УДК 532.6:519.688

ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА СОСТАВА И СВОЙСТВ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСЛОЁВ, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ МЕЖФАЗНОЙ СЕГРЕГАЦИИ

Бжихатлов К.Ч.

ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», Нальчик, e-mail: haosit13@mail.ru

При производстве современных устройств электроники и наноэлектроники одним из технологических процессов является выращивание функциональных слоев. При этом основные методы выращивания функциональных нанослоев основаны на высаживании атомов выращиваемого слоя из внешнего источника на подложку, например испарение в вакууме, ионное распыление или электрохимическое осаждение. Но в противовес классическим технологиям функциональные нанослои можно выращивать за счет процесса термостимулированной сегрегации. При этом в качестве источника вещества пленки используется малая добавка в объеме образца. В статье приведены основные алгоритмы разработанной программы для автоматизации расчета состава функциональных нанослоёв, полученных методом термостимулированной сегрегации. Программа рассчитывает состав пленки по данным о составе подложки и параметрах ее компонентов в модели разорванных связей. На основе полученных данных рассчитывается поверхностное натяжение функционального нанослоя. Стоит отметить, что в программе реализованы возможности использования базы данных с табличными значениями параметров компонентов образца и его кристаллографической грани, сохранения и загрузки результатов расчета, построения графиков зависимостей состава от температуры и его сохранение в файл с изображением. Полученные данные могут использоваться в производстве нанослоев с заданными составом и свойствами, что в перспективе позволит удешевить производство приборов и устройств микро- и наноэлектроники.

Ключевые слова: поверхностное натяжение, сверхтонкие пленки, функциональный нанослой, поверхностная сегрегация, компьютерное моделирование

PROGRAM FOR CALCULATING THE COMPOSITION AND PROPERTIES OF FUNCTIONAL NANOLAYERS OBTAINED BY SURFACE SEGREGATION

Bzhikhatlov K.Ch.

Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education «Kabardino-Balkarian State University named after Kh.M. Berbekov», Nalchik, e-mail: haosit13@mail.ru

In the production of modern electronic and nanoelectronic devices, one of the technological processes is the growth of functional layers. The main methods for growing functional nanolayers are based on planting the atoms of the grown layer from an external source onto a substrate. For example, evaporation in vacuum, ion sputtering or electrochemical deposition. But, in contrast to classical technologies, functional nanolayers can be grown by the process of thermostimulated segregation. In this case, a small additive in the bulk of the sample is used as the source of the film substance. The main algorithms of the developed program for automating the calculation of the composition of functional nanolayers obtained by the thermostimulated segregation method are presented in the article. The program calculates the composition of the film from data of the substrate composition and the parameters of its components in the broken bonds model. The surface tension of the functional nanolayer is calculated based on the data obtained. It should be noted that the program implemented the possibility of using a database with tabular values of the parameters of the components and its crystallographic face, saving and loading the calculation results, plotting curves of composition from temperature, and saving it to an image file. The obtained data can be used in the production of nanolayers with the specified composition and properties, which in the future will make it possible to reduce the cost of production of micro- and nanoelectronics devices.

Keywords: surface tension, ultrathin layers, functional nanolayer, surface segregation, computer simulation

В технологическом процессе производства современной электроники и наноэлектроники широко применяются наноразмерные пленки. Например, при производстве современных транзисторов, работающих при терагерцовых частотах, используются слои кремния толщиной меньше 30 нм. В таких транзисторах длина канала составляет около 10 нм [1]. Стоит отметить, что на данный момент тонкие пленки в основном создаются с помощью технологий «сверху – вниз», то есть за счет высаживания атомов выращиваемого слоя из внешнего источника на подложку. К технологиям «сверху – вниз» относятся испарение в вакууме, ионное распыление, электрохимическое осаждение и ряд других. При этом в противовес стратегии «сверху – вниз» разрабатывается ряд новых технологий, позволяющих получить самоформирующиеся тонкие слои (технологии «снизу – вверх»). Например, функциональные нанослои можно выращивать за счет процесса термостимулированной сегрегации. При этом вместо внешнего источника вещества пленка формируется за счет незначительной концен-

