

# ЭЛИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

**Расчет режимов элионной  
обработки и показателей  
качества изделий**

# Структура тонкопленочных покрытий

Количество осаждающихся атомов или молекул  $n_1$  и задерживающихся на единице поверхности подложки на время жизни адатома (адсорбированного атома)  $\tau_a$  равно:

( $N_1$  – поток осаждающихся на единицу поверхности подложки в единицу времени атомов или молекул, атом/(м<sup>2</sup>.с);  $\nu$  - частота собственных колебаний адатома ( $\nu \approx 10^{14}$  Гц);  $\Delta E_{дес}$  - энергия активации десорбции, Дж;  $T$  - температура подложки, К (условием, необходимым для образования адатома, является  $E_a > kT$ , где  $E_a$  - энергия осаждающихся атомов или молекул – рис.19).

$$n_1 = N_1 \tau_a = V_o \frac{N_A}{M} \frac{1}{\nu} \exp\left(\frac{\Delta E_{дес}}{kT}\right), \text{шт} / \text{м}^2$$

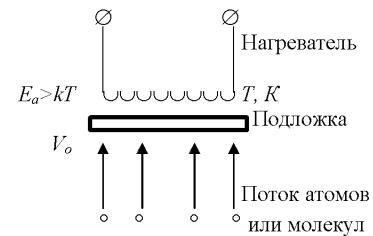


Рис.19 Схема осаждения атомов или молекул на подложку

Так как температура (энергия) осаждающихся атомов или молекул больше температуры поверхности подложки, то адатомы перемещаются (диффундируют) по поверхности и могут либо покинуть поверхность (десорбировать), либо остаться на ней. Процесс роста тонкой пленки включает в себя несколько стадий (Рис.20): 1) перемещение адатомов по поверхности, их соединение и образование зародышей; 2) укрупнение зародышей за счет захвата новых адатомов; 3) слияние зародышей и образование островков; 4) слияние островков; 5) образование несплошной пленки; 6) образование сплошной пленки.

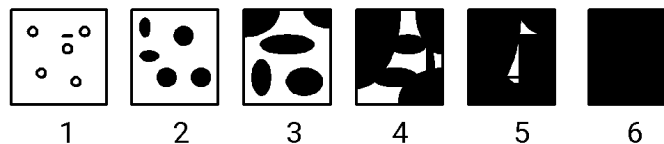


Рис.20 Стадии формирования тонкой пленки

«Критический радиус зародыша» - минимальное количество адатомов, при котором энергия (температура) десорбции зародыша меньше температуры поверхности подложки:

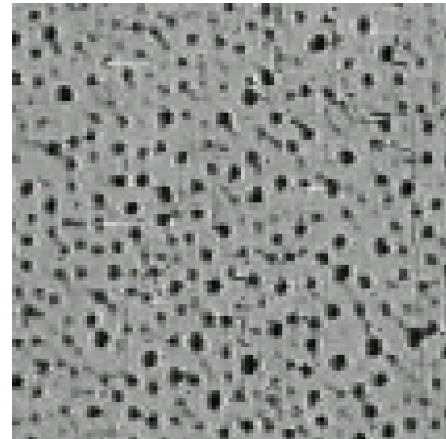
$$r_{кр} = \frac{8\pi r_a^3 \sigma}{3kT \ln p_s / p} \text{ или } r_{кр} = \frac{2\sigma}{\Delta E_{дис}}$$

где  $r_a$  – радиус одного адатома;  $p_s$  и  $p$  - давление насыщенного пара при температуре испарения материала и температуре поверхности подложки  $T$ , соответственно;  $\sigma$  - коэффициент поверхностного натяжения ( $\approx 10^{-4}$  Дж/см<sup>2</sup>);  $\Delta E_{дис}$  - энергия диссоциации зародыша ( $\approx 2 \cdot 10^3$  Дж/см<sup>3</sup>). При приведенных в скобках данных критический радиус зародыша и количество составляющих его атомов приблизительно равны:  $r_{кр} \approx 1$  нм и  $n_{кр} \approx 6-7$  шт.

