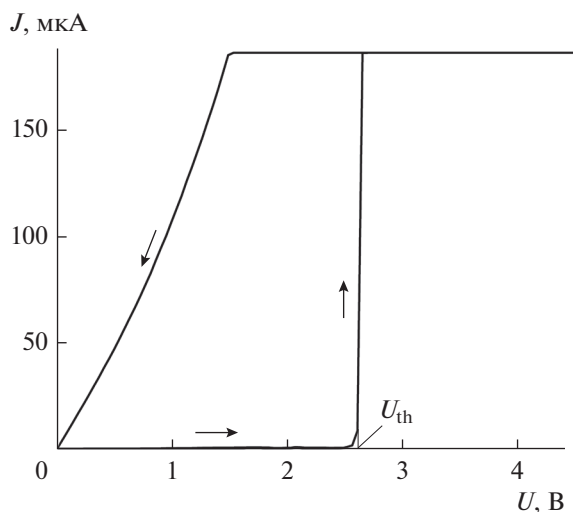


Рис. 3. Типичная ВАХ открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W после электроформовки в режимах, указанных на рис. 2, подтверждающая “отключение” элемента памяти коротким импульсом напряжения на предыдущем шаге и “включение” его при достижении порогового напряжения U_{th} . Скорость изменения напряжения 2 В/с. Ограничение тока на уровне 190 мкА. Структура находилась в масляном вакууме.

шего зазора (области, свободной от ЧПФ), самоформирующегося со стороны катода структуры. Когда при уменьшении напряжения достигается пороговое значение U_{th} для образования ЧПФ, ширина h изолирующего зазора перестает меняться и фиксируется на минимальном значении. При этом структура оказывается в высокопроводящем состоянии (участок 2 на рис. 2).

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

ВАХ рис. 2 и 3 были получены для процесса электроформовки в масляном вакууме. Полностью аналогичные кривые наблюдались и в безмасляном вакууме [13], если структуры предварительно не подвергались в нем отжигу. Изготовленные таким образом элементы памяти в дальнейшем могли функционировать длительное время, демонстрируя переключения состояний при подаче импульсов напряжения различной амплитуды и длительности в любой атмосфере, не содержащей кислород в слишком больших концентрациях [12, 14]. Подобные результаты и позволили, в свое время, предложить механизм процесса электроформовки и переключений [8], в котором ЧПФ образуются из поверхностных слоев диоксида кремния за счет деструкции его молекул при электронном ударе и удаления кислорода в газовую фазу. В таком механизме роль ЧПФ играют атомы кремния, хотя ранее считалось, что ЧПФ образуются из органических молекул, поэтому надо вести речь об углеродистой проводящей среде [15].

Однако оказалось, что после отжига в безмасляном вакууме, который первоначально планировалось использовать с целью очистки структур от “загрязняющего” адсорбированного слоя, образовавшегося в ходе их изготовления, электроформовка в безмасляном вакууме прекращалась. Отсутствовало не только возникновение N-образных ВАХ, но даже значительное нарастание тока при любых напряжениях вплоть до напряжений электрического пробоя диэлектрика. Типичные результаты при подаче на отожженные структуры обычного треугольного импульса напряжения приведены на рис. 4. Наблюдаются скачкообразные изменения тока со средним уровнем порядка микроампер, причем даже без использования специальных схем ограничения тока его значения не превышают этого уровня в течение длительного времени и в широком диапазоне напряжений. Проводимость структуры необратимо увеличивается, но незначительно, поэтому после снятия напряжения структура остается в низкопроводящем состоянии (ток меньше 1 нА при напряжении 1 В). Такие результаты можно трактовать так, что образование ЧПФ имеет место (очевидно, за счет деструкции поверхностного слоя SiO₂), что видно по необратимому увеличению проводимости структуры, т.е. электроформовка начинается, но формирования в изолирующей щели проводящей среды (накопления ЧПФ) не происходит.

В то же время, аналогичный отжиг (200°С в течение 1 часа) в масляном вакууме (содержащем органические молекулы) с последующей электроформовкой в нем к такому эффекту не приводил – наблюдались обычные ВАХ типа показанных на рис. 2 и 3, т.е. процесс электроформовки развивался обычным образом.

Такие результаты позволили предположить, что процесс электроформовки в части появления больших токов (порядка 100 мкА, как на рис. 2 и 3) и возникновения N-образной ВАХ, отражающих накопление ЧПФ и образование проводящей среды, контролируется наличием органических молекул в изолирующей щели структуры. После изготовления открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W присутствие на ее поверхностях органики обеспечивается использованием операций нанесения фоторезиста и неоднократной обработки в органических растворителях. Поэтому электроформовка даже в безмасляном вакууме без предварительного в нем отжига происходит обычным образом (как на рис. 2 и 3). Отжиг в безмасляном вакууме приводит к удалению органических молекул с поверхностей образца, в том числе, из изолирующей щели, а также со стенок камеры. При последующей подаче напряжения на структуру, находящуюся в том же “чистом” вакууме, из-за отсутствия органики и на поверхности структуры, и в газовой фазе, электроформовка не развивается, т.е. большие значения тока (порядка 100 мкА) не дости-

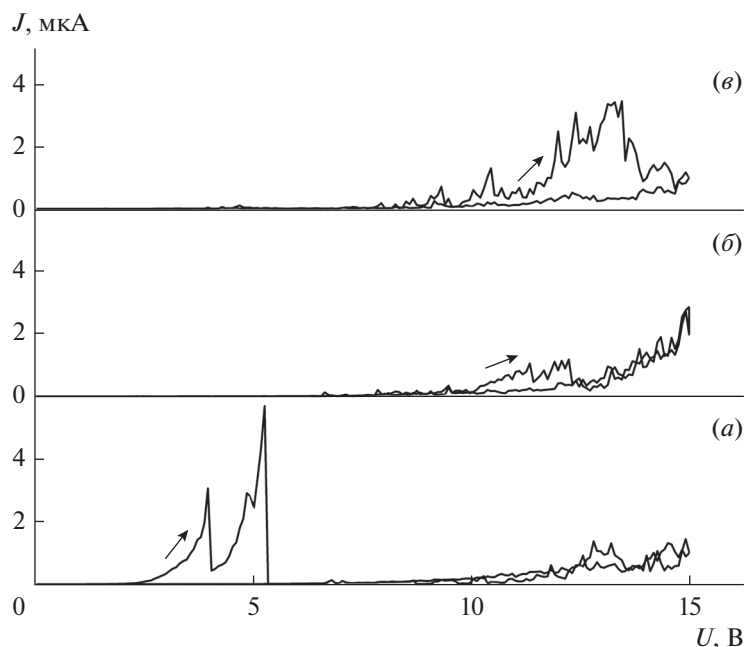


Рис. 4. ВАХ открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W в безмасляном вакууме при первичной подаче последовательно трех треугольных импульсов напряжения с амплитудой 15 В и скоростью его изменения 2 В/с (первая стадия выдержки под напряжением). Номер импульса: *a* – первый, *б* – второй, *в* – третий. Структура после отжига в безмасляном вакууме с температурой 200°C в течение 1 часа и охлаждения до комнатной температуры.

гаются. С другой стороны, такой же отжиг в масляном вакууме, тоже должен приводить к удалению с поверхностей структуры органики, накопившейся в процессе изготовления. Но органика вновь поступает на поверхность изолирующей щели из газовой фазы в виде органических молекул, содержащихся в вакуумных маслах, как в процессе остывания образца, так и в процессе электроформовки. Это и приводит к тому, что в этом случае электроформовка протекает обычным образом (как на рис. 2 и 3).

Такие предположения могли быть подтверждены, или опровергнуты, следующим экспериментом. Сначала образец проходит отжиг в безмасляном вакууме и в структуре выполняется начальная стадия электроформовки: образование небольшого количества ЧПФ в изолирующей щели, – путем экспозиции под напряжением тоже в безмасляном вакууме в режимах, аналогичных рис. 4. Затем образец перемещается в масляный вакуум, и в структуре проводится вторая стадия электроформовки: накопление ЧПФ, образование проводящей среды и самоформирование нанометрового изолирующего зазора. Успешность выполнения второй стадии должна обеспечиваться поступлением органических молекул из масляного вакуума. Причем, для ее выполнения достаточно подать напряжения, только несколько превышающие пороговое напряжение U_{th} образования ЧПФ (оно находится в диапазоне 3–4 В), поскольку “заро-

дыш” проводящей наноструктуры будет образован уже на первой стадии.

