

значение с измеряемого образца, то, с точки зрения оценки неопределенности, в ходе эксперимента нет необходимости как-то использовать это значение, если такое использование не предусмотрено МВИ (в частности, когда измеряемым объектом является эталон). Но многократные измерения эталона являются мощным средством оценки правильности  $\bar{y}_i(T_0)$  – с измерений, выполняемых лабораторией, т. е. величины, корректирующей все измеренные значения. Описанный эксперимент является не только адекватным средством априорной оценки неопределенности, но и наиболее эффективным способом априорной оценки правильности измерений. Напомним, что в соответствии с [2] правильность — это статистическое понятие, оценка которого основывается на выполнении большой серии измерений.

Изложенные выше исходные положения могут быть использованы для подготовки проекта Положения по оценке и выражению неопределенности измерений на уровне пред-

приятия.

#### Л и т е р а т у р а

1. **Голубев Э. А.** Мотивы и направления пересмотра Руководства по выражению неопределенности измерения. Ч. 1. Недостатки Руководства и Дополнения 1 // Измерительная техника. 2012. № 11. С. 10—14.

2. **ГОСТ Р ИСО 5725—002.** Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Ч. 1—6.

3. **Guide** to the expression of uncertainty in measurement. ISO, 1993. Руководство по выражению неопределенности измерения / Пер. с англ. СПб.: ВНИИМ им. Д. И. Менделеева, 1999.

4. **Голубев Э. А., Исаев Л. К., Чирков А. П.** Об оценке качества поверки средств измерений // Измерительная техника. 2006. № 8. С. 18—22; **Golubev E. A., Isaev L. K., Chirkov A. P.** Estimating the quality of verification of measurement instruments // Measurements Techniques. 2008. V. 49. N 8. P. 762—768.

Дата принятия 11.09.2012 г.

## МЕХАНИЧЕСКИЕ ИЗМЕРЕНИЯ

531.7.08:519.245:538.911:538.975

### Моделирование и оценка параметров морфологии поверхностей тонких пленок нано- и микроэлектромеханических систем

**В. А. ВАСИЛЬЕВ, П. С. ЧЕРНОВ**

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия, e-mail: opto@bk.ru

*Рассмотрены тонкопленочные нано- и микроэлектромеханические системы датчиков давления, экспериментальные и теоретические методы изучения и результаты оценки параметров морфологии поверхностей пленок. Разработаны модель и алгоритм роста тонких пленок, учитывающие диффузию частиц.*

**Ключевые слова:** нано- и микроэлектромеханические системы, датчики, тонкие пленки, морфология поверхности.

*The thin film nano- and microelectromechanical systems of pressure sensors, experimental and theoretical methods of study and estimation results of films surfaces morphology are considered. The model and algorithm of thin films growth with taking into account the particles diffusion is developed.*

**Key words:** nano- and microelectromechanical systems, sensors, thin films, surface morphology.

При создании тонкопленочных нано- и микроэлектромеханических систем (НиМЭМС) датчиков давления [1] существует проблема получения тонких пленок материалов с заданными характеристиками. Известно, что поверхностные эффекты оказывают значительное влияние на свойства тонких пленок. Изучение поверхности пленок и оценка параметров их морфологии открывает путь к управляемому синтезу тонкопленочных структур, повышению качественных и эксплуатационных характеристик датчиков давления на основе НиМЭМС.

Анализ известных технических решений датчиков давления с тонкопленочными тензорезисторными системами показал, что наиболее общими элементами являются слои — диэлектрический 1, тензорезистивный (хром—никель) 2, адгезионный 3, контактный (проводящий) 4 (рис. 1). Они последовательно наращиваются на упругом элементе (чаще всего в виде металлической мембраны) методами термического испарения в вакууме или магнетронного напыления.