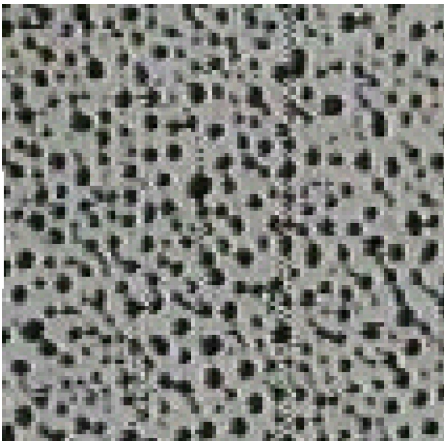
1



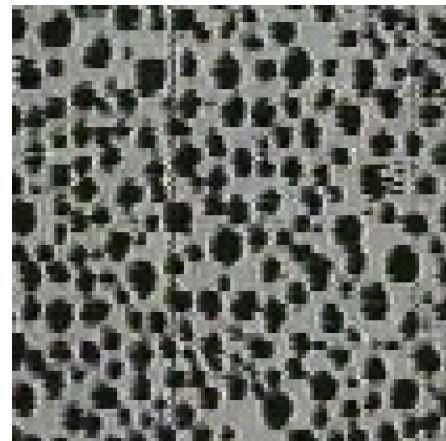
2



3

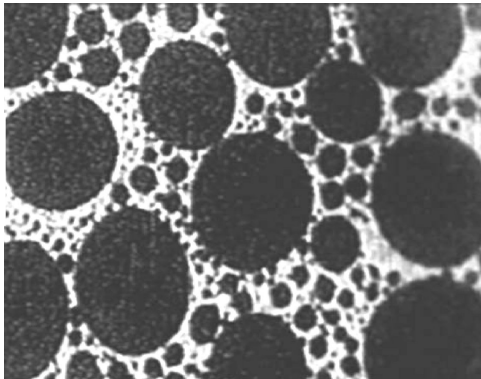


4

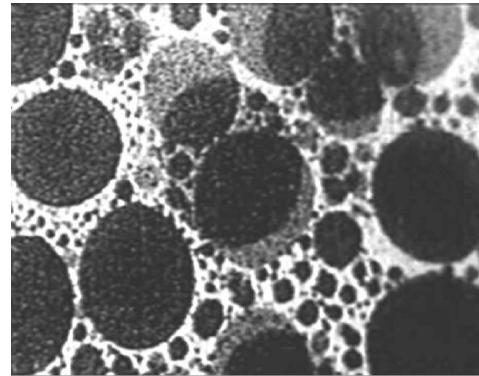


Эволюция топологии растущей пленки (1 – 4 этапы роста), зафиксированная в колонне растрового электронного микроскопа со встроенным испарителем

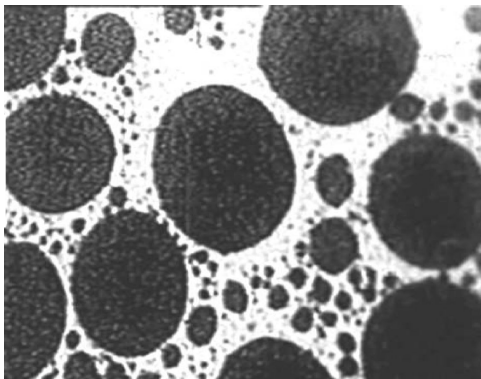
1



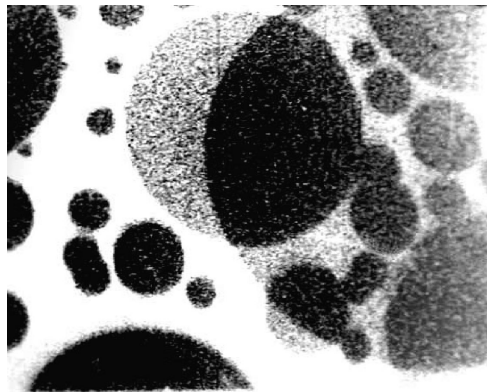
2



3



4



Процесс слияния группы мелких островков в один крупный (кадры 1–3). На кадрах 2,4 зафиксированы положения островков до и после слияния. Время экспозиции кадра 0,25 сек.

