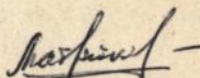


На правах рукопису

МАТВІЙКІВ Олег Михайлович



УДК 621.382.002

РОЗРОБКА МОДЕЛЕЙ І МЕТОДІВ ГАЗОФАЗНОГО ОСАДЖЕННЯ
В ВУЗЛАХ СКЛАДНОЇ ФОРМИ ДЛЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ САПР РЕЗ

Спеціальність: 05.13.05. - Системи автоматизації проектування

А в т о р е ф е р а т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

ЛЬВІВ - 1995.



00778128 (X)

Дисертація є рукописом.

Робота виконана на кафедрі Мікрорадіоелектроніки і технологій радіоапаратури Санкт-Петербурзького державного електротехнічного університету.

Науковий керівник : доктор технічних наук, професор

Б.М.Денъдобренько

Офіційні опоненти : доктор технічних наук, професор

Воронін Валерій Олександрович
кандидат технічних наук, с.н.с.
Смеркло Любомир Михайлович

Провідне підприємство : Науково-дослідний інститут

НВО "Карат", м. Львів

Захист відбудеться "17" травня 1995 року в 14⁰⁰ годин на засіданні спеціалізованої ради КО4.06.06 при Державному університеті "Львівська політехніка" за адресою :
290646 , м.Львів-ІЗ, вул. С.Бандери 12.

З дисертацією можна ознайомитись в науково-технічній бібліотеці університету за адресою :
290646 , м.Львів-ІЗ, вул. Професорська 1.

Автореферат розісланий "15" квітня 1995 року.

Вчений секретар
спеціалізованої ради
к.т.н.

С.П.Ткаченко

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність проблеми. Розширення номенклатури і конструктивної бази РЕЗ привело до створення плівкових вузлів на нетрадиційних для тонкоплівкової технології підкладках складної геометричної форми, що характеризуються підвищеними якістю і надійністю. Такі плівкові вузли на циліндричних, конічних та інших осесиметричних підкладках використовуються в електростатичних системах управління електронним променем в передаючих телевізійних трубах для камер ТВЧ, оптичних запам'ятовувачих пристроях, плівкових датчиках та інших пристроях оптоелектроніки, приладо- і машинобудування.

Якісне та швидке проектування таких електротехнічних виробів можливе тільки засобами САПР. Сучасні уявлення про автоматизоване проектування виробів та вузлів РЕЗ орієнтовані на використання інтегрованих САПР РЕЗ, в склад яких входять системи технологічного проектування. Складна геометрична форма підкладок для плівкових вузлів РЕЗ значно ускладнює процеси проектування і виготовлення. Найбільше це стосується етапу фізико-технологічного проектування, так як такі САПР ТП повинні органічно об'єднувати проектування механообробних і зборочно-монтажних операцій з операціями осадження й обробки тонкоплівкових шарів. В зв'язку з відсутністю в існуючих САПР РЕЗ засобів для проектування осадження тонкоплівкових структур на поверхні комплексної конфігурації, виникла необхідність розробки програмно-методичного комплексу (ПМК).

Аналіз робіт в області проектування процесів нанесення тонкоплівкових шарів для електротехнічних виробів показав, що методика формування плівок на підкладках складної форми розвинута недостатньо. А існуючі моделі осадження, що використовуються в САПР ІС, розроблені тільки для плоских пластин, і, в основному, для класичних процесів термовакuumного випаровування й іоноплазмового розпилення. Однак ці технологічні процеси набувають на значні труднощі, пов'язані з забезпеченням заданої якості плівкових шарів на підкладках комплексної конфігурації, вимогами відтворюваності вихідних параметрів, автоматизації та технологічної гнучкості виробництва. А основні перспективи по формуванню якісних тонкоплівкових шарів пов'язані з технологією парофазного хімічного осадження (ПХО) із металоорганічних сполук (МОС) в реакторах пониженого тиску.

Успішне використання методів хімічного осадження з газової фази в виробництві плівкових вузлів РЕЗ можливе тільки в разі роз-

робки й реалізації комплексного підходу до проектування технологічного процесу засобами САПР. При цьому повинні враховуватись конструктивні особливості реактора, геометрія підкладки і технологічні режими осадження спільно з механізмами формування мікроструктури піролітичних шарів та її зв'язки з електричними, механічними й ін. параметрами. Дана концепція лягла в основу узагальненого алгоритму моделювання функціональних параметрів плівкових вузлів РЕЗ. Внаслідок недостатнього вивчення таких взаємозв'язків для піролітичних плівок, даний підхід слабо висвітлений в літературі й не використовується на практиці.

Метою роботи є розробка ефективних моделей процесу виробництва плівкових вузлів РЕЗ складної геометричної форми по технології ПФХО, і методів їх реалізації в програмно-методичному комплексі технологічних САПР РЕЗ для забезпечення скорочення тривалості процесу проектування і виробничого циклу виготовлення плівкових вузлів, підвищення виходу придатних і підвищення виробничої гнучкості при заданому рівні якості виробів.

Для досягнення мети необхідно вирішити наступні задачі :

- розробити і дослідити конструктивно-технологічні прийоми забезпечення однорідності плівкових шарів, що формуються на підкладках складної форми по технології ПФХО ;
- дослідити й уточнити залежності електрофізичних параметрів піролітичних металічних шарів на поверхнях складної форми від режимів осадження ;
- розробити й дослідити узагальнену модель фізикохімічного процесу піролітичного осадження при пониженому тиску ;
- розробити й дослідити математичні моделі швидкості росту та складу плівкових піролітичних шарів із МОС на підкладках комплексної конфігурації ;
- розробити програмно-методичний комплекс моделювання процесів ПФХО плівкових шарів на поверхнях підкладок складної форми для технологічних САПР РЕЗ ;
- за допомогою ПК проаналізувати технологічний процес формування плівкових циліндричних дефлекторів для ТВ передаючих трубок ;
- розробити структуру гнучкого технологічного модуля і модернізувати лабораторну установку осадження плівкових шарів на внутрішню поверхню скляних циліндричних вузлів.