Рост поверхностей перечисленных тонкопленочных элементов обычно исследуют экспериментально методами ска-

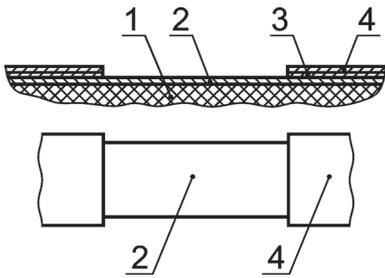


Рис. 1. Элементы тонкопленочной тензорезисторной системы, содержащей слой:

1 — диэлектрический; 2 — тензорезисторный; 3 — адгезионный; 4 — контактный

Одним из первых моделей, получивших широкое распространение, — модели роста поверхности, основанные на стохастических дифференциальных уравнениях [6, 7]. В связи со сложностью решения этих уравнений при исследовании роста поверхности получили распро-

стирующей зондовой и электронной микроскопии. Теоретически процесс роста поверхности тонких пленок изучается, в основном, тремя путями: аналитическим решением дифференциальных уравнений, описывающих процесс роста, численным решением этих уравнений и компьютерным моделированием дискретных моделей [2 — 5].

Одним из первых моделей, получивших широкое распространение, — модели роста поверхности, основанные на стохастических дифференциальных уравнениях [6, 7]. В связи со сложностью решения этих уравнений при исследовании роста поверхности получили распро-

странение модели, представляющие собой клеточный автомат [8 — 10]. Большинство таких моделей имеет простые детерминированные правила осаждения частиц и их диффузии по поверхности. Наиболее изучена модель случайного осаждения.

В отличие от моделей, представляющих собой детерминированный клеточный автомат, разработана модель стохастического (вероятностного) клеточного автомата. Состояние детерминированных клеточных автоматов в следующий момент времени однозначно зависит от состояния в предыдущий момент времени, тогда как для стохастического клеточного автомата оно определяется на основе надлежащим образом вычисляемых вероятностей. Предлагаемая модель роста поверхностей тонких пленок заключается в следующем:

поверхность представляется прямоугольной сеткой из  $L^2$  точек, где  $L$  — линейный размер поверхности;

на границы сетки накладываются периодические граничные условия;

новые частицы считаются идентичными и места их осаждения выбираются случайно, а скорость  $F$  осаждения определяется количеством частиц, попавших на поверхность за один шаг моделирования (шаг Монте-Карло), и измеряется в единицах [монослой / шаг Монте-Карло (МК/МК)];

для каждой из точек поверхности  $[i, j]$ , в которую попадает новая частица, и ее ближайших соседних точек  $[i \pm 1, j \pm 1]$  вычисляются вероятности  $p_{ij}$  диффузии частицы;

для каждой из вновь попавших на поверхность частиц генерируется случайное число, диффузия частицы осуществляется в соответствии с вычисленными вероятностями  $p_{ij}$ ;

после диффузии попавших на поверхность частиц происходит переход к следующему шагу Монте-Карло (осаждение новых частиц и повторение описанных действий).

Вероятность диффузии частицы в соседнюю точку  $[i, j]$  определяется по формуле

$$p_{ij} = \text{rexp} [\alpha \Gamma_{ij}(h) / (kT)], \quad (1)$$

где  $\rho$  — нормирующий коэффициент, обеспечивающий равенство единице суммы вероятностей;  $\alpha$  — коэффициент, зависящий от осаждаемого материала;  $\Gamma_{ij}(h)$  — коэффициенты, зависящие от толщины поверхности  $h$  в точке  $[i, j]$  и ближайших к ней точек;  $k$  — постоянная Больцмана;  $T$  — температура.

Коэффициенты  $\Gamma_{ij}(h)$  включают в себя два члена:

$$\Gamma_{ij}(h) = \Gamma_{ij}^1 + \Gamma_{ij}^2,$$

где

$$\Gamma_{ij}^1 = h_{i+1,j} + h_{i-1,j} + h_{i,j+1} + h_{i,j-1} - 4h_{i,j};$$

$$\Gamma_{i,j}^2 = \lambda \left[ (h_{i+1,j} - h_{i-1,j})^2 + (h_{i,j+1} - h_{i,j-1})^2 \right] / 2.$$

Первое слагаемое соответствует конечно-разностному выражению, аппроксимирующему лапласиан  $\nabla^2 h$ , его физическим смыслом является сила поверхностного натяжения, обеспечивающая сглаживание поверхности; второе слагаемое является конечно-разностной аппроксимацией квадрата градиента  $(\lambda/2) (\nabla h)^2$ , где  $\lambda$  — коэффициент, зависящий от