Скорость образования зародышей  $V_3$  зависит от  $r_a$  и  $r_{кр}$ , потока осаждающихся на единицу поверхности в единицу времени атомов или молекул  $N_1$ , энергии активации десорбции  $\Delta E_{дес}$  и диффузии  $\Delta E_{диф}$ , температуры поверхности подложки  $T$ . Время образования зародышей  $t$  (с).

$$V_3 = \frac{1}{4} \left( \frac{r_a}{r_{кр}} \right)^2 N_1 \exp \left( \frac{\Delta E_{дес} - \Delta E_{диф}}{kT} \right), \frac{\text{зар}}{\text{м}^2 \text{с}} \quad t_3 = \frac{1}{\pi r_{кр}^2 V_3}$$

Структура пленки определяется характером зависимости максимального количества устойчивых зародышей от температуры поверхности подложки  $T$  (Рис.21 а)

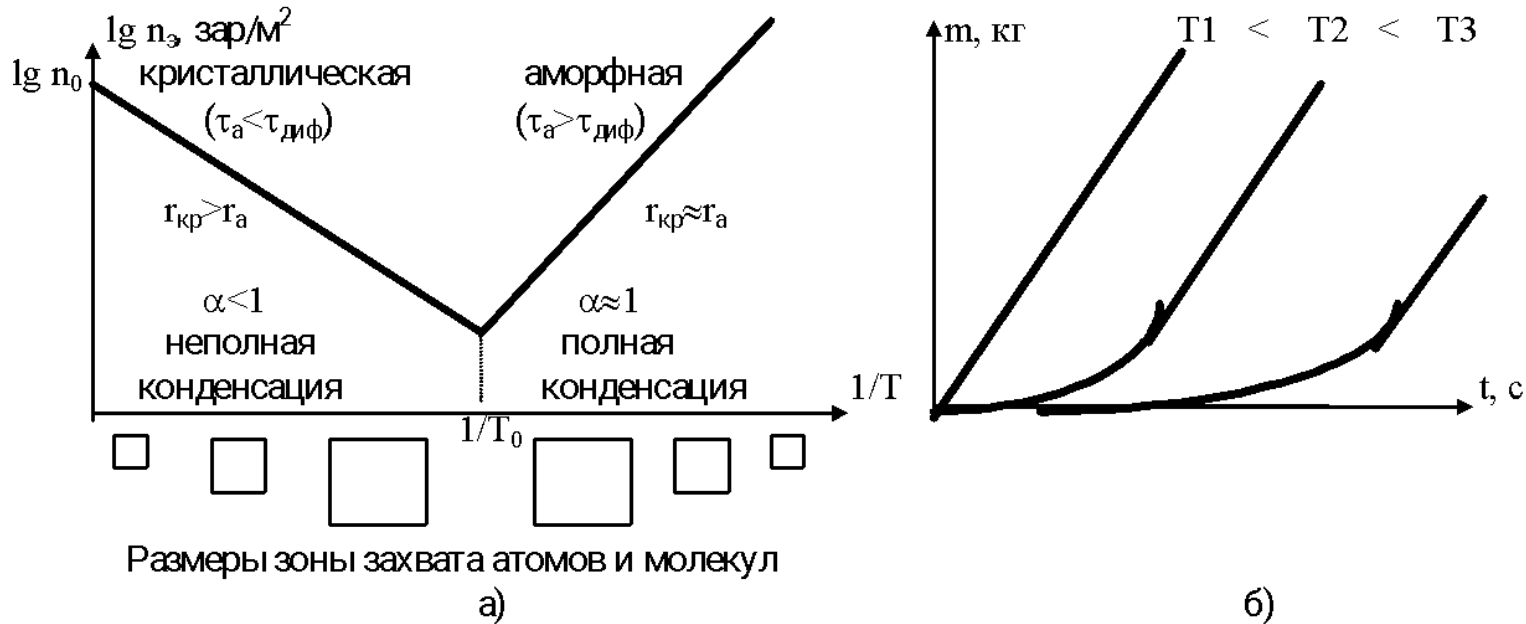


Рис.21 Зависимость количества зародышей (а) и скорости увеличения массы тонкой пленки (б) от температуры подложки

