

Краткие сообщения

УДК 620.193

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ЭЛЕКТРООСАЖДЕНИЯ

С.Б. Коньгин¹, А.Н. Агафонов², А.С. Афанасьева²

¹ Самарский государственный технический университет
Россия, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

² Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва
Россия, 443086, г. Самара, Московское шоссе, 34

Рассмотрены вопросы моделирования процесса электроосаждения методом вероятностного клеточного автомата. Проведено моделирование процесса осаждения на неметаллическую подложку с предварительным напылением металлической пленки. При моделировании использован одномерный вариант клеточного автомата, учитывающий процессы растворения, осаждения и диффузии в электролите. Отличительной особенностью предложенной модели является то, что на вероятность реализации элементарных процессов оказывает влияние электрическое поле. В результате моделирования получены зависимости количества осажденных ионов металла от времени при различных значениях напряжения. Показано наличие минимальной толщины напыленной пленки, ниже которой процесс электроосаждения не происходит.

Ключевые слова: вероятностный клеточный автомат, электроосаждение, моделирование.

Одним из технологических процессов создания микроэлектронных устройств является электроосаждение [1]. Оно используется для получения многослойных печатных масок, осаждения золота на контакты, осаждения меди в качестве проводящих слоев и т. д. Одним из вариантов процесса является осаждение на неметаллическую подложку с предварительно напыленным слоем металла.

Настоящая статья посвящена результатам моделирования указанного процесса с помощью метода вероятностного клеточного автомата (ВКА) [2–5]. Методика моделирования физико-химических процессов на атомно-молекулярном уровне была ранее изложена в работах [3–5]. В рамках построения модели процесса электроосаждения учитывались следующие элементарные процессы, в которых участвовали ионы металла: растворение, осаждение иона из раствора на поверхность металла и диффузия ионов в растворе.

Сергей Борисович Коньгин (д.т.н., доц.), заведующий кафедрой «Машины и оборудование нефтегазовых и химических производств».

Андрей Николаевич Агафонов (к.т.н.), доцент кафедры «Наноинженерия».

Анастасия Сергеевна Афанасьева, магистрант группы 5125 М407.

При моделировании был использован одномерный ВКА, за ячейку которого принимается слой электролита – срез атомарной толщины δ , расположенный параллельно поверхности. Кроме того, первая ячейка ВКА имитирует слой металла, напыленный на эту поверхность. Состояние каждой ячейки характеризуется количеством ионов n . Начальное число ионов, напыленных на подложку, равно n_0 .

Отличительной особенностью вычисления вероятностей реализации процессов за шаг моделирования являлось то, что их вероятности w зависели от локального значения напряженности электрического поля E :

$$w = \exp\left(-\frac{W_a \pm \frac{qE\delta}{2}}{kT}\right), \quad (1)$$

где W_a – энергия активации процесса при отсутствии электрического поля;
 q – заряд иона;
 δ – размер ячеек ВКА;
 k – постоянная Больцмана;
 T – абсолютная температура.

Знак "+" в выражении (1) соответствует элементарному процессу, направленному против электрического поля. При вычислении вероятностей процессов по формуле (1) учитывалось как внешнее электрическое поле, так и его локальные изменения в области двойного электрического слоя.

На рис. 1–3 представлены изменения количества осажденных на подложку ионов с течением времени при различных значениях напряжения U .