В контрольном эксперименте сначала было установлено, что перегрузка корпуса с чипом из камеры с безмасляным вакуумом через атмосферу в камеру с масляным вакуумом сама по себе не меняет сколько-нибудь заметно условия в изолирующей щели структуры. Для этого корпус с чипом после отжига в камере с безмасляным вакуумом и выполнения первой стадии экспозиции под напряжением (аналогично рис. 4) выгружался из камеры, выдерживался в комнатных условиях в течение часа (этого времени более чем достаточно для перегрузки) и возвращался опять в камеру с безмасляным вакуумом. Затем повторно подавались импульсы напряжения амплитудой до 16 В, токи по-прежнему не превышали нескольких мкА. Это означало, что поступление органических молекул из атмосферы за это время было незначительным.

В следующем эксперименте три структуры с одного чипа после отжига в безмасляном вакууме подвергались экспозиции под напряжением в режимах, аналогичных рис. 4 (первая стадия электроформовки). Затем корпус с чипом перегружался в камеру с масляным вакуумом, и на структуры подавались треугольные импульсы напряжения амплитудой от 4.5 до 6 В (вторая стадия электроформовки). Соответствующие ВАХ приведены на рис. 5. Как видно, окончательная электроформовка, выражающаяся в резком росте проводимости структуры (и тока

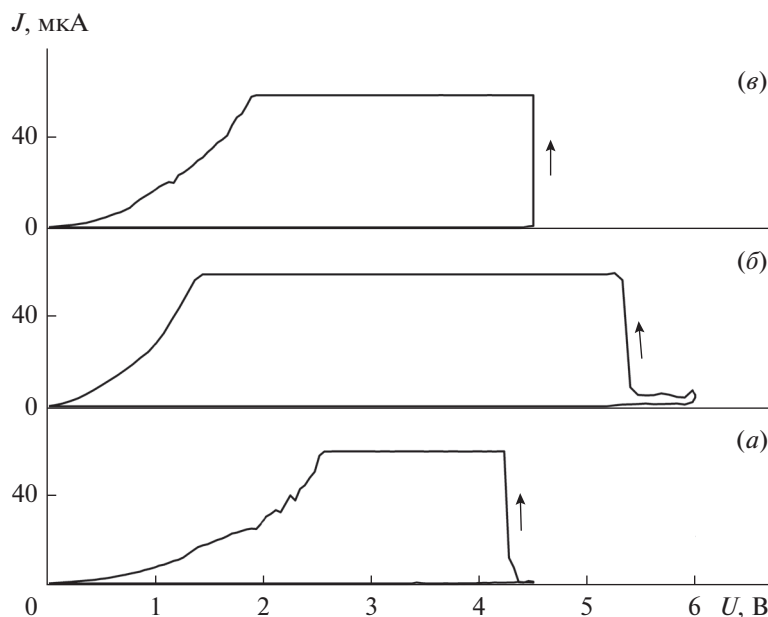


Рис. 5. ВАХ трех открытых “сэндвич”-структур TiN-SiO₂-W в масляном вакууме при подаче треугольного импульса напряжения с амплитудой 4.5–6 В и скоростью его изменения 2 В/с. Ограничение тока на уровне 60 мкА. Структуры после выполнения следующих операций: отжига их в безмасляном вакууме с температурой 200°C в течение 1 часа и охлаждения до комнатной температуры; подачи треугольных импульсов с амплитудой 15 В и скоростью изменения напряжения 2 В/с (в соответствии с рис. 4), число импульсов: *a* – один, *б* – два, *в* – три; переноса образца из камеры с безмасляным в камеру с масляным вакуумом.

до уровня 60 мкА), происходит на прямом (кривая *в*) или обратном (кривые *a* и *б*) ходе напряжения при его значениях от 4.5 до 5.5 В. Причем, нет жесткой корреляции между количеством импульсов (суммарной экспозицией), использованных на первой стадии, и “легкостью” выполнения второй стадии, а также проводимостью полученного состояния (левая часть обратной ветви ВАХ на рис. 5). После выполнения второй стадии структуры находились в высокопроводящем состоянии. Затем они “отключались” коротким (100 нс, 8 В) импульсом напряжения и на них подавался контрольный треугольный импульс амплитудой 4.5 В, все они продемонстрировали ВАХ, аналогичные рис. 3, что подтверждало успешность выполнения электроформовки.

Полученные результаты послужили основой для нового способа электроформовки, который позволил значительно уменьшить вероятность пробоя структур при резком росте тока (проводимости), что существенно увеличивает эффективность выполнения этой технологической операции. Две стадии в ходе электроформовки использовались и ранее [16]. Однако там обе они выполнялись в масляном вакууме, поэтому уменьшение вероятности пробоя за счет резкого роста проводимости структуры было не столь значительным. Здесь же, когда первая стадия выполняется после отжига и в безмасляном вакууме, развитие пробоя практически исключается во всем диапазоне напряже-

ний от 9 В, когда начинается процесс электроформовки [17], до напряжения электрического пробоя диэлектрика (при используемых толщинах SiO₂ около 25 нм, напряжение его пробоя находилось в пределах 18–20 В).

Существенным условием успешного выполнения двустадийной электроформовки является требование появления скачкообразно меняющегося тока со средним уровнем порядка микроампер на первой стадии (рис. 6). Если ток заметно меньше или он не меняется скачкообразно (рис. 6*a*, *б*), что должно свидетельствовать о начале процесса электроформовки, т.е. образования и исчезновения ЧПФ, то не будет успешным выполнение и второй стадии. В этом случае зародыш проводящей наноструктуры не образуется, а значит, не будет возможным и ее рост. Для большинства структур ток с необходимыми характеристиками появлялся уже при напряжениях 10 В, однако для части образцов этого напряжения не хватало (рис. 6*a*). Поэтому при выполнении первой стадии надо постепенно увеличивать значение напряжения в указанном диапазоне (от 9 В до значения, не приводящего к электрическому пробоя), пока не появится скачкообразно меняющийся ток со средним уровнем порядка микроампер (рис. 6*в*).

Особенностью ВАХ на третьем проходе (рис. 6*в*) является начало заметного увеличения тока при напряжении уже около 5.5 В на прямом проходе. Это дополнительно подтверждает то, что соответствующий

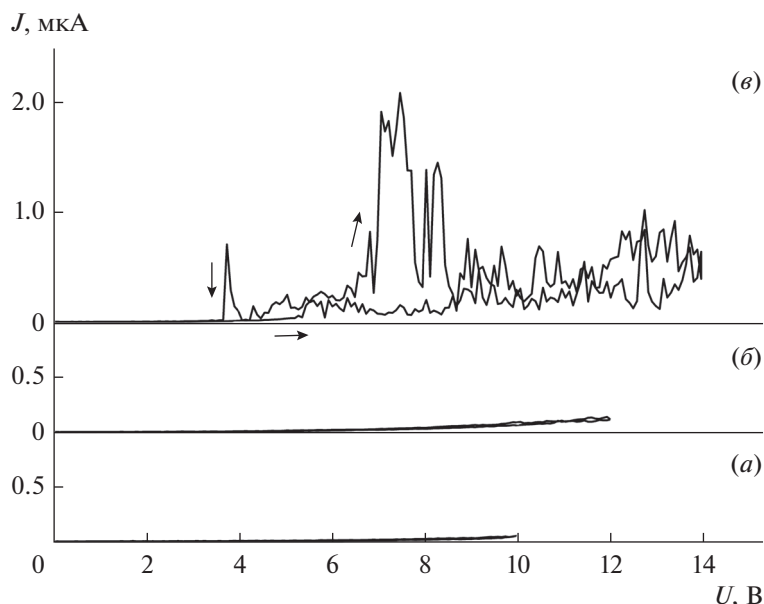


Рис. 6. ВАХ открытой «сэндвич»-структуры TiN-SiO₂-W в безмасляном вакууме при первичной подаче последовательно трех треугольных импульсов с увеличивающейся амплитудой и скоростью изменения напряжения 2 В/с. Номер импульса: *a* – первый, *б* – второй, *в* – третий. Структура после отжига в безмасляном вакууме с температурой 110°C в течение 1 часа и охлаждения до комнатной температуры. Скачкообразно меняющийся ток со средним уровнем порядка микроампер появился только на третьем импульсе.