трации примеси в объеме подложки. Состав и толщина такой пленки будет зависеть от условий выращивания, то есть от состава подложки, температуры и времени отжига. Задавая данные параметры, можно выращивать пленки с требуемыми составом. Состав пленки в свою очередь определяет ее физико-химические свойства, например адгезивную прочность, электропроводность, поверхностное натяжение и другие. В литературе не найдено информации о программах для моделирования состава функциональных нанослоев, полученных методом межфазной сегрегации.

Цель исследования: разработать программу для моделирования состава и поверхностного натяжения функциональных нанослоёв, полученных методом межфазной сегрегации. Данная программа позволит моделировать свойства выращиваемых за счет термостимулированной сегрегации функциональных нанослоёв, что в свою очередь позволит удешевить производство приборов и устройств микро- и наноэлектроники.

Разработка программы для расчета состава функциональных нанослоёв

Если рассматривать тонкую пленку на плоской поверхности подложки макроскопического размера в случае бинарной системы [2], зависимость состава поверхности от объемной концентрации примеси имеет вид

$$\frac{a_1^{(\sigma)}}{\left(a_2^{(\sigma)}\right)^{\gamma}} = \exp\left(\frac{\left(\sigma_{02}-\sigma_{01}\right)\cdot\omega_{01}}{R\cdot T}\right)\cdot\frac{a_1}{\left(a_2\right)^{\gamma}}, \quad (1)$$

где $a^{(\sigma)}_i$ – активность i-го компонента на поверхности образца, a_i – активность в объеме подложки, ω_{0i} – молярная поверхность чистых компонентов, σ_{01} и σ_{02} – поверхностное натяжение чистой примеси и матрицы, R – универсальная газовая постоянная, T – температура образца, γ – отношение молярных поверхностей примеси и матрицы

$$\gamma = \frac{\omega_{01}}{\omega_{02}}. \quad (2)$$

Молярная поверхность рассчитывается по данным о плотности и молярной массе чистых компонентов

$$\omega_{0i} \approx f_{\text{уп}}\cdot N_A^{1/3}\cdot\left(M_i/\rho_i\right)^{2/3}, \quad (3)$$

где N_A – число Авогадро, M – молярная масса, ρ – плотность, $f_{\text{уп}}$ – коэффициент упаковки. Активности компонентов можно выразить через состав и коэффициенты активности

$$a_1^{(\sigma)} = f_1^{(\sigma)}\cdot x_1^{(\sigma)}, \quad (4)$$

$$a_1 = f_1\cdot x_1, \quad (5)$$

где $f_i^{(\sigma)}$ и f_i – коэффициент активности компонентов, а $x_i^{(\sigma)}$ и x_i – концентрация компонентов (в атомных долях) на поверхности и в объеме. В нулевом приближении теории регулярных растворов коэффициент активности имеет вид

$$f_i^{(\sigma,b)} = \exp\left(\left(1-x_i^{(\sigma,b)}\right)^2\cdot\frac{Q^{(\sigma,b)}}{RT}\right), \quad (6)$$

где Q – энергия смешения примеси и матрицы на объеме, а $Q^{(\sigma)}$ – на поверхности образца. Энергия смешения в поверхностном слое в модели разорванных связей рассчитывается в виде

$$Q^{\sigma} = Q\ \frac{Z^{\sigma}}{Z}, \quad (7)$$

где Z, $Z^{(\sigma)}$ – координационные числа в объеме и на поверхности раствора. При этом поверхностное натяжение компонентов рассчитывается с учетом температурной зависимости поверхностного натяжения $d\sigma/dT$

$$\sigma_{02}(T) = \sigma_{02}(T_0) + (T-T_0)\frac{d\sigma_{02}}{dT}, \quad (8)$$

где T_0 – температура, при которой измерялось поверхностное натяжение, а T – температура эксперимента.