Методи досліджень

включають методи системного аналізу, апарат математичної статистики, математичного моделювання, молекулярної фізики, математичної

фізики і обчислювальної математики, методи прикладного і системного програмування.

На захист вносяться наступні положення.

1. Методика технологічного забезпечення однорідного росту в процесах ПФХО при пониженому тиску, котра дозволяє формувати функціональні плівкові елементи в вузлах РЕЗ складної геометричної форми.
2. Математичні моделі розрахунку критичних значень параметрів технологічного процесу МОПФХО, котрі дозволяють на етапі проектування оцінити вплив режимів осадження на однорідність шарів для підкладок складної геометричної форми.
3. Узагальнена модель ПФХО, котра включає моделі потоку реагентів, теплопереносу, масопереносу і хімічної кінетики газозфазних та поверхневих реакцій, і дозволяє зв'язати режими осадження з мікроструктурними і електричними параметрами плівок.
4. Алгоритмічна модель процесу тепломасопереносу реагентів на поверхнях складної геометричної форми, яка базується на методі скінчених елементів і дозволяє користувачу вибирати розумний компроміс між точністю і необхідними обчислювальними ресурсами.
5. Програмно-методичний комплекс моделювання технологічного процесу ПФХО при пониженому тиску, котрий дозволяє розв'язувати задачі проектування операцій піролітичного осадження, проектування нових реакторів і технологічного освітлення, а також задачі розрахунку мікроструктурних і електричних параметрів плівок на підкладах комплексної конфігурації.

Наукова новизна роботи:

- проведено аналіз взаємозв'язків між режимами ПФХО й параметрами тонких плівок, і розроблена методика технологічного забезпечення однорідного росту плівкових шарів на поверхнях підкладок складної форми ;
- розроблені математичні моделі розрахунку критичних значень парціального тиску лімітуючого реагента і швидкості розходу газової суміші в реакторах пониженого тиску, перевищення котрих в процесі осадження дозволяє формувати однорідні плівкові шари по поверхнях підкладок комплексної конфігурації ;
- розроблена узагальнена математична модель ПФХО, котра описує потік реагентів, кондуктивний і радіаційний механізми теплопереносу, ефекти конвективного, дифузійного та термодифузійного масопереносу, а також кінетику гомогенних і гетерогенних хімічних реакцій в умовах пониженого тиску ;
- для чисельного розв'язку системи рівнянь, що описують фізико-

хімічні процеси ПФХО в реакторах пониженого тиску, використано метод скінчених елементів, який дозволяє з необхідною точністю описати профілі температурних і концентраційних полів газової суміші для підкладок складної геометричної форми ;

- розроблено склад і структуру математичного, програмного, лінгвістичного й інформаційного забезпечень для програмно-методичного комплексу ПФХО технологічної САПР РЕЗ.

Практична цінність роботи :

1) проведена класифікація МОС і визначені реагенти, придатні для формування плівкових провідникових шарів на шкляних циліндричних підкладах ;

3) визначені критичні параметри і адаптовані математичні моделі розрахунку критичних значень парціального тиску лімітуючого реагенту, і швидкості розходу газової суміші для процесів осадження плівкових шарів на внутрішніх поверхнях шкляних циліндричних підкладок в реакторах пониженого тиску ;

4) проведено аналіз рівномірності, мікроструктурних і електро механічних параметрів провідникових шарів хрому, молібдену і вольфраму, сформованих на внутрішніх поверхнях циліндричних вузлів, котрий показав, що вказані параметри відповідають технічним умовам для виробництва плівкових дефлекторів ;

5) здійснено програмну реалізацію моделей і методів розв'язку системи рівнянь тепломасопереносу в процесах ПФХО у вигляді модулів програмно-методичного комплексу моделювання ;

6) за допомогою розробленого ПМК спроектовано процес формування плівкових електродів циліндричного дефлектора ПТВГ по технології газозфазного хімічного осадження із гексакарбоніла хрому та хром-органічної рідини "Бархос" ;

7) модернізовано лабораторну технологічну установку піролітичного осадження плівкових шарів на несиметричній підкладці складної форми, котра може функціонувати в режимі гнучкого автоматизованого виробництва.

Реалізація результатів роботи.

Теоретичні і практичні результати досліджень використовувались в сумісних науково-дослідних роботах, що проводились в НДІ Телебацька ВО "Електрон" м. Санкт-Петербург в 1989 - 1993 рр. а також на підприємствах АТ "Концерн-Електрон" м. Львів і АОЗТ "Кром ЛТД" м. Санкт-Петербург.

Апробація роботи.

Основні положення і результати дисертаційної роботи доповідались і

обговорювались на : Всесоюзній школі-семинарі "Досвід розробки і застосування приладо-технологічних САПР" (литий 1991р., Львів) ; Всесоюзній школі-семинарі "Системи автоматизованого проектування РЕА і НВІС / САПР РЕА-91 /" (березень 1991р., Київ) ; Всесоюзній галузевій НТК "Телебачення" (вересень 1990р., Ленінград) ; II та III Міждержавних науково-технічних конференціях "Досвід розробки і застосування приладо-технологічних САПР в мікроелектроніці" (литий 1993, 1995 рр., Львів) ; конференціях і семінарах професорсько-викладацького складу С-Пб ДЕТУ в 1990 - 1993 рр.