щий процесс тоже имеет характер электроформовки, но она не развивается в таких условиях до токов больших нескольких микроампер.

Очевидный интерес представляло исследование влияния температуры отжига в безмасляном вакууме на достижение обнаруженного эффекта (отсутствия полноценной электроформовки). Поскольку грелась вакуумная камера целиком (см. выше), инерционность процессов нагрева и охлаждения была порядка часа. Поэтому время отжига при заданной температуре составляло 1 час и не менялось для всех экспериментов. Максимальная температура отжига была ограничена используемой конструкцией образца. В данном случае чип приклеивался к корпусу эпоксидным клеем, который может начинать выделять газообразные компоненты при температурах выше 200°C, поэтому температуры, большие этого значения, не применялись. Во всех экспериментах после отжига в безмасляном вакууме проводилось охлаждение образцов до комнатных температур, и только после этого на структуры подавалось напряжение. Результаты представлены в табл. 1.

Большая часть экспериментов была выполнена либо без отжига, либо при температуре отжига 200°C. Во втором случае обнаруженный эффект всегда наблюдался, в первом случае он всегда отсутствовал, т.е. электроформовка до конца проходила в соответствии с рис. 2 и 3. Как показали специальные эксперименты, граничная температура отжига, при которой эффект возникает, составляет

60°C (табл. 1). Этот результат означает, что органические молекулы, попавшие в изолирующую щель в ходе изготовления структур и инициирующие протекание электроформовки сразу до конца, эффективно удаляются уже при температуре 60°C и времени отжига 1 час.

Обращает на себя внимание низкое значение температуры, при которой удаляются критические для успешного выполнения электроформовки компоненты. Можно предположить, что они находятся в слабо связанном адсорбированном слое на поверхности изолирующей щели. Была выполнена серия экспериментов с целью установить, какая именно технологическая обработка, из применяемых при изготовлении структур, после отжига при 200°C восстановит полноценную их электроформовку. Проверялись следующие операции: кипячение в изопропиловом спирте (ИПС), обработка в диметилформамиде (ДМФА), нанесение и задубливание фоторезиста, подтравливание слоя SiO₂ на поверхности изолирующей щели в составе, содержащем плавиковую кислоту. Оказалось, что для восстановления полноценной электроформовки потребовалось выполнение всей технологической цепочки: подтравливание SiO₂, нанесение и задубливание фоторезиста, снятие его в ДМФА. Отдельно подтравливание SiO₂ или нанесение, задубливание и удаление фоторезиста приводило к только частичному восстановлению электроформовки (до токов больших единиц мкА, но меньших контрольных 60 мкА, рис. 5). Это позволяет

Таблица 1. Поведение открытых “сэндвич”-структур TiN-SiO₂-W в безмасляном вакууме при первичной подаче треугольных импульсов напряжения после отжига в течение 1 часа при различных температурах в безмасляном вакууме

Температура отжига, °С	Количество структур	Поведение при первичной подаче треугольных импульсов напряжения
Без отжига	43	Обычная электроформовка (амплитуда импульсов от 10 до 16 В)
40	2	Обычная электроформовка (амплитуда импульсов 12 В)
50	3	Обычная электроформовка (амплитуда импульсов от 10 до 14 В)
60	6	Электроформовка отсутствует (пробой при 18–20 В)
100	9	Электроформовка отсутствует (пробой при 18–20 В)
200	23	Электроформовка отсутствует (пробой при 18–20 В)

предположить, что для эффективного удержания в изолирующей щели органических молекул, приводящих к полноценной электроформовке, необходимы и “разрыхление” поверхности SiO₂ в ходе его травления, и последующий контакт ее с фоторезистом, содержащим органику.

В целом, полученные в данной работе результаты позволяют сделать вывод о принципиальной важности наличия органических молекул на поверхности изолирующей щели для успешного выполнения второй стадии электроформовки открытых “сэндвич”-структур TiN-SiO₂-W. Эта стадия предполагает накопление ЧПФ (образование проводящей среды) и самоформирование нанометрового изолирующего зазора, что проявляется в значительном росте тока через структуру и возникновении N-образной ВАХ. Как минимум, можно предполагать каталитическое действие органики для процесса образования проводящей среды в поверхностном слое диоксида кремния. Однако, скорее всего, органические молекулы принимают непосредственное участие в образовании и накоплении ЧПФ, т.е. надо вести речь об углеродистой проводящей среде, как это утверждалось в [15]. К такому выводу подталкивают и результаты, полученные в [17], где показано, что переключения состояний в структурах после электроформовки не обязательно предполагают обмен веществом (кислородом) между поверхностью изолирующей щели и газовой фазой. А это, наряду с наблюдением электроформовки в безмасляном вакууме, было одним из главных соображений, побудивших в свое время перейти от представлений об углеродистой проводящей среде к проводящей среде, представляющей собой поверхностный слой SiO₂, обогащенный атомами кремния [8]. Впрочем, процесс удаления кислорода с поверхности диэлектрика может быть существенным на первой стадии электроформовки, когда образуется зародыш будущей проводящей наноструктуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Продемонстрировано существенное влияние наличия или отсутствия органических молекул в изолирующей щели открытых “сэндвич”-МДМ-структур на характер процесса их электроформовки. Удаление органики путем предварительного отжига в безмасляном вакууме и выполнения в нем же электроформовки приводит к невозможности протекания второй ее стадии — накопления частиц проводящей фазы и образования проводящей среды, что проявляется в отсутствии на ВАХ резкого увеличения тока. Процесс останавливается на первой стадии — образовании зародыша будущей проводящей наноструктуры. В то же время, вторая стадия электроформовки легко выполняется после помещения отожженных структур в масляный вакуум, обеспечивающий поступление органических молекул на поверхность изолирующей щели. Полученные результаты позволяют утверждать, что в процессе электроформовки таких структур должна формироваться проводящая наноструктура, содержащая именно углеродистую проводящую среду, образующуюся из органических молекул.

Предложен новый способ электроформовки, включающий проведение первой ее стадии в безмасляном вакууме после отжига структуры, а второй стадии — в масляном вакууме при пониженных напряжениях. Способ позволяет практически исключить пробои структур при резком увеличении тока, что повышает эффективность выполнения операции электроформовки.

Работа выполнена в рамках Государственного задания Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технологического института имени К.А. Валиева Российской академии наук Министерства образования и науки Российской Федерации по теме № FFNN-2022-0018.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают признательность за участие в изготовлении экспериментальных образцов В.В. Наумову,