Из выражений (1) и (4) можно получить зависимость состава поверхности от состава и температуры подложки. По полученным данным можно рассчитать одну из основных характеристик границ раздела твердое тело – вакуум – поверхностное натяжение [3]. Уравнение изотермы поверхностного натяжения бинарной системы для случая предельно разбавленного раствора определяется выражением

$$\sigma = \sigma_{02} + \frac{RT}{\omega_{02}}\ln\left(\frac{x_2^{(\sigma)}}{x_2}\right). \quad (9)$$

Для автоматизации расчетов состава и поверхностного натяжения функциональных нанослоёв разработана программа, позволяющая по заданным объемным свойствам подложки получить температурную зависимость состава и свойств поверхностного слоя. При разработке использовался язык программирования C# и среда разработки Microsoft Visual Studio. Разработанная программа представляет собой оконное приложение для операционных систем семейства Windows, что позволило разработать функциональный и интуитивно понятный пользовательский интерфейс и добавить возможности работы с файлами и графикой [4]. Моделирование соста-

ва поверхности в программе проводится на основе данных об объемном составе, температуре образца и параметрах компонентов, входящих в исследуемую бинарную систему. Интерфейс программы создавался с помощью конструктора форм Visual Studio. Внешний вид окна приложения показан на рис. 1.

Окно условно можно разделить на несколько областей: область ввода параметров моделируемой системы, область управляющих кнопок, поле для вывода результатов расчета и полученного графика и область для вывода информации о работе программы. Все элементы располагаются на одной форме. Расчет зависимости состава поверхности и поверхностного натяжения от температуры происходит при нажатии на кнопку «Расчет». Кроме того, в программе реализована возможность выводить результаты расчетов в виде графика и сохранять их в отдельные файлы для последующей обработки.