В повному обсязі дисертаційна робота доповідалась на кафедрі "Мікрорадіоелектроніки і технології радіоапаратури" Санкт-Петербурзького державного університету ім. В.І.Ульянова (Леніна), а також на кафедрі "Системи автоматизованого проектування" державного університету "Львівська політехніка".

Публікації. Основні положення і результати дисертаційної роботи відображені в шести друкованих працях.

ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі обґрунтовано актуальність вибраного напрямку досліджень, сформульована мета і основні задачі дослідження, визначається наукова новизна роботи, практична цінність отриманих результатів, положення, що виносяться на захист, а також короткий зміст роботи.

В першому розділі розглянуто особливості застосування плівкових циліндричних вузлів, що складають основу електростатичних фокусуючо-відхиляючих систем сучасних передаючих телевізійних трубок для камер ТВЧ. В зв'язку з технологічною складністю виготовлення твердотілих перетворювачів для ТВЧ, виробництво трубочних камер продовжується і вимагає розробки нових технологічних процесів і методів їх проектування. Основною частиною ТВ камери є передаюча трубка, відхиляючі (і фокусуючі) електроди якої, сформовані у вигляді тонкоплівкових елементів на внутрішній поверхні скляної циліндричної підкладки. Для забезпечення високої роздільної здатності і чутливості встановлені вимоги до функціональних параметрів плівкових електродів і, відповідно, до якості плівкових шарів.

Для формування тонких плівок в мікроелектронній технології використовуються методи термовакuumного, іоноплазмового і рідке газозфазного хімічного осадження. Однак, нетрадиційна форма підкладки, часті зміни геометричних розмірів, і забезпечення можливості осадження однорідних шарів на довільній поверхні складної форми,

зумовили вибір технології ПХО в реакторах пониженого тиску.

Проектування процесів осадження плівкових структур по технології ПХО, і, особливо на поверхні підкладок складної форми, нагтовхується на труднощі, зумовлені великою різноманітністю конструкцій реакторів, методів активації хімічних реакцій, варіантів подачі парогазової суміші (пгс) в область осадження та ін. З цим пов'язане і переважне використання емпіричних методів в проектуванні, і слабким розвитком (а іноді і відсутністю) програмних засобів автоматизованого проектування процесів ПХО в САПР ТП РЕЗ. В цьому контексті розглянуто загальну структуру САПР РЕЗ, визначено суть і місце задачі проектування газозфазних процесів хімічного осадження в загальній системі, сформульовано необхідність і проаналізовані стратегії розробки адаптивних ПМК. Визначені основні особливості побудови і функціонування програмної системи, загальна структура її компонентів, що складається з препроцесора, процесора і постпроцесора, котрі інформаційно взаємодіють через оперативну базу даних і функціонально об'єднані моніторно-діалоговою системою.

На основі аналізу стану проблем проектування і виробництва плівкових вузлів РЕЗ, сформульовані основні задачі дослідження:

- вибір матеріалів, режимів та всебічний аналіз впливу параметрів операції МОПХО в реакторах пониженого тиску на рівномірність, мікроструктуру та електромеханічні параметри плівок, сформованих на підкладках складної форми;
- розробка узагальненої математичної моделі ПХО, котра б описувала основні фізикохімічні процеси в реакторах пониженого тиску для підкладок складної геометричної форми;
- розробка програмно-методичного комплексу моделювання для реалізації процесу адаптивного технологічного проектування тонкоплівкових вузлів складної форми засобами технологічних САПР РЕЗ.

В другому розділі розглянуто питання розробки методики технологічного забезпечення однорідного росту плівкових структур, висору хімічних реагентів з числа МОС для формування провідникових шарів, а також проведено комплекс експериментальних досліджень розподілу товщини плівки і її нерівномірності, мікроструктури і електромеханічних параметрів по поверхні підкладок складної форми.

Методика технологічного забезпечення однорідного росту базується на концепції "безградієнтних" реакторів і включає вибір складу реагуючих газів, вибір температурного режиму, величини і форми профіля температурного градієнта нагріву підкладок, вибір величин загального і парціальних тисків реагентів, а також швид-

кості розходу пгс. Вибір типу МОС і складу пгс здійснюється згідно конструктивно-технологічних вимог до параметрів плівки, термодинамічних і кінетичних розрахунків хімічної системи. Температурний режим піролітичного осадження визначається матеріалом і геометричними розмірами підкладки, типом МОС і повинен забезпечувати проведення процесу осадження в кінетичному режимі на межі з дифузійним. Оптимальне значення тиску в реакційній камері повинно забезпечувати для підкладок складної форми швидкість дифузійного переносу реагентів до поверхні росту, недоступної для конвективного масообміну, вищу за швидкість гетерогенних реакцій розкладу. Для отримання нульового порядку реакції розкладу по лімітуючому реагенту по всій зоні осадження, парціальний тиск відповідного МОС повинен перевищувати критичне значення. Аналогічно вибирається величина швидкості розходу пгс, котра повинна перевищувати критичне значення $F_{кр}$, при якому усуваються дифузійні обмеження швидкості росту на поверхнях комплексної конфігурації.

