

УЧЕТ ОТРАЖАЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ ОСАДКА ТУГОПЛАВКОГО МЕТАЛЛА, ПОЛУЧЕННОГО ЛАЗЕРНЫМ ПИРОЛИЗОМ ИЗ ГАЗОВОЙ ФАЗЫ

А.В. Недоля, И.Н. Титов

*Запорожский национальный университет
Украина*

Поступила в редакцию 22.10.2009

Предложена математическая модель, которая учитывает влияние отражающей способности поверхности металлического осадка на температурное распределение и формообразование этого осадка на диэлектрической подложке. Модель апробирована на примере осаждения вольфрама из его гексафторида. Получены распределения температуры и скорости осаждения по глубине и радиусу осадка.

Ключевые слова: лазерный пиролиз, коэффициент отражения, теплопроводность, осаждение из газовой фазы.

Запропонована математична модель, яка враховує вплив відбиваючої здатності поверхні металевого осаду на температурний розподіл і формоутворення цього осаду на діелектричній підкладці. Модель апробовано на прикладі осадження вольфраму із його гексафториду. Отримані розподіли температури і швидкості осадження за глибиною і радіусом осаду.

Ключові слова: лазерний піроліз, коефіцієнт відображення, теплопровідність, осадження із газової фази.

The mathematical model of laser chemical vapour deposition (LCVD) of the refractory metal by pyrolysis to dielectric substrate was offered, taking into account reflectivity of metal sediment. The temperature and rate deposition distribution in depth and by radius of tungsten sediment were estimated. The complex shape of refractory metal sediment was explained.

Keywords: Laser pyrolysis, reflectivity, heat conductivity, deposition from a gas phase.

ВВЕДЕНИЕ

Среди современных методов получения поверхностных структур и пленок, особое место занимает метод химического осаждения из газовой фазы (CVD-метод). Несмотря на большие преимущества этого метода, связанные с его высокой продуктивностью, технологичностью, существуют и проблемы регулирования процесса осаждения материалов в условиях протекания химической реакции [1].

Использование лазерного излучения при химическом осаждении из газовой фазы (LCVD) позволяет легко управлять процессом осаждения на любом этапе, при этом сохраняя преимущества обычного CVD-метода. Такие преимущества лазерно-индуцированного осаждения из газовой фазы позволяют широко применять этот метод в микроэлектронике для создания металлических и полупроводниковых структур и микроконтактов [2]. Для эффективного управления процессами лазерно-индуцированного осаждения из газовой фазы и получения поверхностных

структур с заданными параметрами, необходимо детальное изучение процессов осаждения при воздействии лазерного излучения и его влияния на характер осадка. Поэтому моделирование процессов осаждения металла на диэлектрическую подложку с целью детального изучения формообразования осадка имеет научный и практический интерес.

Среди факторов, которые существенно влияют на температурное распределение в металлическом осадке, большую роль играют не только теплофизические свойства буферного газа и прекурсора, но также параметры лазерного излучения и оптические свойства осажденного металла [3, 4].

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Предлагается математическая модель, которая учитывает влияние отражающей способности поверхности осаждаемого материала на температурное распределение и формообразование металлического осадка на диэлектрической подложке.

Модель состоит из нелинейного уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \lambda(T) \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(T) \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0, \quad (1)$$

граничных условий на подложке

$$T(r, 0) = T_0, \quad (2)$$

и на поверхности осадка

$$T(R, z) = T_0, \quad (3)$$

$$-\tilde{\lambda}(T) \frac{\partial T(r, H)}{\partial z} = I_0 (1 - \tilde{R}(\varphi)) \cdot e^{-r^2/r_0^2}, \quad (4)$$

где T_0 – температура газовой среды (обычно $T_0 \approx 300$ К); R – радиус осадка; H – толщина слоя осадка; I_0 – интенсивность лазерного излучения на оси пучка; r_0 – радиус пучка;

$\tilde{\lambda}$ – коэффициент теплопроводности буферного газа; λ – коэффициент теплопроводности металлического осадка; \tilde{R} – коэффициент отражения лазерного излучения поверхностью осаждающегося вещества; φ – угол падения лазерного излучения в данной точке поверхности осадка.

