

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) τ_a равно:

(N_1 – поток осаждающихся на единицу поверхности подложки в единицу времени атомов или молекул, атом/(м².с); ν - 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).

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

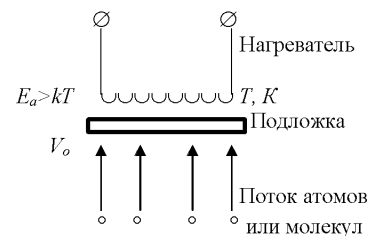


Рис.19 Схема осаждения атомов или молекул на подложку

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.

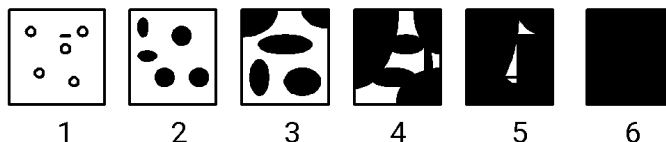


Рис.20 Стадии формирования тонкой пленки

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

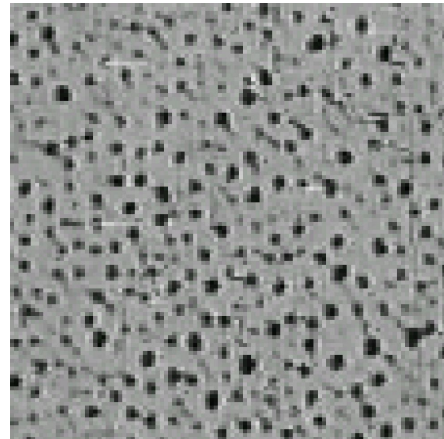
$$r_{кр} = \frac{8\pi r_a^3 \sigma}{3kT \ln p_s / p} \text{ или } r_{кр} = \frac{2\sigma}{\Delta E_{дис}}$$

где r_a – радиус одного адатома; p_s и p - давление насыщенного пара при температуре испарения материала и температуре поверхности подложки T , соответственно; σ - коэффициент поверхностного натяжения ($\approx 10^{-4}$ Дж/см²); $\Delta E_{дис}$ - энергия диссоциации зародыша ($\approx 2 \cdot 10^3$ Дж/см³). 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.

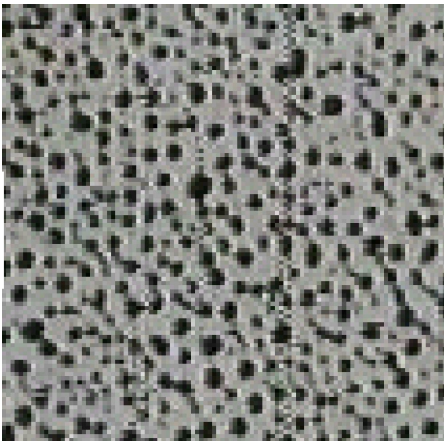
1



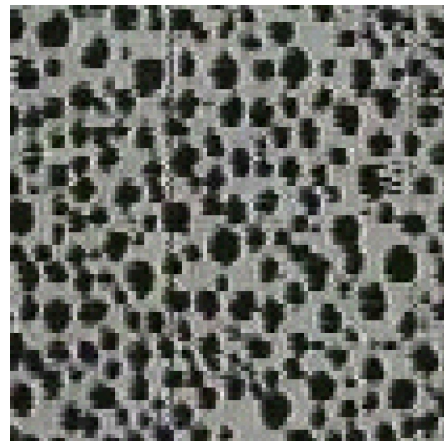
2



3

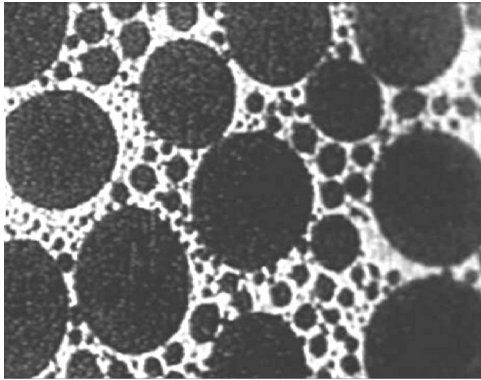


4

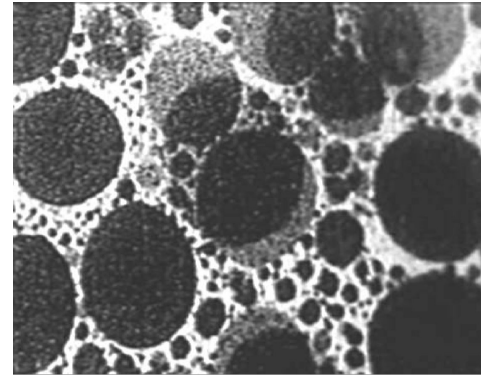


Эволюция топологии растущей пленки (1 – 4 этапы роста), зафиксированная в колонне растрового электронного микроскопа со встроенным испарителем