Л.В. Левиной, Д.Н. Сергушову, А.А. Хребтюгову, А.И. Якубинской.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Abunahla H., Mohammad B.* Memristor Device Overview. In: Memristor Technology: Synthesis and Modeling for Sensing and Security Applications. Analog Circuits and Signal Processing. Cham: Springer. 2018. 106 p.
2. *Sun W., Gao B., Chi M., Xia Q., Yang J.J., Qian H., Wu H.* Understanding memristive switching via in situ characterization and device modeling // Nat. Commun. 2019. V. 10. P. 3453-1-13.
3. *Ielmini D.* Resistive switching memories based on metal oxides: mechanisms, reliability and scaling // Semicond. Sci. Technol. 2016. V. 31. P. 063002-1-25.
4. *Белов А.Н., Перевалов А.А., Шевяков В.И.* Мемристорные структуры для микро- и наноэлектроники. Физика и технология // Изв. Вузов. Электроника. 2017. Т. 22. № 4. С. 305–321.
5. *Mehonic A., Shluger A.L., Gao D., Valov I., Miranda E., Ielmini D., Bricalli A., Ambrosi E., Li C., Yang J.J., Xia Q., Kenyon A.J.* Silicon Oxide (SiO_x): A Promising Material for Resistance Switching? // Adv. Mater. 2018. P. 1801187-1–21.
6. *Тихов С.В., Горшков О.Н., Антонов И.Н., Касаткин А.П., Королев Д.С., Белов А.И., Михайлов А.Н., Тельбаум Д.И.* Изменение иммитанса при электроформовке и резистивном переключении в мемристивных структурах “металл-диэлектрик-металл” на основе SiO_x // ЖТФ. 2016. Т. 86. Вып. 5. С. 107–111.
7. *Захаров П.С., Италиянцев А.Г.* Эффект переключения электрической проводимости в структурах металл–диэлектрик–металл на основе нестехиометрического оксида кремния // Труды МФТИ. 2015. Т. 7. № 2. С. 113–118.
8. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л.* Электроформовка как процесс самоформирования проводящих наноструктур для элементов энерго-независимой электрически перепрограммируемой памяти // Российские нанотехнологии. 2009. Т. 4. № 1–2. С. 174–182.
9. *Chang Y.F., Fowler B., Zhou F., Chen Y.-C., Lee J.C.* Study of self-compliance behaviors and internal filament characteristics in intrinsic SiO_x-based resistive switching memory // Appl. Phys. Lett. 2016. V. 108. 033504.
10. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л.* Высокостабильная энергонезависимая электрически перепрограммируемая память на самоформирующихся проводящих наноструктурах // Российские нанотехнологии. 2009. Т. 4. № 1–2. С. 183–191.
11. *Мордвинцев В.М., Горлачев Е.С., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л.* Влияние давления кислорода на переключения мемристоров на основе электроформованных открытых “сэндвич”-структур // Микроэлектроника. 2020. Т. 49. № 4. С. 287–296.
12. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л., Цветкова Л.А.* Влияние давления газовой среды и длительности управляющих импульсов на стабильность характеристик элементов памяти на основе электроформованных структур Si-SiO₂-W // Микроэлектроника. 2010. Т. 39. № 5. С. 337–347.
13. *Мордвинцев В.М., Горлачев Е.С., Кудрявцев С.Е.* Влияние режима электроформовки на устойчивость переключений мемристоров на основе открытых “сэндвич”-структур в среде кислорода // Микроэлектроника. 2021. Т. 50. № 3. С. 175–183.
14. *Gorlachev E.S., Mordvintsev V.M., Kudryavtsev S.E.* Study of inert gas pressure influence on electroforming and resistive switching of TiN-TiO₂-SiO₂-W memristors // Proceedings of the International conference “Micro- and nanoelectronics 2021” ICMNE-2021. Book of Abstracts. Moscow. 2021. P. P1–01.
15. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л.* Особенности процесса самоорганизации углеродистых проводящих наноструктур при электроформовке открытой “сэндвич”-структуры металл-изолятор-металл с нанометровой изолирующей щелью // ЖТФ. 1998. Т. 68. Вып. 11. С. 85–93.
16. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е.* Исследование электрических характеристик элементов памяти на самоформирующихся проводящих наноструктурах в виде открытой “сэндвич”-структуры TiN-SiO₂-W // Микроэлектроника. 2013. Т. 42. № 2. С. 93–104.
17. *Мордвинцев В.М., Кудрявцев С.Е., Левин В.Л.* Влияние толщины слоя диоксида кремния на процесс электроформовки в открытых “сэндвич”-структурах TiN-SiO₂-W // ЖТФ. 2018. Т. 88. Вып. 11. С. 1681–1688.

ЭФФЕКТИВНОСТЬ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ СБОЕ- И ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ БЛОКОВ СТАТИЧЕСКОЙ ОПЕРАТИВНОЙ ПАМЯТИ

© 2022 г. Л. А. Щигорев*

АО Научно-технический центр “Модуль”,
4-я ул. 8 Марта, 3, Москва, 125190 Россия

*E-mail: l.shchigorev@module.ru

Поступила в редакцию 27.12.2021 г.

После доработки 22.02.2022 г.

Принята к публикации 28.02.2022 г.

Предложена методика оценки вероятности работоспособности блока памяти, состоящего из нескольких массивов, с учетом использования различных способов повышения сбое- и отказоустойчивости, в зависимости от количества неработоспособных ячеек блока памяти. Представлены аналитические результаты для блока памяти емкостью 4Кх128, собранного из массивов, хранящих информационные слова различной длины. Рассмотрены блоки памяти при реализации следующих способов повышения сбое- и отказоустойчивости: контроля четности; обнаружения и исправления одиночных ошибок; резервирования столбцами. При этом изменяются общая площадь блока и время выборки данных. На базе интерполяционного метода предложено аналитическое выражение для оценки эффективности использования дополнительных аппаратно-временных ресурсов.

Ключевые слова: система на кристалле (СнК), статическая оперативная память (СОЗУ), обнаружение и коррекция ошибок, резервные столбцы, количество парировуемых дефектов

DOI: 10.31857/S054412692204010X

1. ВВЕДЕНИЕ

Основой современных высокопроизводительных вычислительных систем являются микропроцессоры, реализованные в составе “систем на кристалле” (СнК) [1, 2]. Производительность процессора определяется такими факторами как рабочая частота и архитектура. В свою очередь одной из ключевых характеристик архитектуры является встроенная кэш памяти микропроцессора. Варьируются уровни кэш памяти, типы хранимой информации и объем. Помимо блоков кэш памяти в составе СнК используются оперативная память, буфера коммуникационной среды и контроллеры ввода-вывода. По оценкам экспертов Semico Research Corp устройства памяти могут занимать до 75% площади современных СнК [3]. В следствие этого одной из важнейших задач при проектировании электронных систем является обеспечение достоверности хранения и передачи информации. Большинство современных микросхем производятся по коммерческому суб-100-нм технологическим процессам. Ячейки памяти в таких устройствах имеют повышенную чувствительность к внешним воздействиям и изменениям напряжения питания, которые вызывают сбои и отказы [4–6].

Для повышения сбое- и отказоустойчивости блоков СОЗУ, входящих в состав СнК, применяются методы обнаружения и исправления одиночных ошибок, а также вводятся резервные элементы [7]. Простейшим способом обнаружения однократной ошибки (в общем случае, ошибки нечетной кратности) является контроль четности [8]. Для парирования одиночных ошибок памяти используются устройства на базе корректирующих кодов Хемминга или Хсяо [8–10]. Они успешно справляются как со сбоями, возникающими в процессе активной работы, так и с постоянными дефектами. Но при парировании ячеек, в которых произошел отказ, корректирующая способность теряется, и следующая неисправность может привести к непоправимой ошибке работы системы. Для парирования неработоспособных ячеек памяти вследствие производственных дефектов, а также приобретенных отказов в процессе эксплуатации, в состав блоков памяти могут быть введены резервные элементы [11]. В случае производственного контроля достаточно использовать внешнее тестовое оборудование для детектирования неработоспособных ячеек памяти и энергонезависимую память для хранения данных об однократной замене, но при применении резервных элементов в процессе эксплуа-

тации необходимо иметь устройства тестирования и реконфигурации памяти непосредственно в составе СнК [12].

Использование кодов коррекции и резервных элементов по отдельности имеет ряд ограничений. Для устройств на базе кодов обнаружения и коррекции ошибок это определяется ограничением в исправлении одиночной ошибки на информационное слово и неэффективное использование при парировании производственных дефектов. Резервные элементы, в свою очередь, не могут бороться со сбоями, возникающими “на лету”. Комбинированное использование обоих методов приводит к росту числа парированных неработоспособных ячеек памяти [13].

Эффективность применения различных методов повышения сбое- и отказоустойчивости оценивается по вероятности работоспособности блока памяти в зависимости от количества неработоспособных ячеек памяти [14]. Архитектурная организация СнК нередко использует 32–128 разрядные блоки памяти, из-за соответствия размерам шин передачи данных. Повышение корректирующей способности устройств на базе кодов Хэмминга может быть достигнуто при разбиении таких блоков на массивы, хранящие меньшие по размерности информационные слова. В данной статье предлагается метод расчета вероятности работоспособности памяти при разбиении блока, а также представлен комплексный критерий оценки оптимального баланса между достигаемой надежностью от применения различных методов повышения сбое- и отказоустойчивости памяти и затрачиваемыми в ходе их реализации дополнительными ресурсами аппаратуры.

