

# КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

*T. Lebyedyeva, M. Ozerov,  
P. Shpylovyu*

## **MODELLING AND INVESTIGATION OF THIN-FILM STRUCTURES INTERFACE**

*The model of interface of thin-film structures that allows to produce calculations of its thickness using anodization profiles as the developed software and results for structure Nb-Al-Nb are represented.*

*Key words: thin-film structures, interface, modeling, anodization.*

*Представлено модель перехідного шару тонкоплівкових структур, що дозволяє проводити розрахунки його товщини за профілями анодування. Розроблено програму для розрахунків та приведені результати розрахунків для структури Nb-Al-Nb.*

*Ключові слова: структури тонкоплівкові, перехідний шар, моделювання, анодування.*

*Представлена модель переходного слоя тонкопленочных структур, позволяющая производить расчет его толщины по профилям анодирования. Разработана программа расчета и приведены результаты расчета для структуры Nb-Al-Nb.*

*Ключевые слова: тонкопленочные структуры, переходной слой, моделирование, анодирование.*

© Т.С. Лебедева, М.В. Озеров,  
П.Б. Шпилевой, 2012

УДК 539.23;538.91:621

Т.С. ЛЕБЕДЕВА, М.В. ОЗЕРОВ,  
П.Б. ШПИЛЕВОЙ

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРЕХОДНОГО СЛОЯ ТОНКОПЛЕНОЧНЫХ СТРУКТУР**

**Вступление.** Исследования переходного слоя (границы раздела) между двумя материалами для тонкопленочных структур, применяемых в микроэлектронике, обычно сопряжено с некоторыми ограничениями, накладываемыми используемыми методами или подходами. Ширина данного слоя может определяться шероховатостью нижней пленки материала, иногда значительное влияние имеет взаимная диффузия на границе раздела. В случае, когда интердиффузия невелика, представление о ширине переходного слоя между слоями в тонкопленочной структуре можно получить, исследуя морфологию поверхности нижней пленки материала. Применение атомно-силовой микроскопии дает такую возможность. Однако в случае использования металлов, подверженных окислению, при проведении исследований после извлечения образца из вакуумной камеры, исследоваться будет поверхность окисленного металла. Параметры ее морфологии могут значительно отличаться от параметров, присущих поверхности чистой пленки металла. Кроме того, данный метод не дает возможности исследовать переходной слой многослойных структур. Для изучения границ раздела между слоями более подходят спектроскопические методы с распылением исследуемых материалов или просвечивающая электронная микроскопия. Достоинствами этих методов является высокое разрешение по толщине, но высокая стоимость существенно ограничивает их широкое использование. Поэтому существует потребность в методе, который

позволил бы произвести анализ ширины границы раздела между двумя пленками, имел высокое разрешение, удобство при применении и доступность, мог бы систематически применяться как в процессе отработки технологии, так и при изготовлении тонкопленочных изделий. Таким методом может быть метод контролируемого анодного окисления профилей анодирования (метод профилей анодирования) при условии создания правомерной модели переходного слоя, позволяющей производить расчет его толщины по экспериментальным данным.

**Основы метода профилей анодирования.** В 1985 году в работе [1] предложен метод исследования слоев сверхпроводниковых тонкопленочных микросхем с помощью жидкостного анодного окисления металлов. Суть данного метода состоит в следующем. При анодном окислении металлов в режиме постоянного тока приращение толщины окисного слоя сопровождается ростом напряжения на электролитической ячейке. Скорость роста толщины окисла определяется как

$$dx/dt = \lambda(M/nZ\rho F)j, \quad (1)$$

а скорость изменения напряжения на окисном слое –

$$dU/dt = \lambda(M/nZ\rho F)j E_{\text{диф}}, \quad (2)$$

где  $j = I/S$  – плотность тока;  $M$  – молекулярный вес окисла;  $\rho$  – плотность окисла;  $nZ$  – валентность реакции окисления;  $F$  – число Фарадея;  $\lambda$  – эффективность формовки;  $E_{\text{диф}} = dU/dx$  – дифференциальная напряженность поля в растущем анодном окисле;  $U$  – напряжение на образце, практически совпадающее с напряжением на ячейке;  $I$  – ток через исследуемую поверхность;  $S$  – площадь этой поверхности.