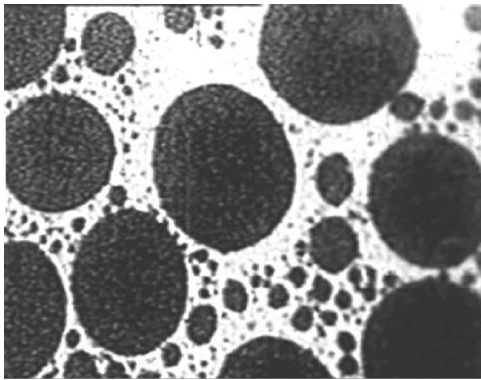
1



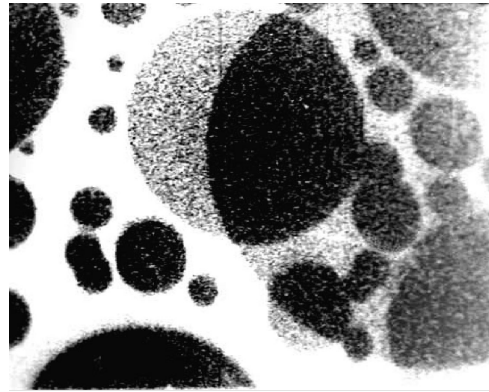
2



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)

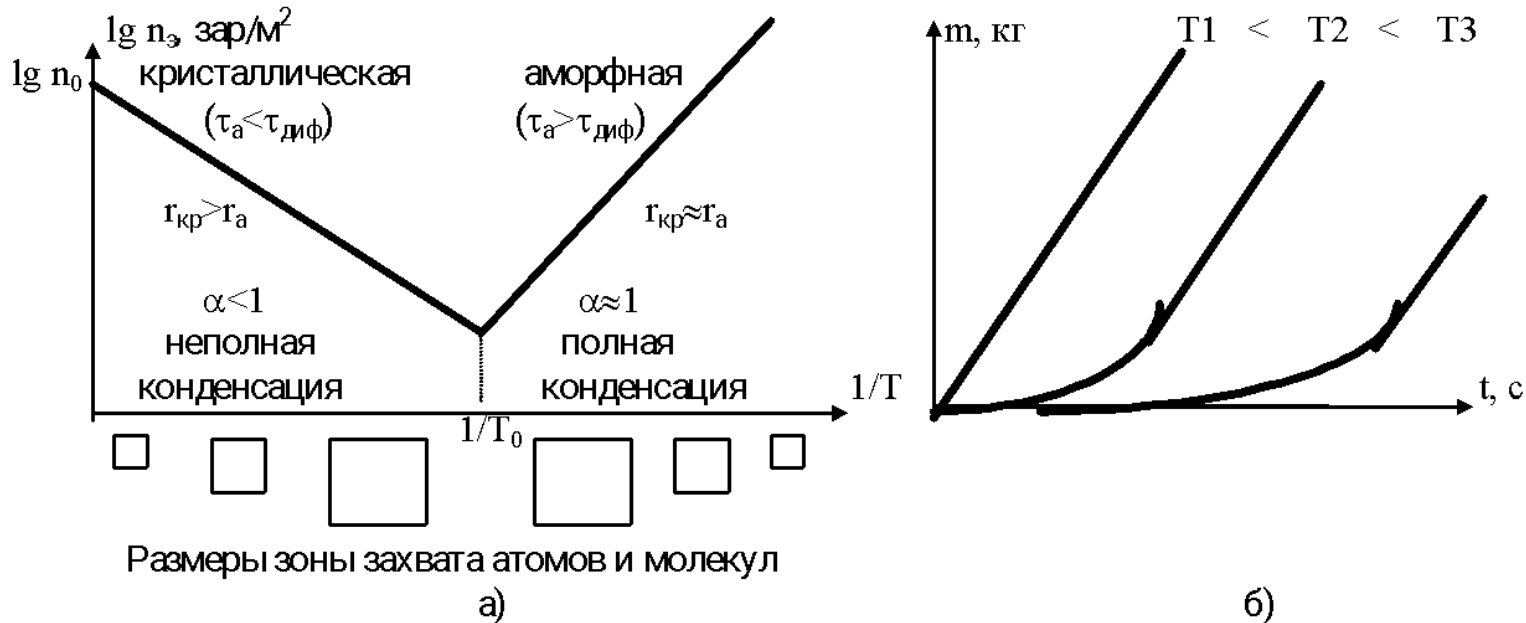


Рис.21 Зависимость количества зародышей (а) и скорости увеличения массы тонкой пленки (б) от температуры подложки

(n_0 - количество отдельных атомов, которое может поместиться на единице площади подложки – $n_0 \approx 2 \cdot 10^{18}$ шт/м²). 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.