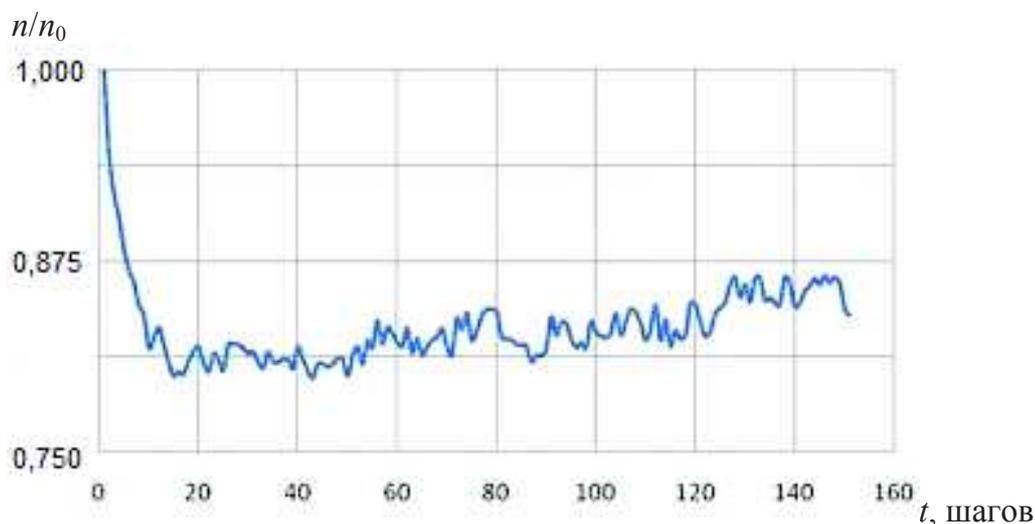


Рис. 1. Изменение числа ионов на подложке с течением времени ($U = 0,5$ В)

На рис. 1 видна конкуренция между процессами растворения и осаждения металла. Сначала активнее идет процесс растворения, но затем, после образования двойного электрического слоя, начинает преобладать процесс осаждения.

При увеличении приложенного внешнего потенциала (при той же начальной толщине пленки) наблюдается увеличение скорости осаждения и уменьшение максимального стравливания пленки (см. рис. 2).

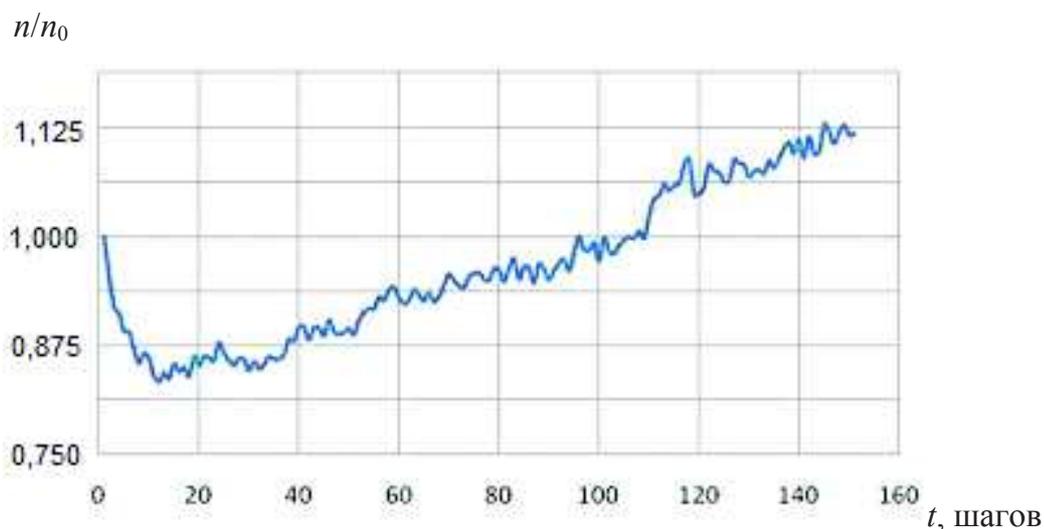


Рис. 2. Изменение числа ионов на подложке с течением времени ($U = 0,8 \text{ В}$)

Важным моментом, полученным при моделировании, является то, что при недостаточной начальной толщине напыленной пленки и приложенном напряжении происходит растворение пленки и процесс электроосаждения не идет (см. рис. 3).