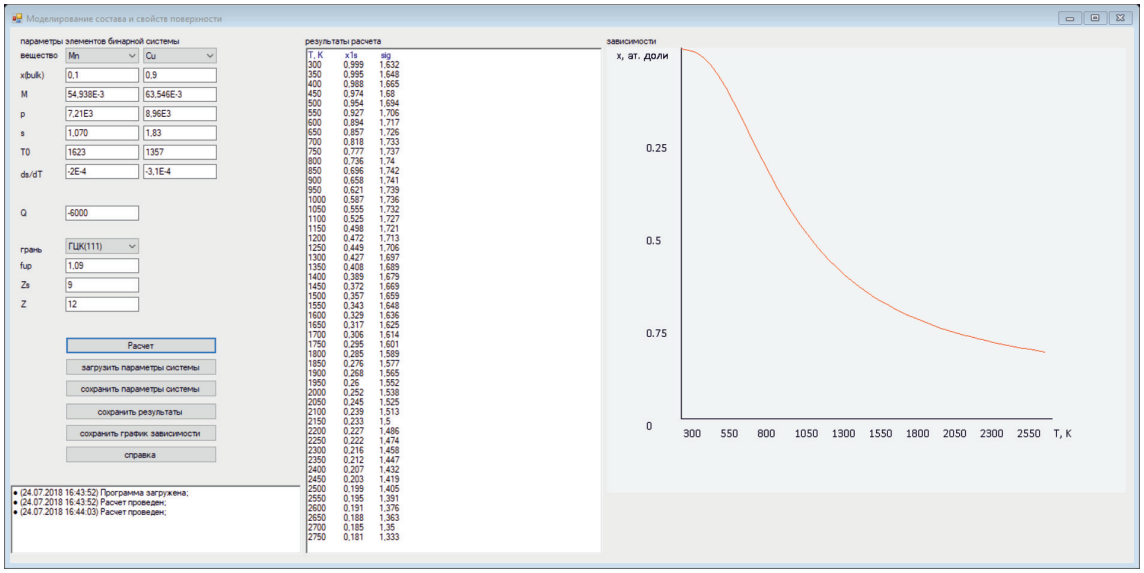

Рис. 1. Окно программы расчета состава и свойств функциональных слоев

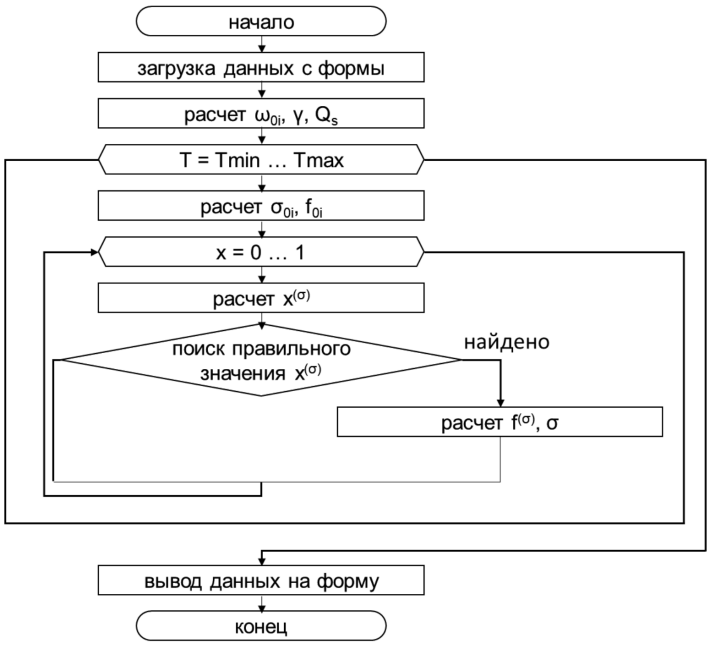

Рис. 2. Блок-схема алгоритма расчета состава и свойств функциональных слоев

По введенным данным с помощью уравнений (1)–(8) программа рассчитывает состав поверхностного слоя бинарной системы. Затем, по полученным данным и выражению (9) рассчитывается поверхностное натяжение образца. Расчет проводится в цикле для различных значений температуры образца. Результаты расчета (температура, концентрация примеси на поверхности и поверхностное натяжение) выводятся в текстовое поле на окне программы. По этим данным в программе строится график зависимости $x = f(T)$. Алгоритм расчета показан на рис. 2. Стоит отметить, что данный расчет применим для систем, описываемых нулевым приближением теории регулярных растворов.

Программа позволяет выбрать компоненты бинарной системы из списка или ввести их параметры (поверхностное натяжение, его температурный коэффициент, молярную массу и плотность) вручную. Такая же возможность реализована и для параметров выбранной кристаллографической грани (координационные числа и плотность упаковки). В результате при работе с программой можно пользоваться сохраненными базами данных с параметрами компонентов и кристаллографической грани. Структура базы данных для хранения параметров чистых компонентов показана в табл. 1, а для параметров кристаллографической грани – в табл. 2. Сами базы данных представляют собой текстовые файлы, где в качестве разделителя используется символ пробела. Такое решение позволяет пользователю самостоятельно добавлять новые данные в базу программы без использования специального программного обеспечения.

Таблица 1

Структура базы данных для параметров веществ [5]

материал	$\sigma(T_0)$, Н/м	T_0, К	$d\sigma/dT$, Н/м*К	M, 10^{-3}кг/моль	ρ, 10^3кг/м^3
Al	1,116	933	-1,5	26,981	2,688
Cu	1,83	1357	-3,1	63,546	8,96
Ge	0,8	1210	-0,8	72,6	5,3
Mn	1,070	1623	-2	54,938	7,21