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

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

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.

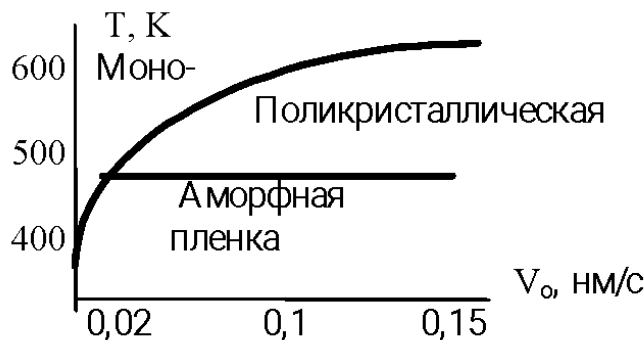


Рис.22 Типовая зависимость структуры тонкой пленки от температуры подложки и скорости осаждения пленкообразующих частиц

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 ρ_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 монолитному материалу.

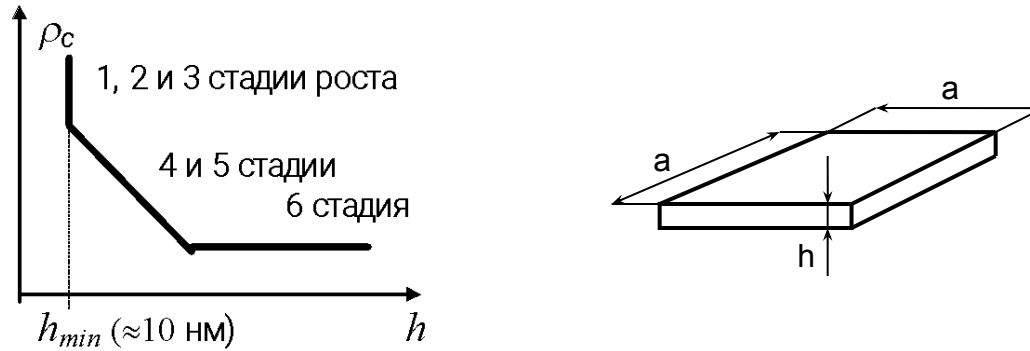
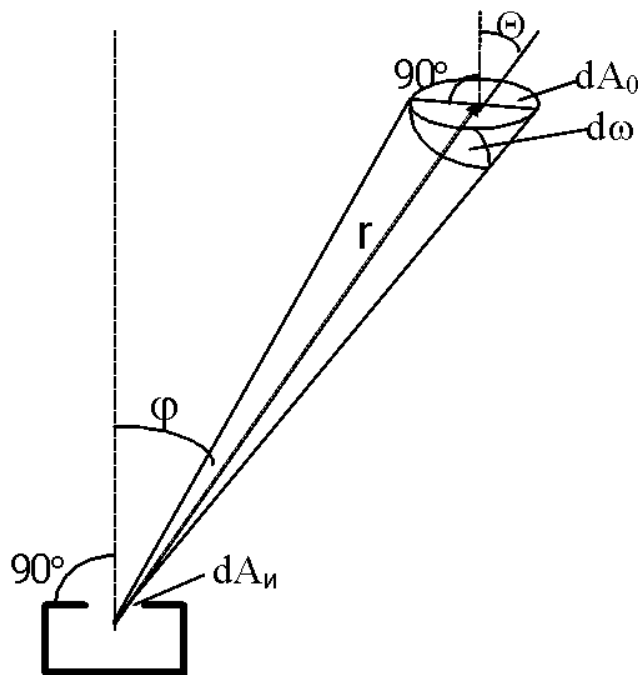


Рис.23 Влияние толщины пленки на удельное сопротивление

Сопротивление тонкой пленки $R = \rho_c b / (ha) = \rho \cdot b/a$, где a и b – ширина и длина тонкопленочного резистивного элемента, м; ρ_c в Ом.м и ρ (“ро квадрат”) в Ом/• являются константами материала, причем ρ 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; ϕ - угол испарения; ω - 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; Θ - 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/(м².с)), где q_u и Θ – удельная скорость испарения (кг/с), равна:

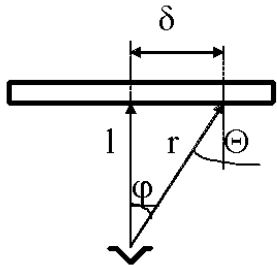
$$V_o = \frac{dq_u(\varphi, \Theta)}{dA_0 t} = \frac{q_u' \text{Cos} \varphi \text{Cos} \Theta}{\pi r^2}$$

Количество испаряемых или распыляемых атомов или молекул осаждающихся на единицу поверхности в единицу времени равно, атом/(м².с)