2. ВЕРОЯТНОСТЬ РАБОТОСПОСОБНОСТИ ПАМЯТИ ПРИ РАЗБИЕНИИ БЛОКА

Известными являются зависимости вероятности работоспособности памяти от числа неработоспособных ячеек памяти для одного блока при использовании исправления одиночной ошибки и резервных элементов $Y_1(d)$ [14]. Предположим, что память собрана из k таких блоков. Необходимо определить вероятность того что ни один из них не выйдет из строя после того, как суммарное число неработоспособных ячеек во всех составных блоках станет равным d . В работе предлагается способ расчета вероятности работоспособности памяти при разбиении блока памяти на основе формулы Бернулли.

Во-первых, необходимо определить вероятность попадания i дефектов в любой из k блоков, после того, как суммарное число неработоспособных ячеек во всех блоках станет равным d . Это можно сделать, воспользовавшись формулой Бернулли:

$$Y(i) = \binom{d}{i} \left(\frac{1}{k}\right)^i \left(1 - \frac{1}{k}\right)^{d-i}. \quad (1)$$

Вероятность того, что выйдет из строя хотя бы один блок равна произведению следующих величин:

– вероятности выхода из строя произвольного блока

$$\sum_{i=1}^d (1 - Y_1(i)) Y(i),$$

– вероятности попадания в произвольный блок $1/k$;

– количества блоков k ;

$$\sum_{i=1}^d (1 - Y_1(i)) Y(i) k \frac{1}{k}. \quad (2)$$

Тогда вероятность работоспособности блока, состоящего из k составных блоков равна:

$$1 - \sum_{i=1}^d (1 - Y_1(i)) Y(i). \quad (3)$$

Наглядно предложенный метод вычисления вероятности работоспособности памяти в зависимости от количества неработоспособных ячеек продемонстрирован на рис. 1–5 для:

– 5 реализаций блока памяти, хранящего 4Кх128 информационных слов:

- из 16-ти блоков, хранящих 8-разрядные слова (А);
- из 8-ми блоков, хранящих 16-разрядные слова (Б);
- из 4-х блоков, хранящих 32-разрядные слова (В);
- из 2-х блоков, хранящих 64-разрядные слова (Г);
- из 1-го блока, хранящего 128-разрядные слова (Д);

– для 4 способов повышения сбое- и отказоустойчивости:

- 2 резервных столбца;
- исправление одиночной ошибки;
- исправление одиночной ошибки + 1 резервный столбец;
- исправление одиночной ошибки + 2 резервных столбца.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

– предложен способ оценки количества парированных дефектов для блока памяти с разбиением на основе формулы Бернулли;

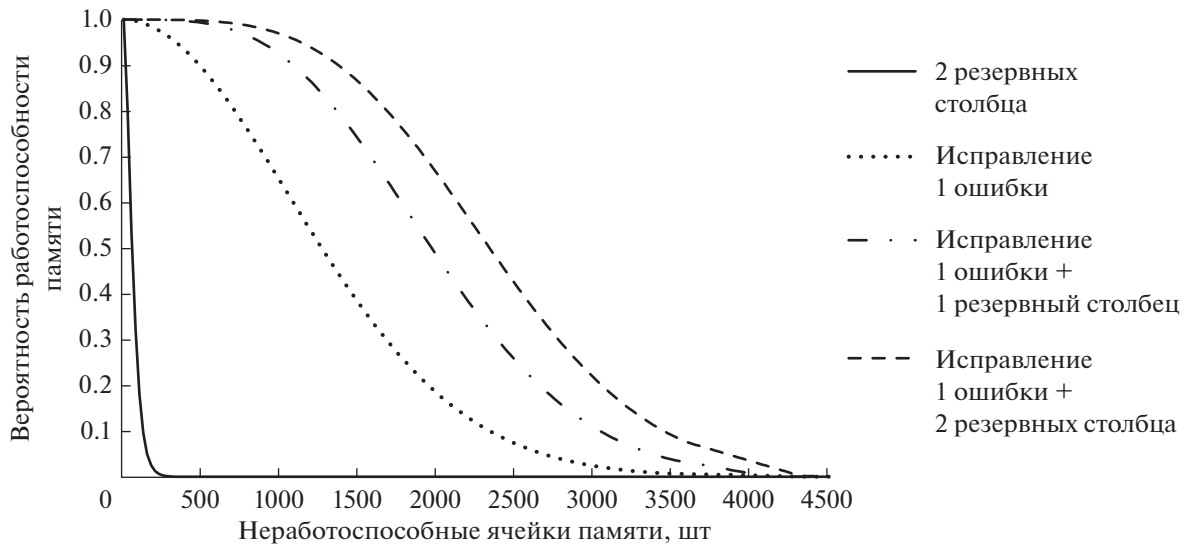


Рис. 1. Зависимость вероятности работоспособности памяти для разбиения А.

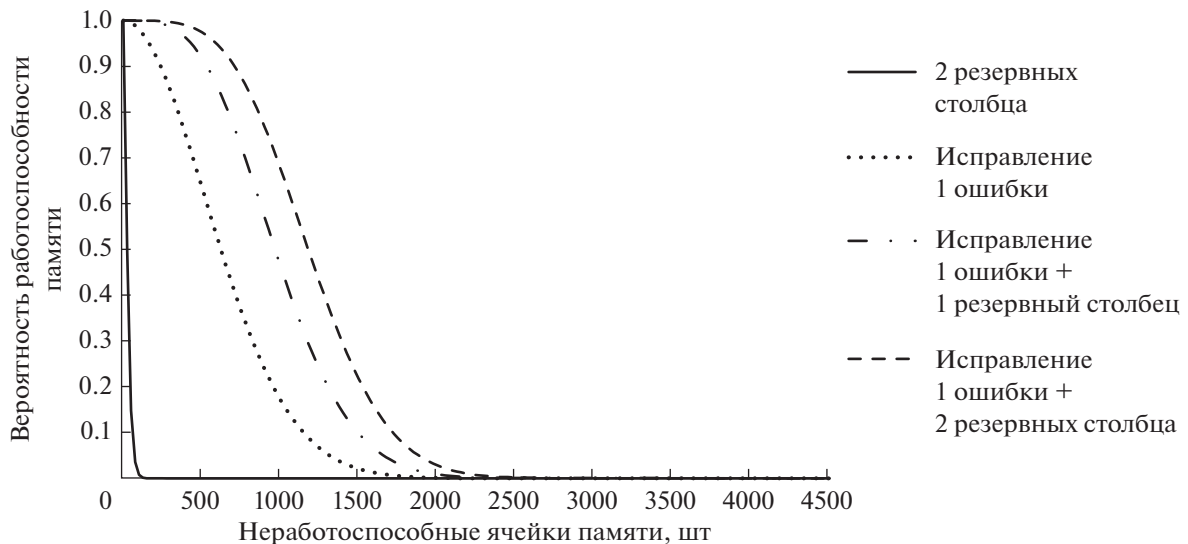


Рис. 2. Зависимость вероятности работоспособности памяти для разбиения Б.

– при использовании двух резервных столбцов и 10 покрываемых поврежденных ячейках вероятность работоспособности памяти растет в 200 раз при реализации В и в 300 раз при реализации А;

– при исправлении одиночной ошибки для реализаций А и Д число покрываемых неработоспособных ячеек памяти растет в 16 раз;

– при совместном использовании исправления одиночной ошибки и резервных столбцов число покрываемых неработоспособных ячеек памяти растет в 13 раз для вероятности работоспособности памяти равной 99% и в 15 раз для 90% при сравнении реализаций А и Д.