При аналізі процесів піролітичного осадження в реакторах пониженого тиску, запропоновані математичні моделі розрахунку критичних значень $P_{ноокр}$ і $F_{кр}$:

$$P_{ноокр} = V_m \cdot RR \cdot (2\pi R_n L_n^2)^{\alpha} \cdot P / F^{\beta}; \quad (1)$$

$$F_{кр} = (V_m \cdot RR \cdot (2\pi R_n L_n^2)^{\alpha} \cdot P / P_{ноокр})^{1/\beta}, \quad (2)$$

где V_m - стандартний молярний об'єм газу, RR - швидкість реакції; R_n , L_n - внутрішній радіус і довжина циліндричної підкладки; P , $P_{ноокр}$ - загальний в реакторі і парціальний тиски; F - швидкість розходу пгс; α , β - коефіцієнти, що характеризують конструктивно-технологічні особливості системи "реакційна камера - підкладка". З експериментів визначено, що для циліндричних підкладок в вертикальних реакторах пониженого тиску: $\alpha = \beta = 1$, при $F < 1,0$ см³/хв., і $\alpha = 0,4$, а $\beta = 0,6$ при $F > 1,0$ см³/хв.

Для підтвердження правильності розробленої методики і аналізу впливу технологічних режимів на рівномірність, мікроструктуру і електромеханічні параметри піролітичних шарів, в залежності від форми і геометричних розмірів підкладок комплексної конфігурації, проведені відповідні експерименти. Металічні плівки формувались на внутрішній поверхні шкляних циліндричних вузлів ϕ 13, 18, 26 (мм) і довжиною 75..120 мм. Аналіз отриманих залежностей швидкості росту вздовж осі підкладок підтверджує, що при низьких швидкостях розходу і низьких початкових концентраціях МОС, є значна нерівномірність плівок викликана обмеженнями масопереносу і виснаженням концентрації лімітуючого реагента, а не змінами в кінетиці реакції.

Якщо технологічні режими ПФХО вибирались згідно розробленої методики, осьова нерівномірність плівок не перевищувала 6..8%.

Осадження рівномірних по товщині піролітичних шарів на внутрішніх осесиметричних поверхнях можна отримати при таких технологічних параметрах, при яких концентрація МОС вздовж поверхні росту не падає нижче рівня, що відповідає нульовому порядку хімічної реакції. При використанні методики однорідного росту така умова забезпечується на всій довжині осесиметричних підкладок.

При аналізі мікроструктури сформованих металічних плівок виявлено наявність домішок атомів вуглецю і кисню, зв'язаних переважно у вигляді карбідів і оксидів. З'ясовано, що основна причина отримання забруднених шарів - існування паралельних конкуруючих хімічних процесів, що визначаються технологічними параметрами. Для процесів осадження, які проводились в режимах згідно запропонованої методики, кількість домішок була мінімальною, а їх розподіл по поверхні росту - рівномірний. Для подальшого зменшення кількості домішок рекомендується проводити піролітичне осадження в суміші відновлювальних газів, напр. H_2 , із МОС, що не містять атомів кисню.

Аналіз електромеханічних параметрів піролітичних металічних шарів показав, що вони сильно корелюють з структурою плівок і складом домішок. Окисно-карбідні вклучення локалізуються на границях зерен і значно погіршують електропровідність шарів, зменшують, а іноді і змінюють знак ТКО, підвищують адгезію плівок до підкладки й приводять до виникнення й значного росту стискувальних внутрішніх механічних напруг. Розглянуто можливість застосування існуючих моделей електричних параметрів плівок для таких піролітичних шарів, і встановлені межі їх застосування в залежності від кількості вклучених домішок. Експериментально встановлено, що змінюючи технологічні режими ПФХО можна формувати плівкові шари різної ступені чистоти, змінюючи при цьому характеристики плівок від провідникових (металічних) до резистивних (керметних), і навіть діелектричних (оксидних). Для розрахунку електричних параметрів таких шарів необхідно стримати дані про їх товщину, структуру і склад. Однак, досвід показує, що експериментальний аналіз цих параметрів обходиться дуже дорого, тому в наступному розділі розробляються математичні моделі, які б дозволяли розраховувати потрібні параметри ще на етапі проєктування плівкових вузлів РЕЗ засобами САПР.

В третьому розділі запропонована структурна схема фізико-математичного моделювання плівкових вузлів РЕЗ, в основі якої лежить математична модель осадження. В зв'язку з сильною залежністю ха-

рактистик пгс від складу газсові фази в реакторах пониженого тиску, розв'язувати задачі моделювання потоку і тепломасопереносу необхідно в об'єднаній моделі ПФХО.

Узагальнена фізико-математична модель технологічного процесу ПФХО включає моделі потоку пгс, теплопереносу, масопереносу, хімічної кінетики, а також моделі реактора й підкладки. При формулюванні узагальненої математичної моделі використовувались наступні припущення і умови, що дозволяють спростити задачу осадження не вносячи суттєвої похибки в точність моделі: 1) умова нерозривності потоку; 2) квазістаціонарний режим осадження; 3) загальний тиск в реакторі - const; 4) потік в реакторі - змішаний ламінарно-молекулярний; 5) реакції в зоні змішування реагентів - відсутні.

Модель газодинаміки потоку реагентів в загальному випадку описується рівняннями Наве-Стокса для реагуючої суміші газів. Однак завдяки зробленим спрощенням, при наскрізних отворах в підкладках і відсутності в камері реактора різних перешкод - $V_r = 0$, процедуру розв'язування системи рівнянь збереження імпульсу можна опустити. Тоді зміна складової V_x , що відбувається із-за зміни кількості молей пгс в результаті хімічних реакцій, ефективно трактується за допомогою коефіцієнта χ_j - степені перетворення початкового реагента :

$$V_x = V_0 \cdot \left(1 + \sum x_{j,0} \chi_j \right)^{T/T_0}, \quad (3)$$

де V_0 - початкова швидкість потоку; $x_{j,0}$ - початкова концентрація МОС, що термічно дисоціює; T, T_0 - початкова і поточна температури пгс. Степінь перетворення j-го реагента визначається з виразу : $\chi_j = 1 - Qz_{j,0}/Qz_j$, де $Qz_{j,0}, Qz_j$ - початковий і поточний об'ємний потік пгс.