( $n_0$  - количество отдельных атомов, которое может поместиться на единице площади подложки –  $n_0 \approx 2 \cdot 10^{18}$  шт/м<sup>2</sup>).  $T_0$  – критическая температура, выше которой имеет место неполная конденсация:  $\alpha < 1$ ,  $t_a < t_{диф}$ ,  $r_{кр} > r_a$ , а  $n_{кр}$  не зависит от  $N_1$ , т.е. созданы условия для роста кристаллической пленки. Если подложка относительно холодная ( $T < T_0$ ), то  $n_{кр}$  зависит от  $N_1$  и практически каждый осевший атом или молекула остается на подложке, т.е. при полной конденсации  $\alpha \approx 1$ ,  $t_a > t_{диф}$ ,  $r_{кр} \approx r_a$ , а пленка получается рентгеноаморфной.

$$\text{при } T > T_0 \quad n_3^{\max} = n_0 \exp\left(-\frac{\Delta E_{дес} - \Delta E_{диф}}{kT}\right)$$

$$\text{при } T < T_0 \quad n_3^{\max} = \sqrt{\frac{n_0 N_1}{\nu} \exp\left(\frac{\Delta E_{диф}}{kT}\right)}$$

Таким образом, чтобы получить аморфную, моно или поликристаллическую пленку необходимо правильно выбрать режимы технологического процесса: скорость осаждения  $V_0$ , температуру поверхности подложки  $T$  (Рис.22), энергию атомов и молекул и др.

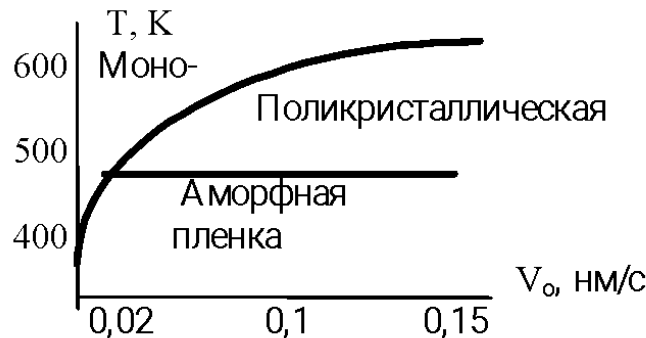


Рис.22 Типовая зависимость структуры тонкой пленки от температуры подложки и скорости осаждения пленкообразующих частиц

Толщина пленки оказывает существенное влияние на ее свойства, которые могут на порядки отличаться от свойств данного материала при толщинах, больших приблизительно 1 мкм. Так, удельное сопротивление резистивной пленки  $\rho_c$  имеет три вида зависимости от ее толщины  $h$  (Рис.23): увеличение до бесконечности при толщине, соответствующей островковой стадии роста ( $h < h_{min}$ ), почти линейное уменьшение, соответствующее несплошной и сплошной тонкой пленке и независимое от толщины значение, соответствующее толстой пленке и монокристаллическому материалу.