Скорость осаждения W определяется законом

$$W = \frac{d\Delta}{dt} = k_0 \exp \left\{ -\frac{T_a}{T} \right\},$$

где Δ – приращение толщины осадка, T_a – температура активации.

Для удобства вычислений полагаем, что лазерное излучение имеет круговую поляризацию, и, следовательно, коэффициент отражения вычисляется по формуле [5]

$$\tilde{R}(\varphi) = \frac{1}{2} \left(\left| \frac{\cos \varphi - \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}}{\cos \varphi + \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}} \right|^2 + \left| \frac{n^2 \cos \varphi - \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}}{n^2 \cos \varphi + \sqrt{n^2 - \sin^2 \varphi}} \right|^2 \right),$$

где n – комплексный показатель преломления материала осадка.

Предложенная модель может быть использована при изучении лазерно-индуцированного осаждения тугоплавких металлов из низкомолекулярных газообразных соединений типа WF_6 . В этом случае характерные температуры активации $T_a \sim 10^4$ К и жидкая фаза не образуется.

В экспериментах по лазерно-индуцированному осаждению в качестве буферного газа часто используется водород [2]. Методом интерполяции экспериментальных данных [6] были получены зависимости теплопроводности водорода и вольфрама от температуры в температурном интервале $200 \div 600$ К в виде

$$\tilde{\lambda}(T) = \lambda_0 \frac{T}{T_0}, \quad \lambda(T) = aT + b,$$

где $\lambda_0 = 0,183$ Вт/м·К; $a = -0,086$ Вт/м·К, $b = 197,025$ Вт/м·К.

РАСЧЕТЫ В РАМКАХ ПРЕДЛОЖЕННОЙ МОДЕЛИ

Перейдем в задаче (1) – (4) к новой неизвестной функции

$$U(r, z) = (T(r, z) - T_0) \left(T(r, z) + T_0 + \frac{2b}{a} \right). \quad (5)$$

Получим следующую граничную задачу

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial U}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0, \quad (6)$$

$$U(r, 0) = U(R, z) = 0, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\lambda_0}{2T_0} \left[\frac{b}{\sqrt{U(r, 0) + \left(T_0 + \frac{b}{a} \right)^2}} - 1 \right] \frac{\partial U(r, H)}{\partial z} = \\ & = I_0 (1 - \tilde{R}(r, H)) \cdot e^{-r^2/r_0^2}. \end{aligned} \quad (8)$$

Общее решение уравнения (6) с учетом граничных условий (7) имеет вид [7]:

$$U(r, z) = T_0^2 \sum_{m=1}^{\infty} C_m I_0 \left(\frac{\mu_m r}{R} \right) \frac{\text{sh}(\mu_m z/R)}{\text{sh}(\mu_m H/R)}, \quad (9)$$

где I_0 – функция Бесселя нулевого порядка, μ_m – m -й положительный корень уравнения $I_0(\mu) = 0$.

Заменим граничное условие (8) на близкое к нему условие, но имеющее гораздо более простой вид. В диапазоне температур ($T = 300 \div 600$ К) зависимость U от T , задаваемая соотношением (5), является практически линейной и ее приближенно можно записать в виде:

$$U(r, z) = \left(3T_0 + \frac{2b}{a} \right) (T(r, z) - T_0). \quad (10)$$

Выражая из (10) T через U и подставляя полученное выражение в граничное условие (4) получим

$$-\frac{\lambda_0}{T_0} \left(T_0 + \frac{U(r, H)}{3T_0 + 2(b/a)} \right) \frac{1}{3T_0 + 2(b/a)} \times \\ \times \frac{\partial U(r, H)}{\partial z} - I_0 (1 - \tilde{R}(r, H)) \cdot e^{-r^2/r_0^2} = 0. \quad (11)$$