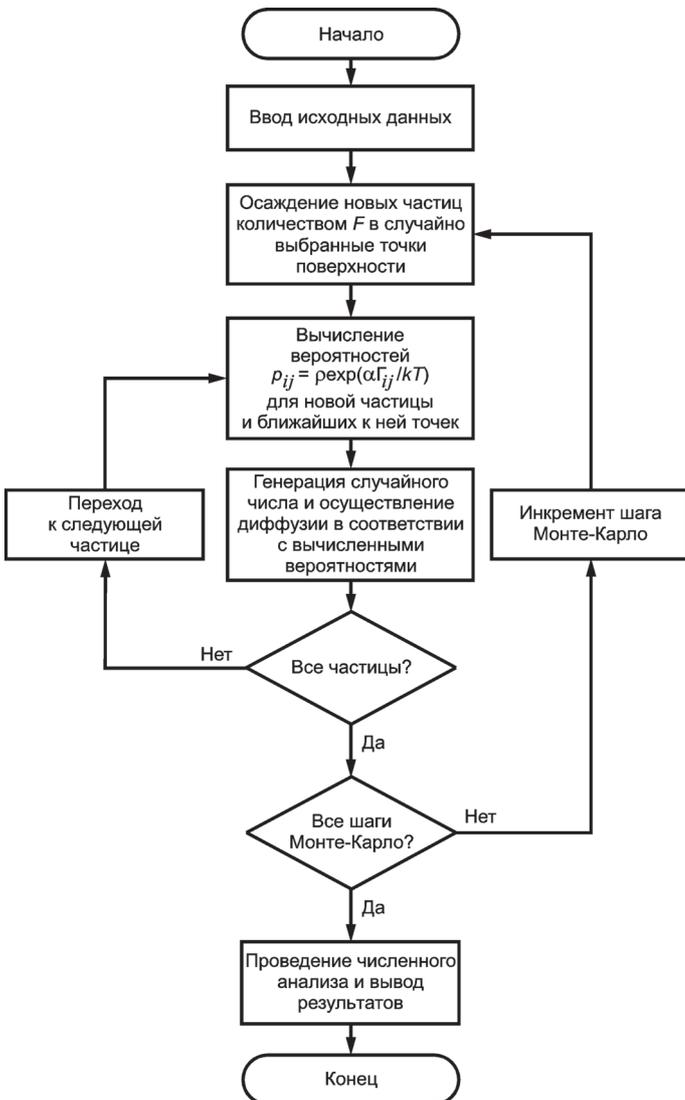


Рис. 2. Алгоритм моделирования роста тонких пленок

осаждаемого материала, вносит нелинейность в модель, степень которой характеризуется коэффициентом  $\lambda$ .

Предложенная модель роста поверхности представляет собой стохастический клеточный автомат, поскольку правила перехода в следующее состояние не детерминированы, а имеют вероятностный характер. Морфология поверхности в следующий момент времени зависит от ее состояния в данный момент времени и, кроме того, от выбираемых случайным образом мест осаждения новых частиц и вычисленных вероятностей диффузии частиц.

Для компьютерного моделирования процесса роста поверхностей тонких пленок и последующего анализа были разработаны алгоритм (рис. 2) и программа моделирования роста пленок.

Основным количественным параметром морфологии пленок, характеризующим неоднородность поверхности, является шероховатость  $W$ , определяемая как отклонение толщины пленки  $h$  от среднего значения  $\bar{h}$  [11]:

$$W = \left[ \frac{1}{L^d} \sum_i (h_i - \bar{h})^2 \right]^{1/2},$$

где  $d$  — размерность моделируемой поверхности;  $h_i$  — толщина пленки в  $i$ -й точке;  $\bar{h}$  — пространственная средняя толщина поверхности,  $\bar{h} = \frac{1}{L^d} \sum_i h_i$ .

Шероховатость поверхностей, получаемых в рамках модели случайного осаждения, пропорциональна  $\sqrt{t}$ , где  $t$  — время осаждения [11]. В логарифмическом масштабе эта зависимость имеет вид прямой (линия 2 на рис. 3). Шероховатость поверхностей, получаемых согласно предложенной модели (линия 1), в отличие от модели случайного осаждения не растет безгранично (что соответствует действительности), а стремится к определенному значению — шероховатости насыщения.