Таблица 2

Структура базы данных для параметров кристаллографических граней

грань	Z	Z_l	Z_v
ГЦК(111)	12	6	3
ГЦК(110)	12	4	4
ГЦК(100)	12	4	4

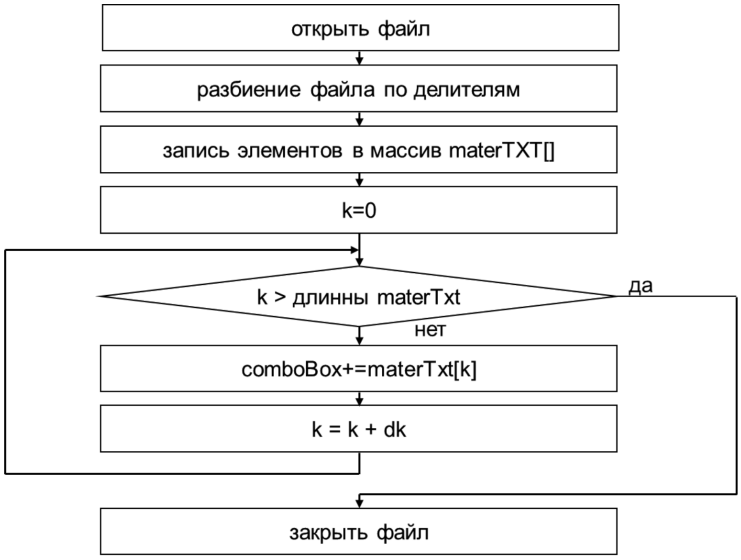

Рис. 3. Блок-схема алгоритма загрузки параметров компонента из базы данных

После запуска программа автоматически загружает файлы из базы данных и хранит их в отдельном массиве для каждой базы. При этом названия веществ, которые есть в базе данных, должны быть добавлены в соответствующие поля на окне программы. Алгоритм, реализующий данную задачу, приведен на рис. 3. Как видно из рисунка, после загрузки текстового файла он разбивается на отдельные слова, которые хранятся в массиве MaterTxt. Затем программа перебирает элементы данного массива с определенным шагом, который определяется количеством столбцов в базе данных и добавляет первый элемент в строке (название вещества) к соответствующему списку. При выборе пользователем вещества из списка – его параметры загружаются из готового массива. Работа с данными кристаллографических граней реализована схожим образом.

Заключение

Разработанная программа позволяет рассчитывать состав функциональных нанослоев, полученных методом термостимулированной сегрегации на поверхности бинарных сплавов. Расчет проводится для случая тонкой пленки на плоской поверхности подложки макроскопического размера. В программе реализованы возможности использования базы данных с табличными значениями параметров компонентов образца и его кристаллографической грани, сохранения и загрузки результатов расчета, построения графиков зависимостей состава от температуры и его сохранение в файл. Полученные данные могут использоваться при моделировании и производстве нанослоев с заданными составом и свойствами методом термостимулированной сегрегации, что в перспективе позволит удешевить производство приборов и устройств микро- и наноэлектроники. На данном этапе ведется тестирование разработанного программного продукта, после которого пробная версия программы будет доступна на сайте КБГУ (kbsu.ru).

Данное научное исследование проводится при поддержке Фонда содействия развитию малых форм предприятий в научно-технической сфере по программе «УМНИК» по теме «Создание сверхтонких функциональных нанослоев методом межфазной сегрегации для использования в производстве приборов и изделий микро- и наноэлектроники» в рамках договора № 11009ГУ/2016 (код 0025904) от 13.02.2017 г.

Список литературы

1. Сигов А.С., Щука А.А. Наноэлектроника // Нанонаука и нанотехнологии. Энциклопедия систем жизнеобеспечения. 2011. С. 703–720.

2. Русанов А.И. Фазовые равновесия и поверхностные явления. Л.: Химия, 1967. 340 с.

3. Сергеев И.Н., Бжихатлов К.Ч., Шебзухов А.А. Поверхностная сегрегация и поверхностное натяжение грани (100) монокристаллов Cu-Al и Cu-Mn при различных температурах // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. 2015. Т. 5. № 3. С. 5–9.

4. Стиллмен Э., Грин Дж. Изучаем C#. 2-е изд., СПб.: Питер, 2012. 696 с.

5. Aqra F., Ayyad A. Surface energies of metals in both liquid and solid states. Applied Surface Science. 2011. V. 257. P. 6372–6379. DOI: 10.1016/j.apsusc.2011.01.123.