Метод состоит в том, что в процессе анодного окисления образца фиксированной площади отслеживают зависимость  $dU/dt$  и, по характеру изменения  $dU/dt(t)$ , или, что более наглядно,  $dU/dt(U)$ , делают выводы о наличии неоднородностей в металле на пути фронта анодирования, об изменении состава слоя металла или окисного слоя, о толщине металлических и диэлектрических слоев, входящих в структуру, о состоянии границ раздела слоев, т. е. получают информацию о микроструктурных характеристиках. Получаемая зависимость  $dU/dt(U)$  носит название профиля анодирования. На рис. 1 показана зависимость  $dU/dt(U)$  для системы металлов Me1/Me2.

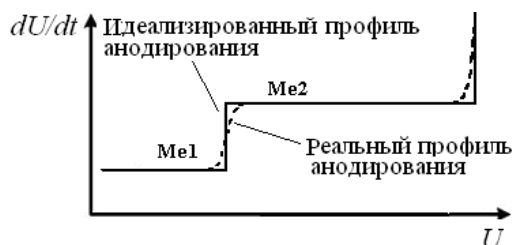


РИС. 1. Зависимость  $dU/dt(U)$  для тонкопленочной структуры металлов Me1/Me2

Высокое разрешение данного метода обеспечивается за счет того, что сам «измерительный инструмент» – фронт анодирования имеет толщину в несколько атомных слоев, что гарантирует высокую чувствительность при изменении на его пути микроскопических характеристик материала.

Длительное время данный метод применялся только для оценки толщин пленок, входящих в исследуемую структуру. В этом случае, зная константу анодирования для каждой из пленок и напряжение, падающее на окисле, выраженном из этой пленки, можно найти толщину пленки по формуле

$$d = K \cdot U,$$

где  $d$  – толщина проанодированного металла, нм;  $k$  – константа анодирования, нм/В.

Формула справедлива лишь для малых плотностей тока ( $j \leq 10$  мкА/мм<sup>2</sup>) [2].

Данный метод пригоден для исследования любых тонкопленочных структур [3], основанных на материалах, поддающихся жидкостному анодному окислению с образованием плотных нерастворимых в электролите оксидных пленок. Он широко применяется при качественном контроле тонкопленочных структур для сверхпроводниковых туннельных переходов на базе ниобия и алюминия [4, 5].

**Создание модели переходного слоя тонкопленочной структуры.** Поскольку переходной слой между двумя металлами имеет некоторую шероховатость, реальные профили анодирования сильно отличаются от идеализированных (рис. 1) и оценка толщины слоев по формуле  $d = k \cdot U$  некорректна. В данной работе предложена модель переходного слоя с учетом его шероховатости и способ расчета ширины границы раздела и прилегающих пленок.

При прохождении фронта анодирования через переходной слой (рис. 2) между Me1 и Me2 средняя скорость анодирования на расстоянии  $x$  определяется формулой

$$v(x) = B_1 \cdot v_1 + B_2 \cdot v_2 = v_1 + (v_2 - v_1) \cdot B_2, \quad (3)$$

где  $v_1$  и  $v_2$  – скорости анодирования первого и второго материала соответственно;  $B_1$  и  $B_2$  – процентные соотношения площадей, которую занимают первый и второй материалы на расстоянии  $x$ .

За начало отсчета принят уровень первого контакта фронта анодирования с нижележащим материалом.