3. КОМПЛЕКСНЫЙ КРИТЕРИЙ ОЦЕНКИ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ СБОЕ-И ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ ПАМЯТИ

Применение любых методов повышения сбое- и отказоустойчивости блоков памяти ведет не только к росту числа парируемых неработоспособных ячеек, но и к росту площади кристалла, занимаемой памятью, а также росту времени выборки данных. Для общей оценки эффективности предлагается построить функцию $X(c, d, t)$ при помощи интерполяционного метода, где d – количество парируемых неработоспособных ячеек памяти рассматриваемого метода, изменяющаяся в пределах $[1; +\infty)$;

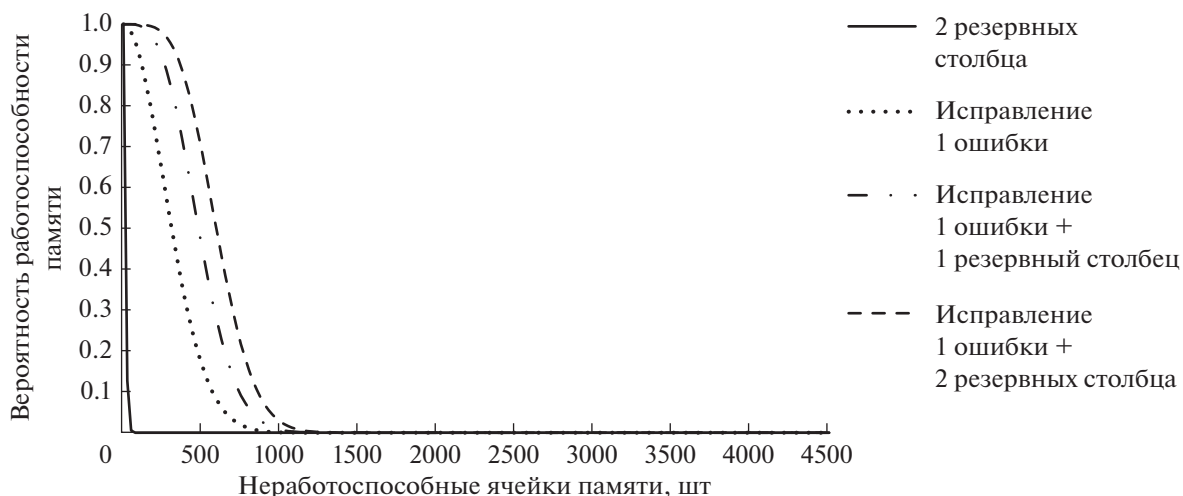


Рис. 3. Зависимость вероятности работоспособности памяти для разбиения В.

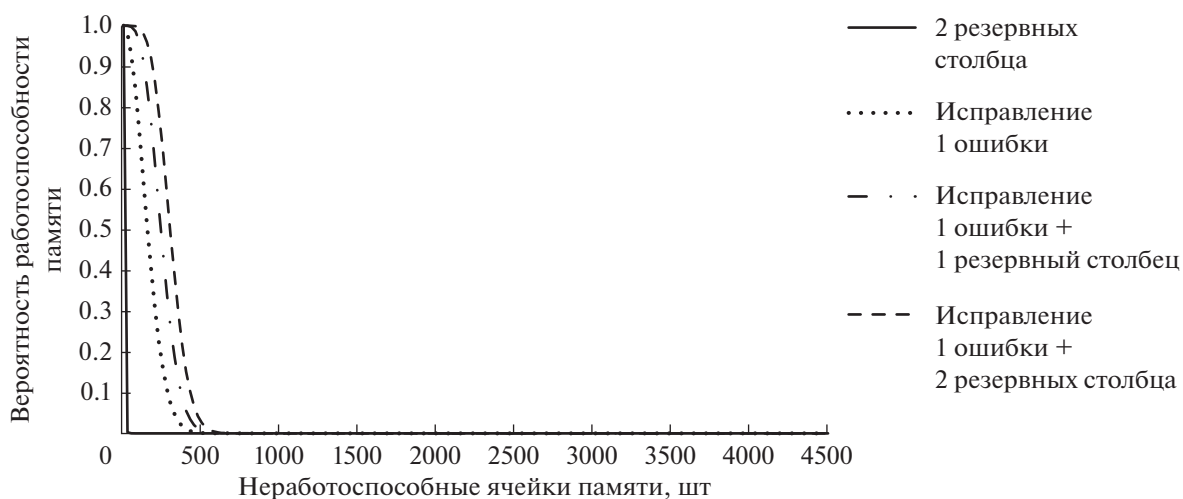


Рис. 4. Зависимость вероятности работоспособности памяти для разбиения Г.

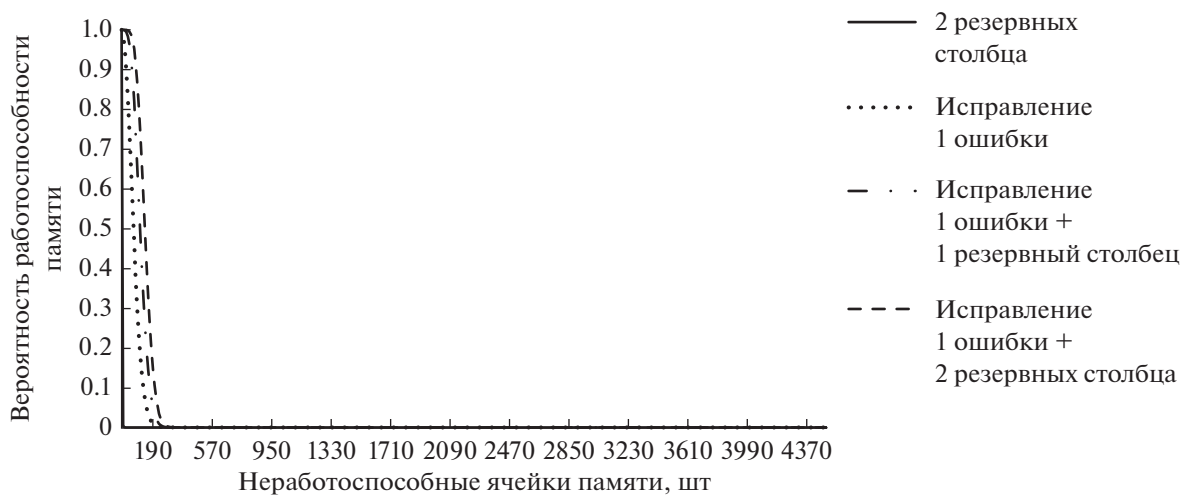


Рис. 5. Зависимость вероятности работоспособности памяти для разбиения Д.

Таблица 1. Функции критериев

t	Приоритет оценки	Функция
0	Минимальные затраты	c
1/2	Баланс между затратами и парируемыми дефектами	c/d
1	Наибольшее число парируемых дефектов	$1/d$

c – сложность реализации (аппаратурные и временные затраты), изменяющаяся в пределах $[2; +\infty)$; t – приоритет оценки, изменяющийся в пределах $[0; 1]$. В табл. 1 приведены функции для различных критериев оценки.

При равноотстоящих узлах интерполяции и интерполировании вперед можно использовать прямую интерполяционную формулу Ньютона. Интерполирующий полином ищется в виде:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}). \quad (4)$$

Коэффициенты a_i находятся по следующей формуле:

$$a_i = \frac{\Delta^i f_0}{i! h^i}, \quad (5)$$

где h – шаг интерполяции, $i = 1, 2, \dots, n$.

Конечные разности первого порядка находятся по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \Delta f_0 &= f_1 - f_0; \\ \Delta f_1 &= f_2 - f_1; \\ &\dots \\ \Delta f_{n-1} &= f_n - f_{n-1}, \end{aligned} \quad (6)$$

где f_i – значения в соответствующих точках x_i .

Конечные разности второго порядка находятся по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \Delta^2 f_0 &= f_2 - f_1 - f_0; \\ \Delta^2 f_1 &= f_3 - f_2 - f_1; \\ &\dots \\ \Delta^2 f_{n-2} &= f_{n-1} - f_{n-2}. \end{aligned} \quad (7)$$

Конечные разности высших порядков находятся по следующим формулам:

$$\begin{aligned} \Delta^k f_0 &= \Delta^{k-1} f_1 - \Delta^{k-1} f_0; \\ \Delta^k f_1 &= \Delta^{k-1} f_2 - \Delta^{k-1} f_1; \\ &\dots \\ \Delta^k f_{n-2} &= \Delta^{k-1} f_{n-1} - \Delta^{k-1} f_{n-2}. \end{aligned} \quad (8)$$

В результате прямая интерполяционная формула Ньютона будет записана следующим образом:

$$P_n(x) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{1!h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 f_0}{2!h^2}(x - x_0) \times (x - x_1) + \dots + \frac{\Delta^n f_0}{n!h^n}(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}). \quad (9)$$

Шаг интерполяции равен:

$$h = t - t_0 = t_2 - t_1 = 0.5. \quad (10)$$

Функция оценки эффективности комбинированных методов примет следующий вид:

$$\begin{aligned} X(t) &= f_0 + \frac{\Delta f_0}{h}(t - t_0) + \\ &+ \frac{\Delta^2 f_0}{2h^2}(t - t_0)(t - t_1) = f_0 + \frac{\Delta f_0}{0.5}(t - 0) + \\ &+ \frac{\Delta^2 f_0}{0.5}(t - 0)(t - 0.5) = 2\Delta^2 f_0 t^2 + \\ &+ (2\Delta f_0 - \Delta^2 f_0)t + f_0. \end{aligned} \quad (11)$$

В табл. 2 представлены конечные разности.