Модель теплопереносу в процесах ПФХО описує передачу теплової енергії в системі "нагрівач - потік пгс - підкладка". З врахуванням прийнятих на початку спрощень, цей процес описується :

$$\rho_g c_p \cdot \left[Vz \frac{\partial T}{\partial z} \right] = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \lambda_g \frac{\partial T}{\partial r} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[\lambda_g \frac{\partial T}{\partial z} \right], \quad (4)$$

де ρ_g, c_p, λ_g - відповідно густина, питома теплоємність і коефіцієнт теплопровідності пгс; T - температура. Особливістю реакторів пониженого тиску є зміщення ваги механізму теплопередачі в бік випромінювання. Тому, гранична умова для внутрішньої поверхні осесиметричної підкладки записується за допомогою зонального методу, з врахуванням випромінювального теплообміну із N сірих елементів :

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R_n} = \frac{1}{2\lambda_g} \cdot \sigma \cdot a_n \sum a_i \Phi_{ni} \cdot (T_i^* - T_n^*), \quad (5)$$

де σ - константа Стефана-Больцмана; a_n, a_i - поглинаюча здат-

ність, відповідно, елемента поверхні підкладки і довільного і-го елемента реактора; Φ_{ni} - кутовий коефіцієнт випромінювання і-го елемента по відношенні до елемента підкладки. Величина температури, що визначається при розв'язку рівняння теплопереносу при $r = R_n$ являє собою температурний профіль поверхні підкладки складної форми.

Модель масопереносу для реакуючої суміші із N газів записується у вигляді системи взаємозв'язаних $(N-1)$ рівнянь збереження маси, які використовують моделі кінетики газозв'язаних та поверхневих хімічних реакцій:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{\partial}{\partial r} (r \cdot Q_{Tj}) + \frac{\partial}{\partial z} (Q_{Zj}) = \sum_{k=1}^{Nj} \alpha_{kj} \cdot \mathcal{R}_{kj}, \quad j = \overline{1, N-1} \quad (6)$$

де Q_{Tj} , Q_{Zj} - відповідно радіальна і осьова складові молярного потоку, і однієї умови рівності одиниці молярних концентрацій складових пгс: $\sum x_j = 1$, $j = \overline{1, N}$. Права частина виразу (6) відображає вироблення або споживання j -ї компоненти пгс в n_j незалежних газозв'язаних реакціях з швидкістю \mathcal{R}_{kj} . Звичайно, молярний потік включає конвективну складову, яка визначається з швидкості потоку, дифузійну складову, яка визначається через співвідношення Стефана-Максвелла для багатоконпонентної дифузії, або через закон дифузії Фіка, для біварної суміші, та термодифузійну складову, де коефіцієнти термодифузії визначались через звичайні коефіцієнти дифузії і термодифузійний коефіцієнт. Межевими умовами на поверхні підкладок являлись швидкості гетерогенних реакцій.

Для забезпечення високої точності розв'язку задачі осадження на поверхнях складної форми використовувався метод скінчених елементів Гальоркіна. Пробні рішення (апроксимація) для невідомих функцій концентрацій і температури на елементі записуються у вигляді полінома з допомогою базисних функцій:

$$X_j^* \approx X_{ja} + \sum_{m=1}^M X_{mj} N_{mj} \quad , \quad T^* \approx T_a + \sum_{m=1}^M T_m N_{m, j+1} \quad (7)$$

де кожному вузлу m скінченного елемента відповідає кусково-лінійна базисна функція N_m ; T_m , X_{mj} - вузлові значення невідомих функцій температури і концентрацій, відповідно.

Далі визначаються невязки, що утворилися в результаті дискретної апроксимації неперервних функцій на розрахунковій області Ω і межі Γ . Згідно методу зважених невязок, сума інтегралів добутків відповідних невязок на вагові функції по Ω і по Γ , які в методі Гальоркіна рівні базовим, формується система інтегродиференціальних рівнянь. Дана система розв'язувалась для двовимірної області, використовуючи трикутні скінчені елементи з локальною си-

стемов координат площин. Це дає змогу виконати пряме диференціювання та інтегрування необхідних виразів і отримати загальну систему алгебраїчних рівнянь виду :

$$\begin{bmatrix} KV + KC & KT \\ 0 & TP \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} X \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F \\ Q \end{bmatrix}, \quad (8)$$

де KV , KC , KT - матриці відповідно конвективної, дифузійної і термодифузійної складових молярного потоку; TP - матриця теплопровідності; F , Q - масиви нагрузок, що описують швидкості хімічних реакцій і потік теплового випромінювання. В результаті розв'язку даної системи отримуються профілі розподілу температури і концентрацій компонентів пгс в області підкладок складної форми.

Для розрахунку швидкості росту плівкових шарів, в залежності від протікаючих хімічних реакцій, використовується феноменологічна модель, яка враховує процеси осадження як в кінетичному (R_{kin}), так і в дифузійному (R_{diff}) режимах :

$$\frac{I}{GR_{eff}} = \frac{I}{R_{kin}} + \frac{I}{R_{diff}}. \quad (9)$$

Кінетичну складову визначають за допомогою кінетичної і термодинамічної моделей гетерогенних реакцій, а дифузійну - як потік маси, викликаний градієнтом концентрацій в i -й комірці скінченно-елементної сітки від поверхності підкладки.