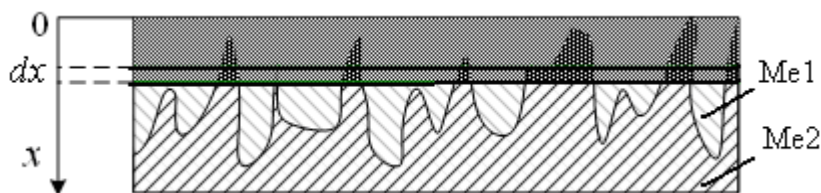


РИС. 2. Схематическое изображение продвижения фронта анодирования при переходе от одного материала к другому

$B_1$  и  $B_2$  нормированы на общую площадь анодируемой области и являются некоторыми функциями от глубины анодирования, которые определяются шероховатостью поверхности. Поскольку  $B_1 + B_2 = 1$ , то для определения  $v(x)$  достаточно знать зависимость  $B(x)$  хотя бы для одного из них. Процентное содержание второго металла  $B_2$  монотонно возрастает по мере продвижения фронта анодирования вглубь переходного слоя и меняется от 0 до 1, поскольку в начале отсчета окисляется только первый металл, а после прохождения переходного слоя – второй. От  $B_2$  удобно перейти к плотности распределения второго металла по высоте  $b_2$ , которая равна разнице между площадью, которую занимает второй материал на расстоянии  $x+dx$ , и площадью, которую занимает второй материал на расстоянии  $x$ :

$$b_2(x) = B_2(x+dx) - B_2(x). \quad (4)$$

Параметр  $b_2$  показывает увеличение количества элементарных площадок второго материала, появившихся на пути фронта анодирования при прохождении расстояния  $dx$ , нормированное на общую площадь. Функция  $B_2(x)$  эквивалентна распределению количества элементарных площадок второго материала по высоте.

Определение зависимости  $b_2(x)$  сводится к нахождению функции распределения точек поверхности по высоте. Показано, что, как правило, распределение точек по высоте можно описать распределением Гаусса. Как пример на рис. 3 показано распределение точек по высоте, полученное с помощью атомной силовой микроскопии (АСМ) для поверхности отожженной пленки золота, изготовленной методом термического испарения. Можно предположить, что и для пленок других металлов будет наблюдаться подобная картина распределения.

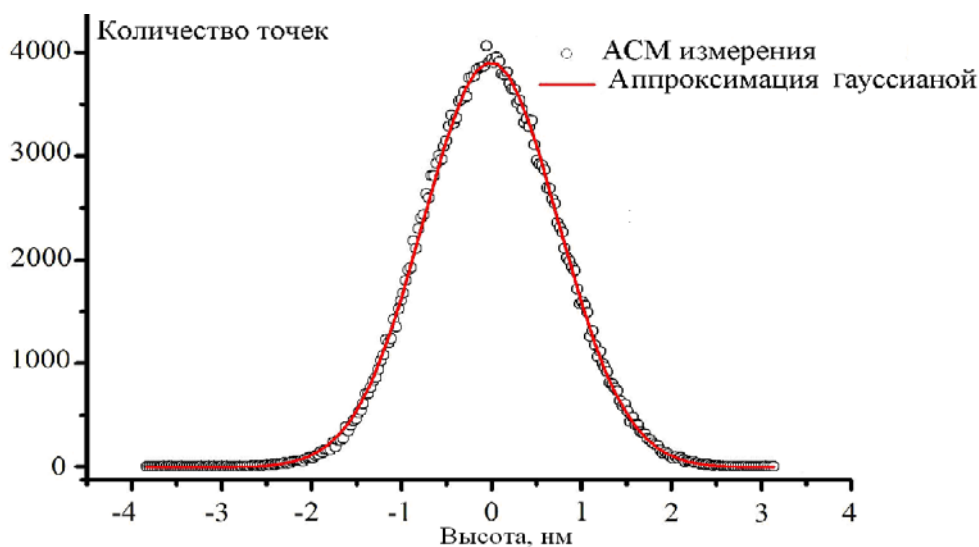


РИС. 3. Полученное с помощью АСМ распределение точек по высоте для поверхности отожженной пленки золота

Тогда величина  $b_2(x)$  распределена по закону Гаусса:

$$b_2 = H \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_{\max})^2}{2\sigma^2}\right), \quad (5)$$

где  $H$  – нормировочный коэффициент;  $\sigma$  – характерная толщина, удвоенная величина которой принимается за толщину слоя шероховатости;  $x_{\max}$  – расстояние на котором можно провести условную границу между первым и вторым материалом.