Тогда функция оценки эффективности комбинированных методов будет записана следующим образом:

$$X(t) = 2k^2 \left(\frac{cd - 2c + 1}{d} \right) + k \left(\frac{4c - 3cd - 1}{d} \right) + c. \quad (12)$$

Чем меньше $X(t)$, тем лучше. Экстремум в том случае, если сложность c наибольшая, а количество парируемых дефектов d наименьшее.

4. ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ КОМБИНИРОВАННЫХ МЕТОДОВ ПОВЫШЕНИЯ СБОЕ-ОТКАЗОУСТОЙЧИВОСТИ ПАМЯТИ

Аппаратурные и временные затраты для методов повышения сбое- и отказоустойчивой памяти объе-

Таблица 2. Конечные разности

i	t	f	Δf	$\Delta^2 f$
0	0	c	$\frac{c}{d} - c$	$\frac{1 - 2c + cd}{d}$
1	0.5	$\frac{c}{d}$	$\frac{1 - c}{d}$	–
2	1	$\frac{1}{d}$	–	–

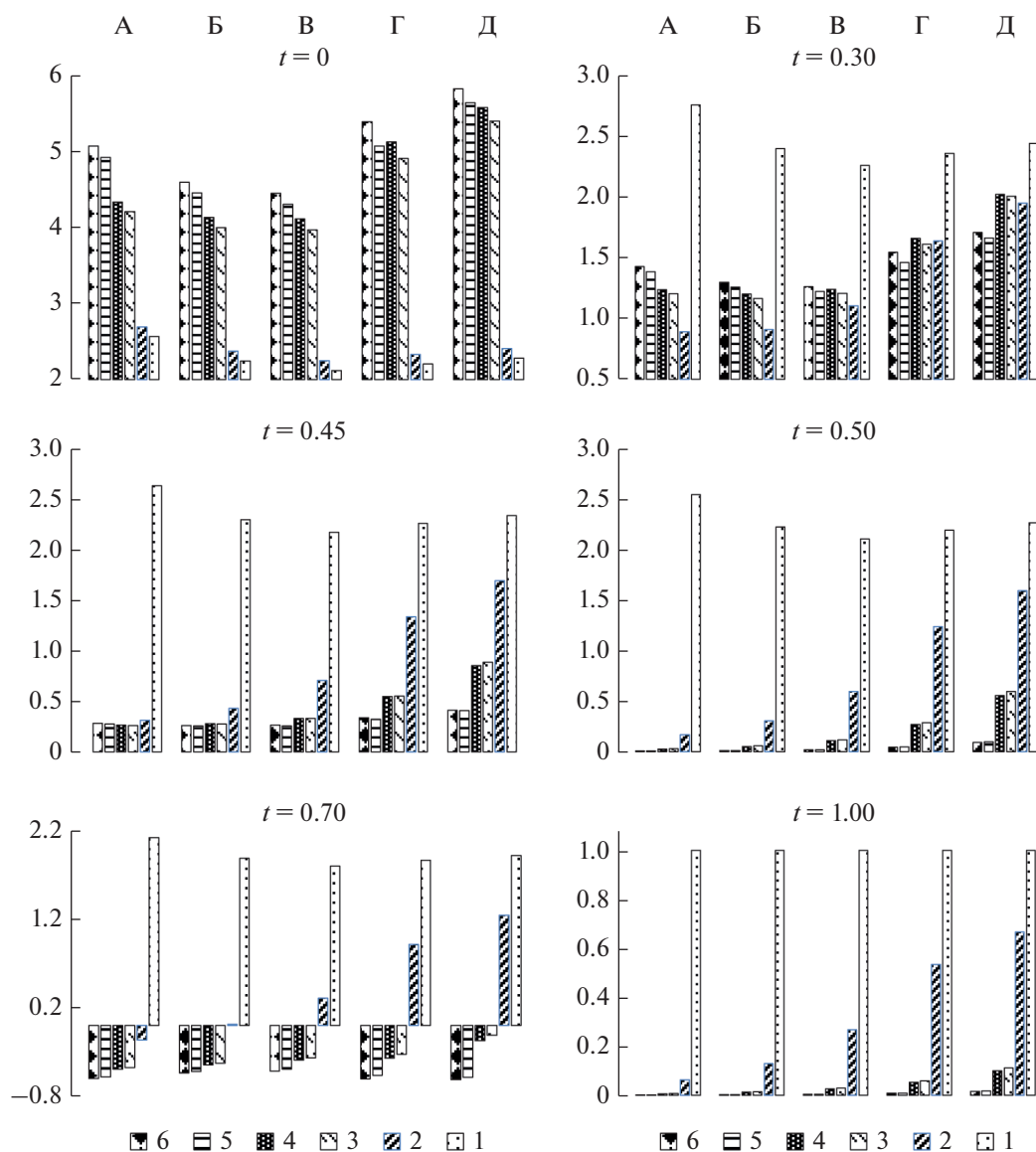


Рис. 6. Функция оценки эффективности при различных значениях коэффициента приоритета для всех методов повышения сбое- и отказоустойчивости.

мом 4Кх128 для проектно-технологической нормы 28 нм рассмотрены автором в предыдущих работах [15, 16]. В табл. 3 пронумерованы рассматриваемые способы повышения сбое- и отказоустойчивости блоков памяти.

Для оценки сложности предлагается рассмотреть величины площади кристалла и время выборки, нормированные на наименьший вариант реализации (без защиты), и вычислить их сумму по формуле:

Таблица 3. Методы повышения сбое- и отказоустойчивости

№ варианта	Метод
1	Без защиты
2	Побайтовый контроль четности
3	Исправление одиночной ошибки
4	Побайтовый контроль четности + исправление одиночной ошибки
5	Исправление одиночной ошибки + 2 резервных столбца
6	Исправление одиночной ошибки + 2 резервных столбца + побайтовый контроль четности