Для получения численных результатов в разложении (9) удерживалось конечное число слагаемых. Неизвестные коэффициенты C_m определялись численно из условия минимальности отклонения левой части равенства (11) от нуля.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Апробация модели проводилась на примере пиролитического лазерно-индуцированного осаждения вольфрама из его гексафторида в атмосфере водорода в качестве буферного газа. Для расчета использовались следующие значения параметров:

$R = 10$ мкм; $H = 100$ мкм; $I_0 = 10^7$ Вт/м²; $r_0 = 10$ мкм; $T_a = 3608,4$ К; $k_0 = 0,0081$ м/с. Результаты расчетов приведены на рис. 1 – 3.

Анализ радиального распределения температур для вольфрама, при осаждении из его гексафторида, указывает на тенденцию смещения температурного максимума со временем от оси лазерного пучка (рис. 1), что при-

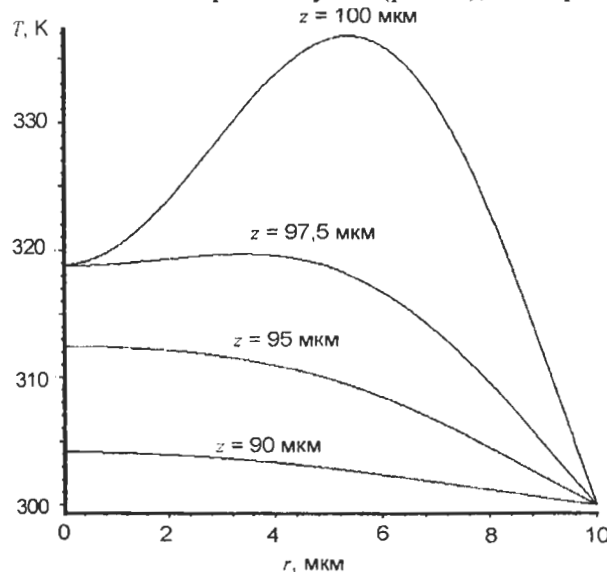


Рис. 1. Радиальное распределение температур в осажденном вольфраме при разной глубине осаждения.

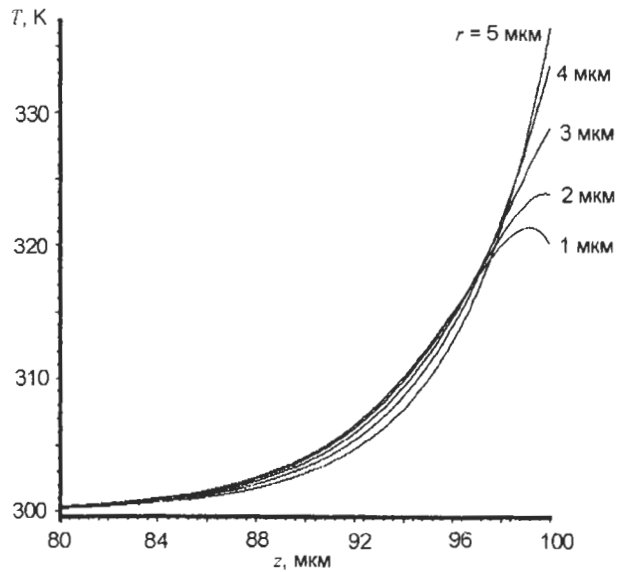


Рис. 2. Распределение температур по глубине осаждения на разных расстояниях от оси.