Зависимость  $B_2(x)$  аппроксимируется функцией Гаусса:

$$B_2(x) = \int_0^d b_2(x) \cdot dx = \int_0^d H \cdot \exp\left(-\frac{(x - x_{\max})^2}{2\sigma^2}\right) \cdot dx = \operatorname{erf}\left(K \cdot (x - x_{\max})\right), \quad (6)$$

где  $K$  – некоторый коэффициент, равный обратной величине  $\sigma$ .

Тогда скорость анодирования переходного слоя  $d$ :

$$v = v_1 + (v_2 - v_1) \cdot \operatorname{erf}\left(K \cdot d\right). \quad (7)$$

Поскольку скорость анодирования и толщина слоя пропорциональны соответственно первой производной и самому значению напряжения, то, с поправкой на начало отсчета для перехода анодирования от одного материала к другому, уравнение (7) можно записать как:

$$\frac{dU}{dt} = \left(\frac{dU}{dt}\right)_1 + \left(\left(\frac{dU}{dt}\right)_2 - \left(\frac{dU}{dt}\right)_1\right) \cdot \operatorname{erf}\left(\xi \cdot (U - U_{12})\right), \quad (8)$$

где  $(dU/dt)_1$  и  $(dU/dt)_2$  – значения первых производных напряжения при анодном окислении первого и второго материалов;  $U_{12}$  – напряжение, которому соответствует переход фронтом анодирования условной границы равновесия процентного содержания материалов;  $\xi$  – коэффициент перехода, определяемый толщиной переходного слоя, отвечает за крутизну перехода от уровня  $(dU/dt)_1$  на уровень  $(dU/dt)_2$ . Коэффициенту перехода  $\xi$ , учитывая (8), можно поставить в соответствие характерную толщину  $D_r$  переходного слоя

$$D_r = 2 \cdot \frac{1}{\xi} \cdot \frac{2}{k_1 + k_2}, \quad (9)$$

где  $k_1$  и  $k_2$  – постоянные анодирования первого и второго материалов, которые показывают, какая толщина металла переходит в окисел при возрастании напряжения на 1 В.

Таким образом, переход фронта окисления от материала с меньшей скоростью анодирования к материалу с большей скоростью анодирования, при  $(dU/dt)_1 < (dU/dt)_2$ , описывается переходным слоем в соответствии с (8). Определить  $\xi$  на практике можно компьютерной подгонкой – аппроксимируя функцией Гаусса экспериментальную кривую  $dU/dt(U)$ . Определив  $\xi$  и зная  $k_1$  и  $k_2$ , из (9) легко найти толщину переходного слоя  $D_r$  между пленками.

Приведенная модель справедлива только для структур, для которых выполняется условие  $(dU/dt)_1 < (dU/dt)_2$ . Попытки исследовать процессы роста анодных окислов на тонкопленочных структурах, для которых  $(dU/dt)_1 > (dU/dt)_2$  предприняты в работах [6, 7]. Они выявили сложную картину «прорастания» столбиков окисла нижнего металла в окисел верхнего металла, обусловленную соотношением чисел переноса при электрохимическом процессе и удельного сопротивления образующихся окислов [7]. Построение математической модели таких процессов намного сложнее и требует дополнительного теоретического исследования процесса анодирования таких структур.

**Программа для расчета толщины пленок и ширины границ раздела.** На базе данной модели в среде MATLAB написана программа, аппроксимирующая экспериментально полученные временные зависимости скорости роста напряжения от достигнутого напряжения при анодном окислении в режиме постоянной плотности тока для трехслойной пленочной структуры путем сведения к минимуму среднеквадратического отклонения экспериментальных данных. Мы использовали программу для расчета параметров структур Nb-Al-Nb.