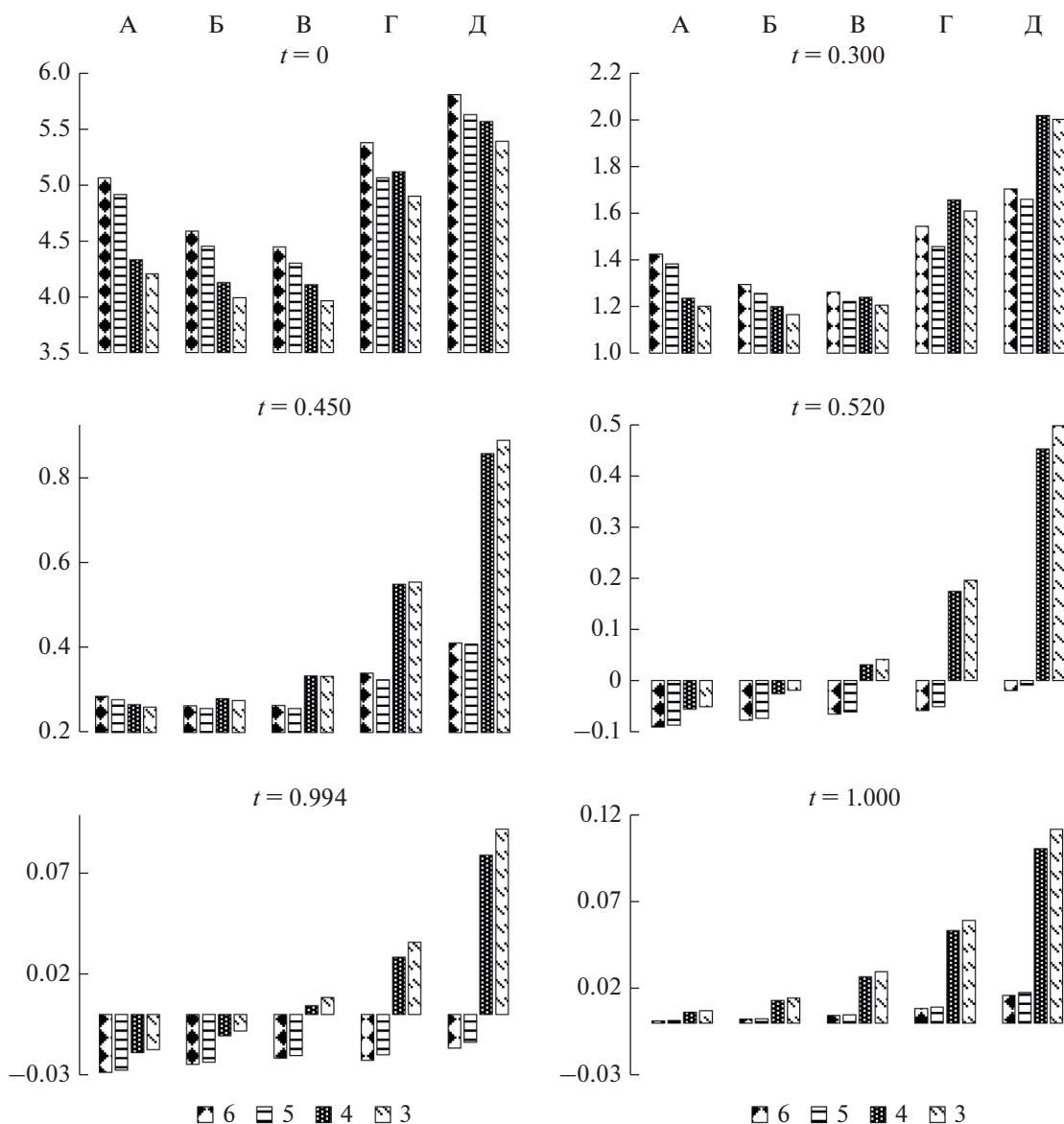


Рис. 7. Функция оценки эффективности при различных значениях коэффициента приоритета для методов повышения сбое- и отказоустойчивости с исправлением одиночной ошибки.

$$c = \frac{S}{S_{\min}} + \frac{T}{T_{\min}} \tag{13}$$

Для оценки парируемых неработоспособных ячеек памяти (*d*) рассмотрены величины соответствующие вероятности работоспособности памяти равной 99%. Для вариантов с контролем четности (2, 4 и 6) вводится повышающий коэффициент 1.11 относительно вариантов без контроля четности (1, 3 и 5). Для варианта без защиты (1) предлагается ввести номинальное значение *d* равное 1.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для удобства восприятия диаграммы представлены в двух видах: на рис. 6 приведены зависимости

для всех рассматриваемых случаях, включая не защищенный вариант и реализацию только с побайтовым контролем четности, а на рис. 7 отображены результаты только для вариантов, включающих в себя исправление одиночной ошибки.

Когда приоритет оценки заключается в минимальных аппаратных затратах (*t* = 0) ожидаемо наилучшими вариантами выглядят не защищенная реализация (1) и побайтовый контроль четности (2). Среди способов, содержащих исправление одиночной ошибки, наилучшей реализацией является “чистый” вариант (3).

При увеличении *t* критерий оценки меняется в сторону плавного роста влияния числа парируемых дефектов, а варианты 1 и 2 с отрывом становятся худшими. Дальнейший анализ имеет

смысл для вариантов с исправлением одиночной ошибки по рис. 7. При росте t в диапазоне от 0 до 0.5 наиболее предпочтительным вариантом выглядит “чистое” исправление одиночной ошибки (3) и почти вровень с ним идет комбинация исправление одиночной ошибки и контроля четности (4). Сравнение вариантов разбиения показывает некоторое преимущество для деления на 8 (Б) и на 4 (В).

При переходе через точку баланса ($t = 0.5$) верх берут варианты комбинации исправления одиночной ошибки и резервных столбцов (5 и 6), так как в этой области преимущество переходит к реализациям с наибольшим числом парированных дефектов. Варианты разбиения на 4 (В), 8 (Б) и 16 (А) обладают небольшим преимуществом с перевесом в сторону более дискретной реализации А.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье предложена методика оценки вероятности работоспособности блока памяти, состоящего из нескольких массивов, с учетом использования различных способов повышения сбое- и отказоустойчивости, в зависимости от количества сбоев и отказов в ячейках памяти. Также сформулирован комплексный критерий нахождения баланса между достигаемой надежностью и дополнительными ресурсами аппаратуры. Представлены аналитические результаты для блока памяти емкостью 4Кх128, собранного из массивов, хранящих информационные слова различной длины, и реализующего различные комбинации способов повышения сбое- и отказоустойчивости. Результаты исследования могут применяться разработчиками СнК при проектировании блоков памяти, учитывая требованиями парирования неработоспособных ячеек как в следствии производственных дефектов, так и приобретенных в процессе эксплуатации сбоев и отказов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шагурин И.И. Системы на кристалле. Особенности реализации и перспективы применения // Электронные компоненты. 2009. № 1. С. 37–39.
2. Бобков С.Г. Высокопроизводительные вычислительные системы / Под ред. Академика РАН Бетелина В.Б. М., НИИСИ РАН, 2014. 296 с.
3. The Worldwide SoC Market Forecast. Available at: <http://www.semico.com/content/worldwide-soc-mar->

ket-forecast-approach-200-billion-2019-says-semico-research (дата обращения: 10.12.2021).

4. Зебреев Г.И. Радиационные эффекты в кремниевых интегральных схемах высокой степени интеграции. М.: НИЯУ МИФИ, 2010. 148 с.
5. Егоров И.В., Мелехин В.Ф. Способ организации автомата с памятью с повышенной устойчивостью к мягким отказам и регистрацией мягких отказов // Информационно-управляющие системы. 2018. № 2. С. 18–27.
6. Мамутова О.В. Аналитические модели надежности кэш-памяти // Информационные технологии и вычислительные системы. 2015. № 4. С. 13–21.
7. Рябцев В.Г., Волобуев С.В. Встроенные средства саморемонта оперативной памяти системы на кристалле // Известия вузов. Электроника. 2020. Т. 25. № 4. С. 339–346.
8. Hamming R.W. Error Detecting and Correcting Codes // Bell Syst. Tech. J. 1950. V. 29. P. 147–160.
9. Hsiao M.Y. A Class of Optimal Minimum Odd-Weight-Column SEC-DED Codes // IBM J. Res. Develop. 1970. V. 14. P. 395–401.
10. Петров К.А., Стенин В.Я. Помехоустойчивое кодирование в КМОП ОЗУ, устойчивых к одиночным воздействиям ядерных частиц // Микроэлектроника. 2015. Т. 44. № 5. С. 359–367.
11. Cenker R.P., Clemons D.G., Huber W.R., Petrizzi J.B., Procyk F.J., Trout G.M. A fault-tolerant 64K dynamic RAM // IEEE International Solid-State Circuits Conference. Digest of Technical Papers. 1979. P. 150–151.
12. Shchigorev L.A., Shagurin I.I. Comparison of hardware and timing penalties for eliminating SRAM failures // 2nd International Telecommunication Conference “Advanced Micro- and Nanoelectronic Systems and Technologies”. IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. V. 498, № 1. 2019. 012017. P. 1–8.
13. Kalter H.L., Stapper C.H., Barth J.E.Jr., DiLorenzo J. et al. A 50-ns 16-Mb DRAM with a 10-ns data rate and on-chip ECC // IEEE J. Solid-State Circuits. 1990. V. 25. P. 1118–1128.
14. Horiguchi M., Itoh K. Nanoscale Memory Repair. N.Y.: Springer, 2011. P. 215.
15. Шагурин И.И., Щигорев Л.А. Сравнительный анализ комбинированных методов повышения сбое- и отказоустойчивости блоков статической оперативной памяти // Известия высших учебных заведений. Электроника. 2016. Т. 21. № 4. С. 347–352.
16. Shchigorev L.A., Shagurin I.I. Combined methods of tolerance increasing for embedded SRAM // 1st International Telecommunication Conference “Advanced Micro- and Nanoelectronic Systems and Technologies” / IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. V. 151. № 1. 2016. 012004. P. 1–5.