Ядро плівка формується в результаті осадження декількох компонентів (нехай і домішкових), що описуються кінетичною моделлю, можна визначити її склад :

$$X_k = J_k / \sum J_j, \quad (10)$$

де X_k - доля компоненти k в твердофазному осаді; J_k - сумарний масовий або реакційний потік k -ї компоненти на поверхні росту; J_j - сумарні потоки j -х компонент. Оскільки розрахунок потоків в методі скінчених елементів проводиться на кожному елементі скінченно-елементної сітки, прилеглому до поверхні росту, можна отримати профіль розподілу компонентів твердофазного осаду по підкладці довільної форми.

В четвертому розділі висвітлені питання розробки інструментальних засобів моделювання і виробництва плівкових вузлів РЕЗ на підкладках складної форми по технології ПДХО, а саме: програмно-методичного комплексу моделювання і технологічного модуля піrolітичного осадження теплоплівкових елементів при пониженому тиску.

В основу розробленого ПМК покладено модульно-ієрархічний принцип організації, що дозволяє достатньо просто нарощувати функціональні можливості окремих модулів. Програмний комплекс реалізовано в двох версіях, що дозволяє використовувати його в складі

технологічної САПР РЕЗ і в автономному режимі.

Моніторно-діалогова система ПКМ включає: -диспетчер команд; -Інтерпретатор діалогу; -підсистему запуску дочірніх процесів, -підсистему віртуального доступу до диску, і реалізує взаємодію між користувачем з одного боку й компонентами системи, з другого. Модулі даної системи розроблялись на базі стандартних об'єктів Turbo-Vision фірми Borland. Препроцесор ПКМ включає: -проблемно-орієнтований редактор, що здійснює формування вхідних даних; -транслятор, що здійснює контроль, лексичний та синтаксичний аналізи вхідних даних; -графічний редактор, що здійснює скінчено-елементну дискретизацію робочої області реактора; та -модуль візуалізації, що включає зображення температурно- і газо-часових режимів, та зображення скінчено-елементної сітки. Процесор ПКМ включає: -модуль технологічної операції ПФХО, котрий здійснює розрахунок температурного та концентраційних полів в області підкладок складної форми; -модуль мікроструктури шарів, котрий здійснює розрахунок товщини плівок і їх нерівномірності по поверхні підкладок, а також розміру кристалітів, складу і кількості домішкових фаз; -модуль електричних характеристик, що дозволяє розраховувати ρ_c і ТКО плівок; -модуль регресійного аналізу, котрий дозволяє розробляти регресійні моделі і використовувати їх для розрахунку довільних ізаметрів технологічного процесу чи тонкоплівкової структури; -модуль оперативної візуалізації процесу (проміжних результатів) моделювання. Постпроцесор включає модулі обробки та візуалізації кінцевих результатів моделювання, які дозволяють формувати та переглядати: -результати розрахунків в алфавітно-цифровому представленні; -графіки розподілу профілів та ізолінії температурного і концентраційних полів реактора; -графіки залежності швидкості росту і складу домішок по поверхні підкладок. Для раціонального використання оперативної пам'яті ЕОМ в ПКМ застосовується оперативна база даних, яка через інформаційний інтерфейс зв'язана з накопичувачами на зовнішніх носіях.

Етапи побудови ПКМ моделювання операції ПФХО включали розробку спеціалізованого програмного, інформаційного та лінгвістичного забезпечень. Розглянуті принципи побудови, структура і склад цих видів забезпечень в контексті розробки інструментальних засобів для застосування розроблених математичних моделей. В завершення приведені основні експлуатаційні характеристики ПКМ.

Розроблений програмний комплекс використовувався для проектування процесів осадження таких хромових плівок по технології

МОПХО для циліндричних дефлекторів є ІЗ, ІВ, 26 мм. В зв'язку із складністю (а часом і відсутністю) експериментальних методів in situ дослідження газозфазних хімічних процесів в реакторах пониженого тиску, особливо у випадку підкладок складної форми, моделювання дало змогу дослідити і наочно зобразити вплив конструктивно-технологічних факторів на розподіл температурного і концентраційних полів. При цьому, основна увага приділялась впливу форми і геометричних розмірів підкладки, а також типу МОС, складу реагентів, загального тиску і швидкості розходу пгс в реакторі. По результатах моделювання розподілу температури і концентрацій в області підкладок, проведено аналіз впливу окремих фізичних ефектів тепло-масопереносу, як наприклад термодифузії, на точність моделі при різних пгс і технологічних режимах. Встановлено, що врахування термодифузії в газозфазних процесах дисоціації важких молекул МОС підвищує точність моделювання на 10-15%.

Дані розподілу температурного і концентраційних полів реагентів в внутрішній області циліндричних підкладок використовувались як вхідні дані для розрахунку швидкості росту, нерівномірності і силею домішок по поверхні підкладок. Отримані результати добре узгоджуються з експериментальними, з чого зроблено висновок, що розроблені моделі адекватно описують основні фізико-хімічні процеси газозфазного осадження в умовах пониженого тиску. Аналіз результатів моделювання показав, що точність і надійність розрахунків в значній мірі залежать від точності кінетичних констант хімічної моделі.

Для практичної реалізації процесу осадження в змодельованих технологічних режимах проведена модернізація лабораторної установки, і розроблена структура і варіант компоновки гнучкого технологічного модуля, що дозволяє реалізувати концепцію автоматизованого виробництва. Технологічний модуль включає реакційну камеру, системи підігріву і газорозподілу, випаровувач МОС, вакуумну систему, систему контролю і управління, а також транспортний пристрій. Модуль осадження може функціонувати в ручному чи автоматичному режимах, або під контролем системи управління більш вищого рівня.

На завершення приведена методика розрахунку економічної ефективності використання технології піролітичного осадження, а також методика оптимізації матеріально-енергетичних затрат на формування плівкових структур методами ПХО.