Программа, произведя загрузку первичных данных – набора точек зависимости  $dU/dt(U)$ , автоматически строит по ним исходную кривую со всеми экспериментальными особенностями – шумами, «всплесками» производной по напряжению (рис. 4). Затем с целью определения основных параметров профиля анодирования производится подбор вида кривой по заранее заданной модели, в данном случае – трехслойной. Определяемые программой параметры построения могут быть скорректированы оператором. Построение кривой на этом этапе имеет приблизительный характер.

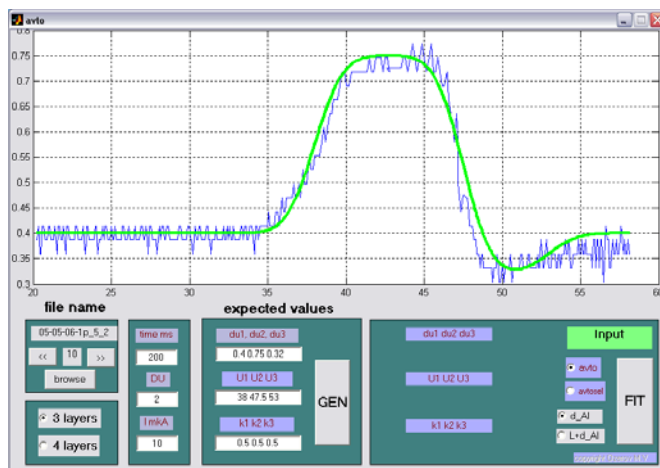


РИС. 4. Окно программы на этапе аппроксимации экспериментальной зависимости

На следующем этапе программа производит аппроксимацию экспериментальной зависимости путем сведения к минимуму среднеквадратического отклонения. Поскольку нелинейные участки могут иметь характер как обусловленный физическими причинами (изменения состава или структуры пленки), так и являться артефактами (шумами), оператор производит оценку правильности аппроксимации. На экран выводятся линии, показывающие определенные программой границы равновесия между процентным содержанием металлов в переходном слое «границы слоев металлов» перед вычислением толщин слоев структуры. Далее для единичного профиля анодирования программа рассчитывает значения толщины слоя верхнего Nb, слоя Al и границы их раздела (рис. 5).

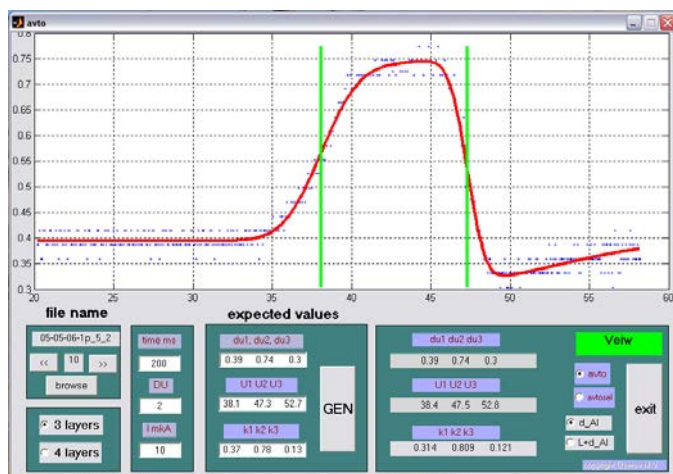


РИС. 5. Окно программы на этапе определения основных параметров профиля анодирования

Программа способна также обработать целый массив данных (профилей анодирования) с построением одномерной зависимости распределения толщины по заданному направлению (рис. 6, а) либо с построением двумерного распределения по тестируемой площади (рис. 6, б). Для проведения исследований на подложке с тонкопленочной структурой методом фотолитографии создается периодическая матрица из окон для анодирования площадью  $1\text{ мм}^2$  и шагом 5 мм с маской из фоторезиста. Далее производится снятие профилей анодирования при анодном окислении в тестовых окнах. Затем производится компьютерная обработка массива полученных данных с помощью вышеописанной программы.