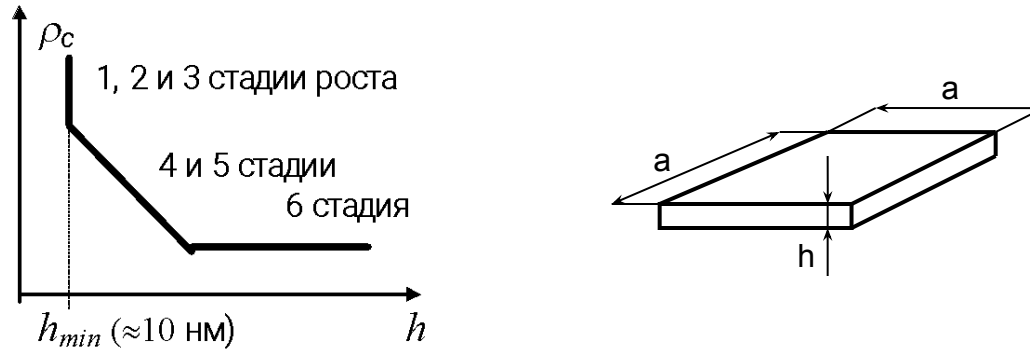
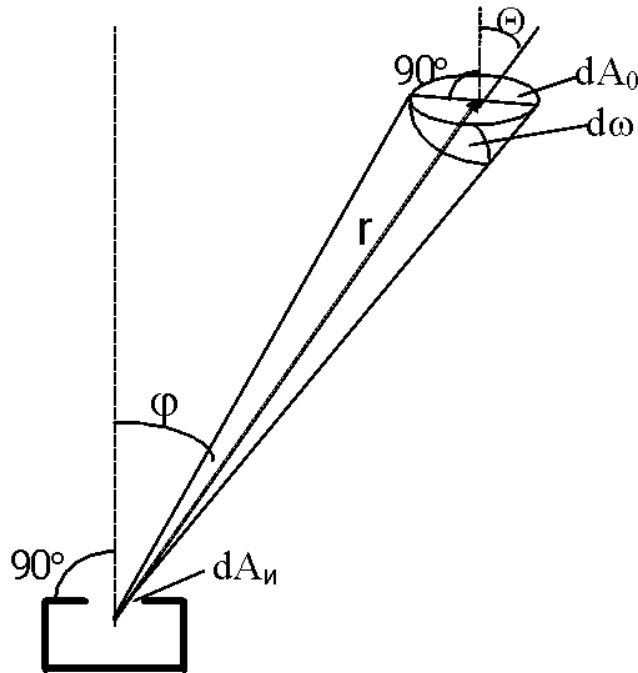


Рис.23 Влияние толщины пленки на удельное сопротивление

Сопротивление тонкой пленки  $R = \rho_c b / (ha) = \rho \cdot b / a$ , где  $a$  и  $b$  – ширина и длина тонкопленочного резистивного элемента, м;  $\rho_c$  в Ом.м и  $\rho$  (“ро квадрат”) в Ом/• являются константами материала, причем  $\rho$  соответствует максимально возможному для данного материала значению удельного сопротивления при  $h = h_{min}$  и равен

$$\rho_{\square} = \rho_c \frac{a}{ah} = \frac{\rho_c}{h}$$

Показателем качества тонкопленочных покрытий является неравномерность толщины пленки, которая возникает в результате косинусоидального распределения потока испаряемого или распыляемого материала по направлениям (Рис.17):



$dq_u(\phi) = q_u \cdot \text{Cos}\phi \cdot d\omega / \pi$ ,  
 где  $q_u$  - масса испаренного или распыленного вещества, кг;  $\phi$  - угол испарения;  $\omega$  - телесный угол испарения. Элементарный участок, на который осаждается тонкая пленка, равен  $dA_0 = r^2 \cdot d\omega / \text{Cos}\Theta$ , где  $r$  - расстояние от источника испарения или распыления до элементарной площадки;  $\Theta$  - угол конденсации. Закон Кнудсена записывается в следующем виде:

$$\frac{dq_u(\phi, \Theta)}{dA_0} = \frac{q_u \text{Cos}\phi \text{Cos}\Theta}{\pi r^2}$$

Рис.17 Распределение испаренных молекул по направлениям



Согласно закону Кнудсена скорость осаждения (кг/(м<sup>2</sup>.с)), где  $q_u$  и  $\Theta$  – удельная скорость испарения (кг/с), равна:

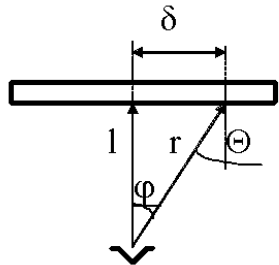
$$V_o = \frac{dq_u(\varphi, \Theta)}{dA_0 t} = \frac{q_u' \text{Cos} \varphi \text{Cos} \Theta}{\pi r^2}$$

Количество испаряемых или распыляемых атомов или молекул осаждающихся на единицу поверхности в единицу времени равно, атом/(м<sup>2</sup>.с)

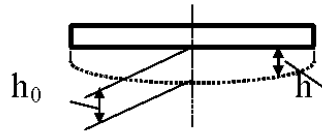
$$N_o = V_o N_A / M$$

Толщину пленки  $h$  (м) в произвольной точке подложки  $\delta$  (Рис.18) можно рассчитать по формуле ( $l$  – расстояние от источника до подложки при  $\varphi=0$ ,  $\rho$  – плотность материала).