Для анализа поверхностей, получаемых при моделировании процесса роста, целесообразно использовать аппарат фурье-анализа, а для дискретных моделей удобен алгоритм быстрого преобразования Фурье. Преобразование Фурье поверхности можно описать амплитудно-частотной характеристикой, усредненной по всем направлениям. В случае метода случайного осаждения частиц поверхность можно представить шумом со всеми частотами, о чем свидетельствует близкий к нулю угол наклона прямой среднего квадратического отклонения (СКО). Прямая СКО фурье-преобразования поверхности, полученной согласно предложенной модели, имеет отличный от нуля угол наклона, что свидетельствует о более сложной структуре поверхности.

Поверхность тонкой пленки — пример случайного фрактала, поэтому важной ее характеристикой является фрактальная размерность. Наклон  $s$  прямой, аппроксимирующей усредненное по направлениям фурье-преобразование поверхности в

логарифмическом масштабе, связан с фрактальной размерностью  $d$  структуры [12]:

$$d = 2 - s,$$

причем размерность  $d$  можно также получить, вычислив наклон прямой по каждому направлению и затем усреднив по всем направлениям.

Зависимости характеристик поверхности различных материалов от режимов их получения исследованы в [13, 14]. В [13] приведены изображения, полученные методом атомно-силовой микроскопии (АСМ), поверхностей пленок алюминия, легированного оксидом цинка, осажденных при различных температурах подложки, из которых следует, что шероховатость поверхности возрастает при увеличении температуры. Зная форму зависимости шероховатости поверхности от температуры и времени осаждения, можно создавать поверхности тонких пленок с заданной морфологией. Так, если пленка предназначена для формирования пленочных резисторов, то крупнозернистая структура с большей шероховатостью будет предпочтительнее, поскольку она стабильнее при колебаниях температуры в процессе эксплуатации данных резисторов. Мелкозернистая структура при повышенных температурах эксплуатации резисторов подвержена влиянию процессов рекристаллизации, приводящих к изменению электрофизических свойств пленки. В других случаях предпочтительнее может оказаться малая шероховатость.

На рис. 4 показаны зависимости шероховатости поверхности от количества шагов Монте-Карло для различных относительных температур  $T$ . При увеличении температуры шероховатость  $W$  поверхности увеличивается. С физической точки зрения это можно объяснить уменьшением влияния силы поверхностного натяжения, имеющей тенденцию к сглаживанию поверхности из-за увеличивающихся температурных флуктуаций, повышающих энтропию системы. Согласно предложенной модели при увеличении температуры  $T$  показатель экспоненты в (1) стремится к нулю, а вероятности  $p_{ij}$  оказываются равными друг другу. Увеличение температуры приводит к приближению предложенной модели к модели случайного осаждения и соответственно к увеличению шероховатости. При больших температурах  $T$  поступающие на поверхность частицы диффундируют равномерно в любом направлении, что с учетом случайного выбора мест осаждения частиц эквивалентно отсутствию диффузии.

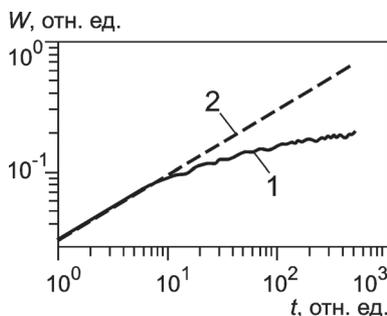


Рис. 3. Зависимость шероховатости  $W$  поверхности от времени  $t$  осаждения ( $L = 50, F = 0,1$  МС/МК), протекающего по предложенной модели (1), и случайного (2)

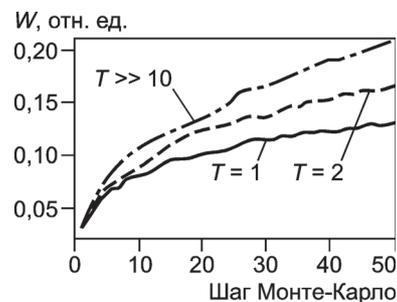


Рис. 4. Зависимость  $W$  шероховатости поверхности от количества шагов Монте-Карло для различных относительных температур  $T$

Следует отметить, что при высоких температурах диффузионная длина велика (в предложенной модели принимается равной одному межатомному расстоянию) и возрастает вероятность процесса десорбции. При таких условиях в отсутствие примесей и сверхвысоком вакууме возможен послойный рост поверхности (например, в процессе молекулярно-лучевой эпитаксии). В таком случае шероховатость не превышает толщины нескольких монослоев. Наоборот, при очень низких температурах диффузионная длина очень мала — меньше межатомного расстояния, рост поверхности определяется только осаждением атомов, так как поверхностная диффузия и десорбция чрезвычайно малы. Такой ситуации наиболее соответствует модель случайного осаждения, и шероховатость поверхности в таком случае растет как  $\sqrt{t}$ .