Далее представлены данные по толщине слоя верхнего ниобия, барьерного алюминия и границе раздела в джозефсоновской структуре Nb-Al-Nb (рис. 6, а) и по толщине слоев Nb и Al в тестовой структуре Nb-Al (рис. 6, б), использовавшейся для нахождения области однородной толщины при осаждении из двух магнетронов (рис. 6, б).

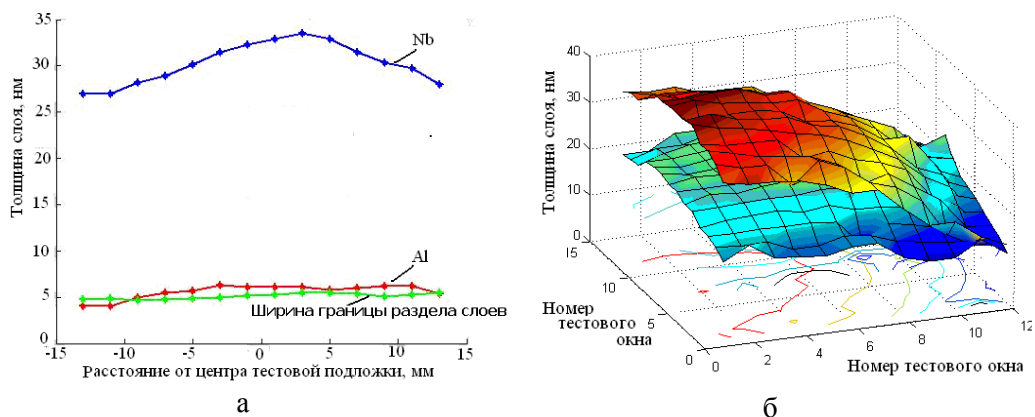


РИС. 6. Виды графического представления результатов расчета толщины слоев

Предложенная методика применялась как при отработке технологии сверхпроводниковых туннельных контактов, так и при создании тонкопленочных волноводных структур с металлическим подслоем для оптических аналитических сенсоров [8].

1. *Huggins H.A., Gurvitch M.* Preparation and characterization of Nb/ $\text{AlO}_x$ -Al/Nb josephson junctions // *J. Appl. Phys.* – 1985. – Vol. 57 – P. 2103 – 2109.
2. *Юнг Л.* Анодные оксидные пленки. – Л.: Энергия, 1967. – 232 с.
3. *Головчанский М.Е., Марченко В.А., Никулов А.В.* Анализ пленочных структур методом контролируемого окисления металлов // *Приборы и техника эксперимента.* – 1990. – № 3. – С. 149 – 152.
4. *Lebedeva T., Voytovytsch I., Shpylovy P.* Anodization spectroscopy express-control system for thin-film technologies // *Metal Matrix Composites and Metallic Foams.* – 2005. – Vol. 5. – P. 53 – 58.
5. *Войтович И.Д., Лебедева Т.С., Шпилевой П.Б.* Применение контролируемого анодного окисления для экспресс-контроля в технологии пленок и тонкопленочных структур // *Технология и конструирование электронной аппаратуры.* – 2003. – № 5. – С. 42 – 46.
6. *Pringle J.P.S.* The anodic oxidation of superimposed niobium and tantalum layers: theory // *Electrochem. Acta.* – 1980. – Vol. 25. – P. 1403 – 1421.
7. *Pringle J.P.S.* The anodic oxidation of superimposed metallic layers: theory // *Electrochem. Acta.* – 1980. – Vol. 25. – P. 1423–1437.
8. *Lebyedyeva T.S., Shpylovy P.B. et. al.* Modeling and Data Processing for Thin-Film Optical Sensors // *Proc. of 6-th IEEE Intern. Conf. on Intelligent Data Acquisition and Advance Computind System: Technology and Application.* – Praga. – 2011. – Vol. 1. – P. 119 – 124.

Получено 15.10.2012