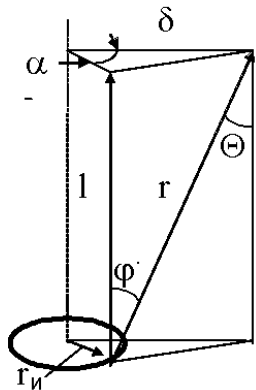
$$h = \frac{dq_u(\varphi, \Theta)}{dA_0 \rho} = \frac{q_u l^2}{\pi r^2 \rho (l^2 + \delta^2)}$$



а)



б)



в)

Неравномерность толщины пленки при точечном испарителе (площадь испарителя пренебрежимо мала)

$$\Delta = \frac{h}{h_0} = \frac{1}{\left[1 + (\delta/l)^2\right]^{3/2}}$$

При испарителе с радиусом  $r_u$  (Рис.18 в) толщину пленки в точке  $\delta$  можно рассчитать по следующей формуле ( $\alpha = 0 - 2\pi$ ):

$$h = \iiint_{r_u \alpha t} \frac{V_u r_u l^2 dr_u d\alpha dt}{\pi \rho r^4}$$

Рис.18 Геометрическая схема расчета неравномерности толщины пленки  $h$  для точечного источника (а, б) и для дискового испарителя (в)

Дажным фактором обеспечения качества тонкопленочных покрытий является состав и свойства технологической среды – вакуума или рабочих газов, которые оцениваются коэффициентом загрязнения  $\gamma$  осаждаемой тонкой пленки:  $N_{з.о.}$  - поток “загрязняющих” атомов или молекул, осаждающихся на подложку, атом/(см<sup>2</sup>.с);  $N_{м.о.}$  - поток атомов или молекул осаждаемого материала, атом/(см<sup>2</sup>.с)

$$\gamma = \frac{N_{з.о.}}{N_{м.о.}} \quad N_{з.о.} = \sum_{i=1}^n \frac{p_i \alpha_i \sqrt{N_A}}{\sqrt{2\pi k T M_i}} \quad N_{м.о.} = \frac{V_0 N_A}{M_m} = \frac{10^{-9} V_o' \rho N_A}{M_m}$$

$p_i$  - парциальное давление  $i$ -го газа (“загрязнения”), Па;  $\alpha_i$  - коэффициент аккомодации  $i$ -го газа (“загрязнения”);  $T$  - температура стенок вакуумной камеры, К;  $M_i$  - молекулярная масса  $i$ -го газа (“загрязнения”), кг/кмоль;  $V_o$  - скорость осаждения пленки, кг/(м<sup>2</sup>.с) ( $V_o'$  в нм/с);  $M_m$  - молекулярная масса материала пленки, кг/кмоль.

При нормальном законе распределения  $\gamma$  вероятность обеспечения требуемой чистоты осаждаемой пленки равна

$$P(\gamma \leq \gamma_D) = 0,5 + \Phi \left( \frac{\gamma_D - \bar{\gamma}}{\sigma_\gamma} \right);$$

Математическое ожидание коэффициента загрязнения осаждаемой пленки равно

$$\bar{\gamma} = \sum_{i=1}^n \frac{p_i \alpha_i M_m}{V_0 \sqrt{2\pi k T M_i} N_A}$$