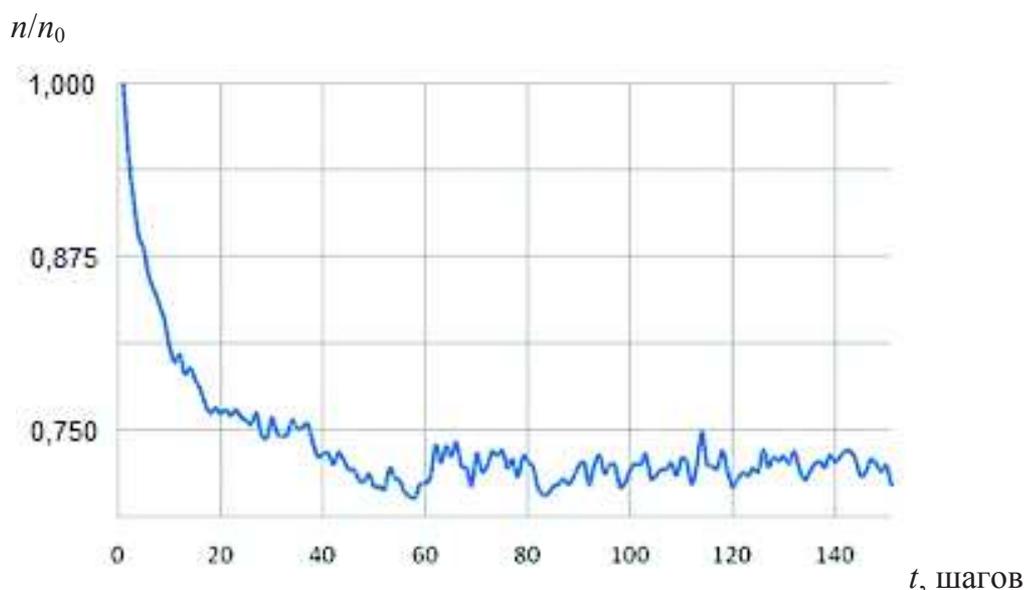


Рис. 3. Изменение числа ионов на подложке с течением времени ($U = 0,2 \text{ В}$)

Таким образом, при одной и той же начальной толщине пленки при достаточно высоком приложенном потенциале она не растворяется, и начинается процесс осаждения, в то время как при более низких потенциалах осаждение не идет. При одинаковом приложенном потенциале начальная толщина пленки влияет только на то, начнется ли процесс осаждения или пленка растворится полностью. Если толщина пленки достаточна для осаждения, ее варьирование не влияет на скорость осаждения и время образования двойного электрического слоя.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Электроосаждение металлических покрытий: Справочник / Беленький М.А., Иванов А.Ф. – М.: Металлургия, 1985. – 292 с.; ил.
2. Степанцов М.Е. Применение клеточных автоматов для математического моделирования динамических процессов / Автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук, спец 01.01.03. – М., 1998. – 18 с.
3. Агафонов А.Н., Волков А.В., Коныгин С.Б., Саноян А.Г. Разработка физических принципов и алгоритмов компьютерного моделирования базовых процессов формирования микроструктур методами вероятностного клеточного автомата // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Физико-математические науки, 2007. – № 1. – С. 99–107.
4. Коныгин С.Б. Методология анализа физико-химических процессов в промышленных технологиях / Автореф. дис. ... докт. техн. наук, спец. 05.13.01, Самара, 2012. – 44 с.
5. Коныгин С.Б. Эквивалентные схемы элементарных процессов для формализации механизмов протекания промышленных технологий // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Технические науки. – 2013. – № 1 (37). – С. 9–13.

Статья поступила в редакцию 25 сентября 2016 г.

USING PROBABILITY CELLULAR AUTOMATA FOR PLATING PROCESS MODELING

S.B. Konygin¹, A.N. Agafonov², A.S. Afanasyeva²

¹ Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya str., Samara, 443100, Russian Federation

² Samara University
34, Moskovskoye sh., Samara, 443086, Russian Federation

This paper describes a plating process modeling using probability cellular automatic device. The modeling plating process ran on non-metal substrate with a previously created metal film. In this research one-dimensional cellular automatic device was used. The processes of dissolution, plating and diffusion were taken into consideration. Probabilities of elementary processes were calculated with the influence of electrical field. The relationships between time and number of plated ions for different voltages were obtained. When thickness of the film is less than minimal value the plating process of electrical settling does not take place.

Keywords: *probability cellular automata, plating, modeling .*

*Sergey B. Konygin (Dr. Sci. (Techn.)), Head of Department.
Andrey N. Agafonov (Ph.D. (Techn.)), Associate Professor.
Anastasiya S. Afanasyeva, Student.*