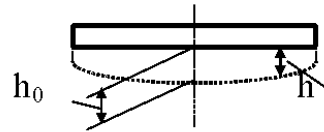
$$N_o = V_o N_A / M$$

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

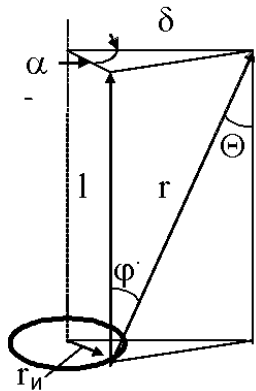
$$h = \frac{dq_u(\varphi, \Theta)}{dA_0 \rho} = \frac{q_u l^2}{\pi r^2 \rho (l^2 + \delta^2)}$$



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 δ 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 γ осаждаемой тонкой пленки: $N_{з.о.}$ - поток “загрязняющих” атомов или молекул, осаждающихся на подложку, атом/(см².с); $N_{м.о.}$ - поток атомов или молекул осаждаемого материала, атом/(см².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; α_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/(м².с) (V_o' в нм/с); M_m - молекулярная масса материала пленки, кг/кмоль.

При нормальном законе распределения γ 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 γ_D можно оценить следующим неравенством: где n_D - допустимая концентрация загрязнений в материале пленки (1E12 – 1E20 атом/см³); h - толщина пленки, м; t - длительность процесса осаждения пленки, с; среднее квадратичное отклонение коэффициента загрязнения пленки σ_γ зависит от: σ_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 ε (Рис.16 б) от коэффициента загрязнения γ

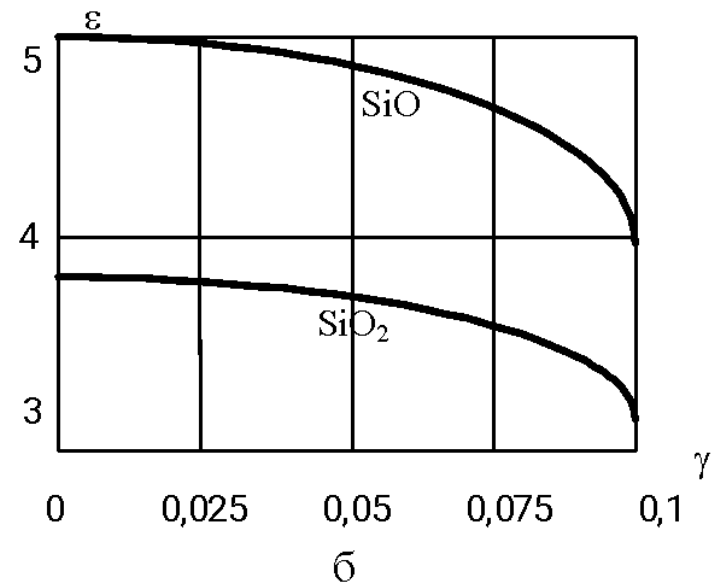
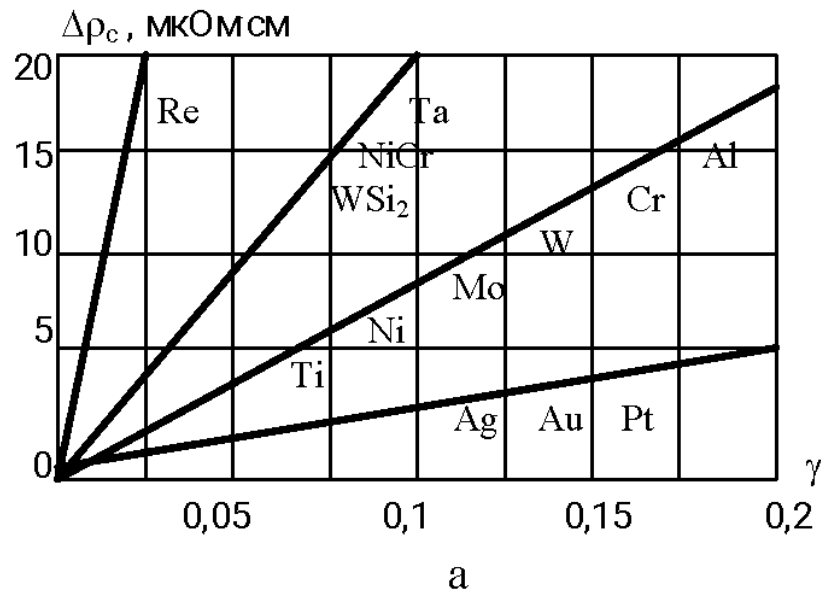


Рис.16 Изменение удельного сопротивления (а) и относительной диэлектрической проницаемости (б) от коэффициента загрязнения тонких пленок