Допустимый коэффициент “загрязнения” пленки  $\gamma_D$  можно оценить следующим неравенством: где  $n_D$  - допустимая концентрация загрязнений в материале пленки (1Е12 – 1Е20 атом/см<sup>3</sup>);  $h$  - толщина пленки, м;  $t$  - длительность процесса осаждения пленки, с; среднее квадратичное отклонение коэффициента загрязнения пленки  $\sigma_\gamma$  зависит от:  $\sigma_x$  - среднее квадратичное отклонение параметра  $x_j$ ,  $k$  - количество параметров  $x$ , влияющих на чистоту технологической среды (в скобках – частные производные)

$$\gamma_D \leq \frac{n_D h}{N_{м.о.} t}$$

$$\sigma_\gamma = \sqrt{\sum_{j=1}^k \left( \frac{\partial \gamma}{\partial x_j} \right)^2 \sigma_{x_j}^2}$$

В качестве примера влияния чистоты технологической среды на показатели качества тонких пленок можно привести зависимость изменения удельного сопротивления резистивных покрытий  $\Delta\rho_c$  (Рис.16 а) и диэлектрической проницаемости изоляционных пленок  $\varepsilon$  (Рис.16 б) от коэффициента загрязнения  $\gamma$

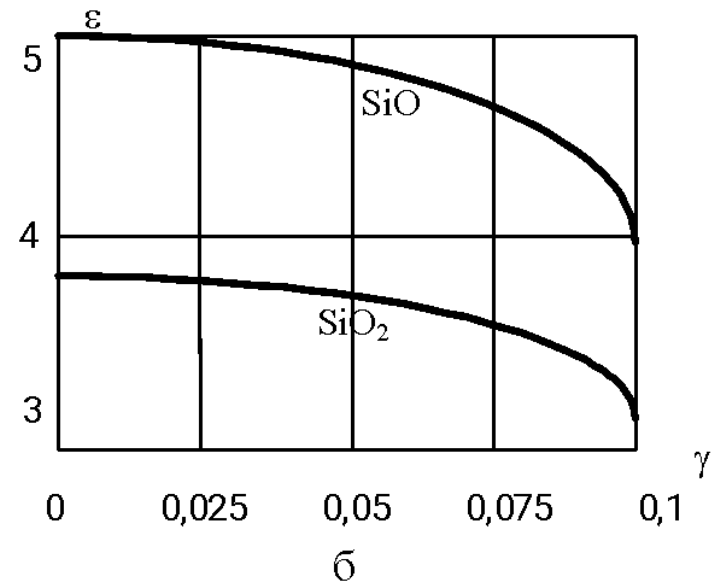
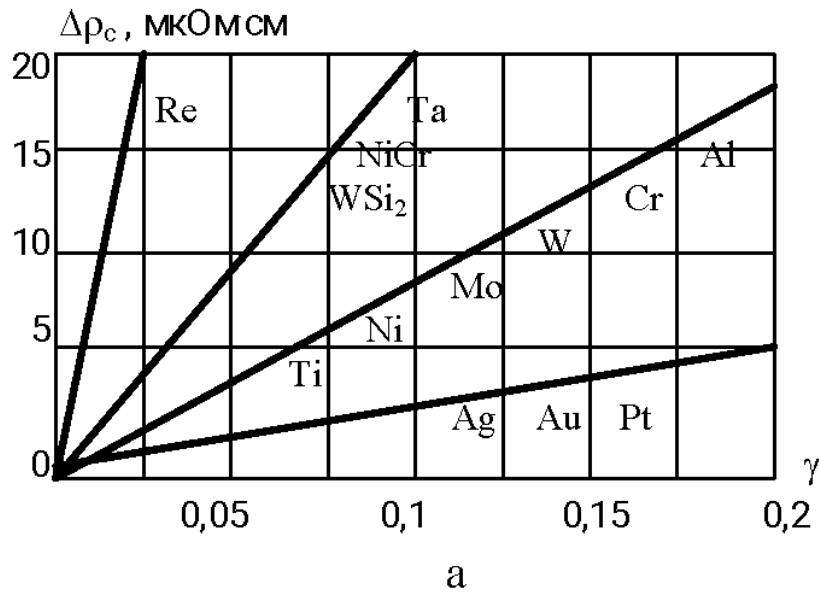


Рис.16 Изменение удельного сопротивления (а) и относительной диэлектрической проницаемости (б) от коэффициента загрязнения тонких пленок