В додатках приведені комплексні хімічні моделі піролізу МОС, моделі розрахунку основних параметрів пгс, кутові коефіцієнти для

розрахунку радіаційного теплообміну, математичне рішення рівнянь моделі ПУХО методом скінчених елементів та документи, що підтверджують практичне використання результатів дисертаційної роботи.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ

Сучасний рівень розвитку газофазних методів осадження, досвід використання хімічних процесів в мікроелектронній технології, а також прогрес в області синтезу й розкладу МОС, утворили об'єктивні передумови для використання даної технології в процесах формування функціональних плівкових елементів в вузлах РЕЗ складної форми. Однак засоби автоматизованого проектування технологічних процесів ПУХО розвинені недостатньо, особливо для підкладок складної геометричної форми. Це стримує використання методів газофазного хімічного осадження в технології виробництва плівкових вузлів РЕЗ.

При вирішенні комплексу задач, пов'язаних з розробкою методів і моделей газофазного хімічного осадження на поверхні складної форми отримані наступні результати.

1. На основі системного аналізу розроблена методика технологічного забезпечення одворідного росту плівкових шарів в вузлах РЕЗ складної форми, котра дозволяє оцінити режими осадження тонкоплівкових елементів по технології ПУХО з врахуванням характеристик реагентів, конструктивних особливостей реакційних камер і конструктивно-технологічних обмежень підкладок комплексної конфігурації.
2. Досліджено вплив технологічних режимів газофазного осадження на швидкість росту, мікроструктуру і електромеханічні характеристики піролітичних плівок хрому, молибдену і вольфраму, сформованих на внутрішніх циліндричних поверхнях в реакторах пониженого тиску. Досліджено вплив геометричних розмірів підкладок на осьову рівномірність плівок і технологічні умови досягнення максимальної продуктивності для карбонілів $\text{Cr}(\text{CO})_6$, $\text{Mo}(\text{CO})_6$ і хроморганичної рідини "Берхос". По запропонованій методиці, експериментально визначені критичні параметри технологічного процесу й для циліндричних підкладок адаптовані математичні моделі $R_{\text{max}} \cdot r$ і $R_{\text{кр}}$, що дозволило компенсувати осьове есіяження концентрації реагентів і мінімізувати нерівномірність плівкових шарів на внутрішній циліндричній поверхні.
3. На основі рівнянь збереження сформульована математична модель ПУХО плівкових шарів в реакторах пониженого тиску, котра враховує

конвективні, багатокомпонентні дифузійні і термодифузійні потоки, кінетичні особливості газофазних та поверхневих реакцій, характер кондуктивних і радіаційних теплових потоків для підкладок складної конфігурації. Розроблена модель реалізує частину комплексного підходу до автоматизованого проектування тонкоплівкових вузлів РЕЗ складної форми. Її переваги полягають в тому, що вона зображає і функціонально зв'язує, з одного боку, фізико-хімічні процеси і технологічні режими осадження в реакційній камері, а з другої - мікроструктурні і електричні характеристики сформованих плівкових елементів.

4. Сформульована алгоритмічна модель процесу тепломасопереносу реагентів на поверхнях складної геометричної форми, яка базується на методі Гальоркіна з скінченими елементами, що дозволяє користувачу вибрати розумний компроміс між точністю і необхідними обчислювальними ресурсами. Використання методу скінчених елементів, реалізованого на гнучких адаптивних сітках, дозволяє з необхідною точністю зв'язати локальні температурні, дифузійні і реакційні потоки, що формують мікроструктуру піролітичних шарів, у всіх точках підкладки складної форми.

5. На основі даних температурних і концентраційних полів в області підкладок складної форми і даних хімічної кінетики, розроблені і досліджені моделі швидкості росту і мікроструктурних параметрів плівкових шарів на підкладках складної форми як в дифузійному, так і в кінетичному режимах.

6. На основі математичних моделей розроблені структура і забезпечення програмно-методичного комплексу моделювання процесів газофазного хімічного осадження, котрий реалізує фізичний підхід до моделювання параметрів плівкових вузлів РЕЗ і може працювати як в рамках технологічної САПР, так і в автономному режимі. Переваги даного ПМК для користувача пов'язані з реалізацією ефективного інтерактивного інтерфейсу на ПЕОМ, гнучкого файлового і графічного представлення як вхідних даних, так і результатів моделювання.

7. Засобами ПМК спроектовано технологічний процес газофазного хімічного осадження хромових плівкових шарів з $\text{Cr}(\text{CO})_6$ і рідини "Бархос", та сформовані циліндричні дефлектори для передаєчих телевізійних камер типу відікон. Результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними, що свідчить про адекватність розробленої моделі ПМХС. Встановлено, що достовірність і надійність результатів моделювання в найбільшій мірі залежить від точності і надійності початкових термодинамічних і кінетичних моделей

процесу розкладу хімічних реагентів.

8. Розроблена структура гнучкого технологічного модуля, на основі якого модернізовано лабораторну установку осадження плівкових шарів на внутрішню поверхню шкляних циліндричних вузлів. Практичне використання спроектованого процесу виготовлення дефлекторів дозволило суттєво скоротити тривалість технологічного циклу, підвищити вихід придатних, степiнь автоматизації і гнучкість виробництва.

ПУБЛІКАЦІ ПО ТЕМІ ДИСЕРТАЦІЙНОЇ РОБОТИ

1. Лобур М.В., Гранат П.П., Матвійків О.М. Метод определения параметров технологического процесса производства ИС.// Теория и проектирование п/п и радиоэлектронных устройств. Вестник ЛПИ №236. -Львов: "Выше школа", 1989 г.

В даній публікації Матвійківу О.М. належить практичне розробка статистичних методів аналізу і математичний розв'язок задачі визначення параметрів технологічного процесу виготовлення ІС.