водит к образованию седлообразных поверхностных структур, кривизна которых увеличивается со временем (рис. 3). Это может привести в дальнейшем к разрушению краев металлических структур. Образование подобных структур установлено экспериментально [8] и связано как с характером распределения мощности в лазерном пучке, так и с отражающей способностью поверхности осаждения. На значительную роль отражающей способности в формировании седлообразных структур указывает сравнение с предложенной ранее моделью, в которой не учитывалось отражение, и результат расчетов указывал на образование сглаженных грибовидных форм поверхности осаждения [9].

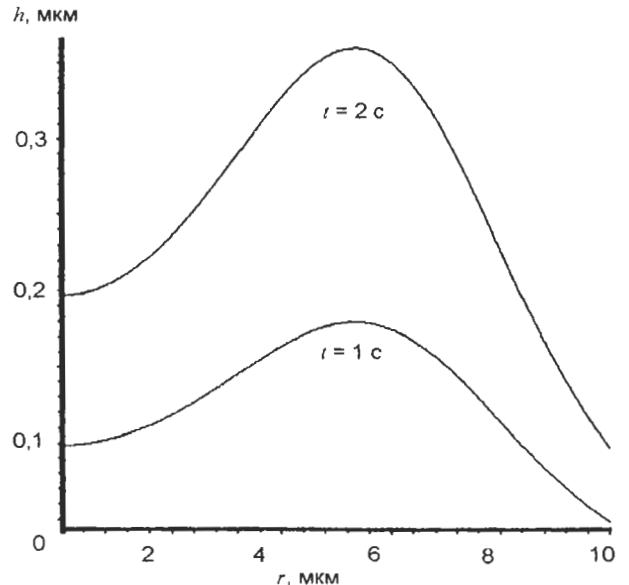


Рис. 3. Характер изменения высоты осаждения со временем.

Кроме того, детальное изучение температурного распределения по глубине осадка указывает на существование температурного максимума на поверхности у оси осадка (рис. 2), что свидетельствует о сложном характере процесса формообразования его поверхности и необходимости его дальнейшего теоретического исследования.

ВЫВОДЫ

1. Предложена математическая модель, которая учитывает вклад отражающей способности поверхности осажденного металла в формообразование и температурное распределение в металлическом осадке. Модель апробирована на примере лазерного пиролизического осаждения вольфрама из его гексафторида.
2. Показано, что максимум температурного распределения смещается от оси осадка в направлении его края, что приводит к образованию седлообразных поверхностных структур.
3. Показано, что кривизна седлообразной поверхности осадка вольфрама увеличивается со временем, что может приводить к разрушению краев осадка.
4. Характер температурного распределения по глубине указывает на возможность существования еще более сложных форм поверхности осадка с небольшим максимумом в окрестности оси.

ЛИТЕРАТУРА

1. Киреев В.Ю., Смоляров А.В. Технология микроэлектроники. Химическое осаждение из газовой фазы. – М.: Техносфера, 2006. – 192 с.
2. Карлов Н., Кириченко Н., Лукьянчук Б.// Успехи химии.–1993.–Т. 62, № 3.– С. 223-248.
3. Тесленко В.В.//Изв. АН СССР. Неорганические материалы. – 1989. – Т. 25, № 10. – С. 1653-1656.
4. Тесленко В.В.//Успехи химии. –1990. – Т. 59, № 2. – С. 177-196.
5. Ковалев О.Б., Орпинич А.М., Фомин В.М., Шулятьев В.Б.//Прикладная механика и техническая физика. – 2004. – Т. 42, № 6. – С. 106-116.
6. Физические величины. Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
7. Полянин А.Я. Справочник по линейным уравнениям математической физики. – М.: Физматлит, 2001. – 576 с.
8. Toht Z., Kargl P., Grivas C. et. al.//J. Appl. Phys. В. – 1992. – Vol. 54,. – P. 189-192.
9. Величко И.Г., Недоля А.В., Титов И.Н.//Поверхность. Рентг. синхротрон. и нейтрон. исслед. – 2009. – № 4. – С. 67-71.

© А.В. Недоля, И.Н. Титов, 2009