Применение предложенной модели не ограничивается случаем осаждения на идеальную гладкую поверхность. Если осаждение пленки происходит на подложку или предыдущий слой, шероховатость которого выше шероховатости насыщения при данной температуре подложки, то происходит постепенное сглаживание поверхности. Такой процесс моделировали при различных температурах. Увеличение скорости осаждения, напротив, имеет тенденцию к уменьшению шероховатости.

Чтобы сопоставить результаты математического моделирования роста поверхности тонких пленок с экспериментальными данными, полученными методом АСМ, исследовали образцы тонких пленок хрома и никеля, изготовленные при различных температурах подложки, скоростях и времени осаждения методом магнетронного напыления. Наблюдали уменьшение шероховатости поверхности при увеличении силы тока разряда магнетрона, являющегося мерой скорости осаждения.

Определяли фрактальную размерность по направлениям и среднюю фрактальную размерность участка поверхности образца хрома, полученные при помощи программы обработки АСМ-изображений SPIP. Средняя фрактальная размерность поверхности по экспериментальным данным была равна 2,37, а по результатам численного моделирования осаждения хрома в соответствии с предложенной моделью, составила 2,35, что свидетельствует о близости экспериментальных и теоретических данных.

Как показали исследования, разработанная модель роста поверхности тонких пленок позволяет изучать влияние температуры подложки, скорости и времени осаждения. Изображения поверхностей, полученных численным моделированием и методом АСМ, имеют достаточное сходство. Предложенную модель можно использовать для моделирования процесса осаждения (роста) и оценки параметров морфологии поверхностей тонких пленок НиМЭМС.

Л и т е р а т у р а

1. **Белозубов Е. М., Васильев В. А., Громков Н. В.** Тонкопленочные нано- и микроэлектромеханические системы — основа современных и перспективных датчиков давления для ракетной и авиационной техники // Измерительная техника. 2009. № 7. С. 35—38; **Belozubov E. M., Vasil'ev V. A., Gromkov N. V.** Thin-film nano- and micro-electromechanical systems — the basis of contemporary and future pressure sensors for rocket and aviation engineering // Measurement Techniques. 2009. V. 52. N 7. P. 739—744.
2. **Venables J.** Introduction to Surface and Thin Film Processes. Cambridge: Univ. Press, 2000.
3. **Oura K. e. a.** Surface Science: An Introduction. N.Y.: Springer, 2010.
4. **Hans B., Krause D.** Thin Films on Glass. N. Y.: Springer, 2010.
5. **Mahan J. E.** Physical Vapor Deposition of Thin Films. N. Y.: Wiley-Interscience, 2000.
6. **Wilkinson S. F., Edwards D. R.** The surface statistics of a granular aggregate // Proc. Roy. Soc. 1982. V. 17. P. 17—31.
7. **Kardar M., Parisi G., Zhang Y.-C.** Dynamic scaling of growing interfaces // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 889—892.
8. **Vicsek M., Vicsek T.** Fractal growth models // ERCIM News. 1997. N 29. P. 36—39.
9. **Mattos T. G., Moreira J. G., Atman A. P. F.** A discrete method to study stochastic growth equations: a cellular automata perspective // J. Phys. A: Math. Theor. 2007. V. 40. 13245.
10. **Bhattacharyya P.** Growth of surfaces generated by probabilistic cellular automation // Int. J. Modern Phys. C. 1999. N 1. P. 165—181.
11. **Barabasi A. L., Stanley H. E.** Fractal concepts in surface growth. Cambridge: Univ. Press, 1995.
12. **Russ J. C.** The image processing handbook. Boca Raton (USA): CRC Press, 2011.
13. **Jeung Hun Park, Chae-Ryung Cho.** Deposition-temperature effects on AZO thin films prepared by RF magnetron sputtering and their physical properties // Korean Phys. Soc. 2006. V. 49. P. 584—588.
14. **Dikovska A. Og. e. a.** Thin ZnO films produced by pulsed laser deposition // J. Optoelectronics and Advanced Materials. 2005. V. 7. N 3. P. 1329—1334.

Дата принятия 01.03.2012 г.