2. Василюшин Р.М., Матвійків О.М. Программа моделирования операций технологического процесса производства ИС.// Теория и проектирование п/п и радиоэлектронных устройств. Вестник ЛПИ №245. -Львов: Изд-во ЛГУ, 1990 г.

У вказаній роботі Матвійківу О.М. належить програмна реалізація пакету регресійного аналізу і аналіз функціонування програми на прикладі операції епітаксійного росту з газової фази.

3. Денъдобренко Б.Н., Матвійків О.М. Использование метода конечных элементов при моделировании электрофизических характеристик широтипических пленочных электродов дефлектрона.// Изв. С-Пб. ЭТИ: Сб. научн. трудов. Вып. №448. Элементы и устройства радиоэлектронных средств.- С-Петербург, 1992 г.-С.29-33.

В даній роботі Матвійківим О.М. : - запропоновано алгоритм моделювання параметрів плівкових дефлекторів, котрий зв'язує режими осадження шарів з функціональними параметрами вузлів РЕЗ ; - запропоновано спiсь розв'язку моделі ПХХО по методу скінчених елементів Гальоркіна, котрий дозволяє описати процеси росту плівкових шарів на підкладках складної форми.

4. Денъдобренко Б.Н., Матвійків О.М. Физико-математическая модель ПХХО тонких пленок на подложки сложной геометрической формы.// Опыт разработки и применения приборно-технологических САПР: Тез. докл. Всесоюзной школы-семинара (февраль 1991 г.), Львов: ЛПУ "Полярон", 1991 г.-С.89.

В даних тезах Матвійківим О.М. сформульовано фізико-математичну модель масопереносу і потоку реагуючої суміші газів в операціях ПХО тонких плівок.

Б. Дендобренко Б.Н., Матвійків О.М. Температурные особенности моделирования осаждения тонкопленочных слоев сложной формы из МОС.

// Опыт разработки и применения приборно-технологических САПР в микроэлектронике: Тез. докл. II Межреспубликанской НТК (февраль 1993 г.) Львов: ПО "Полярон", 1993 г.-С.28.

В даних тезах Матвійківу О.М. належить формулювання та програма реалізація моделі теплопереносу в вертикальних піролітичних реакторах пониженого тиску.

6. Матвійків О.М. Пакет програм моделювання процесів осадження плівкових полікристалічних МОПХО шарів. // Досвід розробки і застосування приладно-технологічних САПР в мікроелектроніці: Тези доповіді III Міжнародної НТК (липень 1995), Львів: ПО "Полярон", 1995 р.

Особистий вклад автора в отриманні наукових результатів полягає в тому, що положення, котрі складають суть дисертації були сформульовані і вирішені ним самостійно, а саме :

- 1) розроблена методика технологічного забезпечення однорідного росту плівкових шарів на підкладках складної форми по технології ПХО;
- 1) розроблена фізикоматематична модель ПХО в умовах пониженого тиску, котра включає моделі реактора, підкладки, потоку суміші, тепломасопереносу і хімічної кінетики ;
- 2) розв'язано систему рівнянь математичної моделі ПХО для підкладок складної форми методом скінчених елементів Гальоркіна ;
- 3) розроблено програмно-методичний комплекс моделювання технологічних процесів ПХО в реакторах пониженого тиску.

Отже, особистий вклад автора в частині матеріалу, покладеного в основу дисертації, є визначальним.

Annotation.

Matvijukiv O.M. The Elaboration of Models and Methods of Gas-Phase Deposition in Complex-Shape Units for Technological CAD. Master's dissertation on specialisation 05.13.15. - Computer-aided design systems. State University "Lvivska Politechnika", 1995.

The new scientific principles are defended as a results of the theoretical and experimental research of low pressure chemical vapour deposition (LPCVD) on complex-shape substrates. The methods & models of critical technological parameters, provided the uniform growth on the walls of cylindrical substrates, are investigated.

There was established that: 1) mathematical model for LPCVD provides the description of temperature and reactant concentration field profiles and connected technological parameters with microstructural and electrical characteristics of the films; 2) the employment of Galerkin FEM provides for a complex-shaped substrates the high-precision solution of CVD model equations and the determination of thin film parameters on the initial stages of REM design.

Анотація.

Матвійків О.М. Розробка моделей і методів газозфазного осадження в вузлах складної форми для технологічних САПР РЭС. Дисертація на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.05 - Системы автоматизированного проектирования. Львівський університет "Львівська політехніка", г. Львів, 1995г.

Захищаються наукові положення, сформульовані по результатах теоретичних і експериментальних досліджень процесу парозфазного хімічного осадження (ПФХО) при пониженому тиску на поверхні деталей складної геометричної форми. Розглянуті питання технологічного забезпечення однорідного росту і моделі критичних параметрів ПФХО проводячих шарів з МОС для циліндричних вузлів РЭС.

Установлено, що 1) розроблена обобщенная математическая модель ПФХО позволяет описать профили распределения температурного и концентрационных полей реагентов и связать технологические режимы осаднения с микроструктурой и электрическими параметрами тонких пленок; 2) применение МКЭ Галеркина позволяет с высокой точностью получить решение системы уравнений модели ПФХО и определить электрофизические параметры пленок на подложках сложной формы на ранних этапах проектирования пленочных РЭС.

Ключові слова: САПР, РЭС, модель, осадження, тонка плівка.

Підписано до друку 06.04.95. Формат паперу 60x84 1/16
Папір газетний. Друк офсетний. Безкоштовно.
Друкарських листів 1. Зам. 172. Тираж 100.

ПТЦ "Агрософт" м. Львів, вул. 700-річчя Львова, 63а

AB32.474
AB 32.474