

5. Впервые выделены дефекты структуры керамических подложек и спаев металлизации платы, связанные со сфероидной кристаллизацией стеклофазы. Выделенные в работе дефекты структуры представляют собой кольцевые области разрыва металлизации, расположенные на границе сфероидного образования и участков платы с незакристаллизованной стеклофазой. По результатам электронно-микроскопического и микрондового исследования структурных дефектов получено соотношение, позволяющее использовать результаты в системе межоперационного контроля изделий и заготовок металлокерамических плат при определении граничных значения натекания герметизирующих спаев как функции топологии спаев и условий технологической обработки изделий.

6. Разработана система причинно-следственных диаграмм в форме функционально-диагностических моделей дефектов металлокерамических плат и корпусов, вызванных снижением качества металлокерамических спаев и выражающихся в форме повышенной пористости материала, сколов металлизации, ее шелушений, вздутий и отслоений. На основе предложенной методики экспертной оценки модели выполнено поуровневое деление и ранжирование причинных факторов, обеспечивающее возможность активного контроля всей системы дефектов исследуемых изделий. По результатам поуровневого ранжирования выполнено сквозное ранжирование факторов дефектности. Адекватность результатов разработки и ранжирования модели подтверждены посредством коэффициентов Кендалла, Спирмена и коэффициентов ранговой корреляции.

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ИОННО-ЛУЧЕВОЙ ОБРАБОТКИ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛ-КРЕМНИЙ И ЕЕ ЭЛЕКТРОННОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ**

Н.А.Остапенко

Таганрогский государственный радиотехнический университет, г. Таганрог

Моделирование процесса ионно-лучевой обработки (ИЛО) структуры металл-кремний и изменения ее электронно-энергетического строения (ЭЭС) является важной и актуальной задачей твердотельной электроники. В процессе проведения исследований получены следующие результаты.

1. Разработана модель процесса ионно-лучевой обработки структуры хром – кремний ионами инертных газов, позволяющая рассчитывать концентрационные профили перемещающихся атомов.

2. Приведен анализ диаграмм состояния силицида хрома, образованного под действием ионной обработки. Установлено, что бомбардировка ионами инертных газов системы Cr – Si стимулирует взаимодействие между атомами хрома и кремния с образованием силицидных фаз при интегральной температуре подложки существенно более низкой, чем при синтезе этих фаз в

системе Cr – Si обычной высокотемпературной обработкой. Фазовый состав, структура и электрофизические свойства образующихся слоев силицидов хрома определяются энергией ионов, их типом и дозой облучения. Наиболее вероятно возникновение силицидов  $\text{CrSi}_2$  и  $\text{Cr}_3\text{Si}$ . С возрастанием массы и энергии налетающего иона ширина области формирования силицидов хрома увеличивается.

3. Результаты моделирования позволяют прогнозировать состав и размеры силицидных областей в приповерхностном слое кремния, сформированных под действием ИЛО.

4. Выполнено теоретическое исследование ЭЭС кремния, содержащего атомы хрома и комплексы дефектов, включающих в себя атомы углерода, кислорода, бора и фосфора. Показано, что атомы замещения хрома не создают дополнительные энергетические состояния в запрещенной зоне кремния. Это позволяет предположить, что известные из литературных источников глубокие энергетические уровни в запрещенной зоне кремния, обусловленные атомами хрома, возникают только при образовании сложных комплексов дефектов, в состав которых входит примесный атом Cr, а также атомы других химических элементов. В частности, исследование ЭЭС кремния, содержащего комплекс дефектов, в состав которого входят примесные атомы Cr и C, показало, что в запрещенной зоне кремния возникают следующие глубокие уровни (ГУ):  $(E_v + 0,29)$ ,  $(E_v + 0,34)$ ,  $(E_v + 0,38)$ ,  $(E_v + 0,42)$ ,  $(E_v + 0,46)$  эВ. В случае, когда в состав примесного центра входят атом Cr и атом B, в запрещенной зоне кремния также возникают ГУ:  $E_v + 0,57$  эВ;  $E_v + 0,86$  эВ;  $E_v + 0,9$  эВ. Если же в состав примесного центра входят атом Cr и атом O, в запрещенной зоне кремния появляются следующие ГУ:  $E_v + 0,83$  эВ,  $E_v + 0,91$  эВ,  $E_v + 0,94$  эВ. Данные по ГУ, расположенным в середине запрещенной зоны, находятся в хорошем согласии с известными экспериментальными значениями. Примесные центры, в состав которых входят атомы замещения хрома и фосфора, не формируют ГУ в запрещенной зоне Si.

5. Выполнено теоретическое исследование ЭЭС гетероструктур кремний (111) – два (четыре и шесть) монослоев атомов никеля и хрома – кремний (111). Показано, что в структурах  $\text{GNi}_2$ ,  $\text{GNi}_4$  и  $\text{GNi}_6$  у атомов кремния, расположенных на расстоянии меньше  $1,1a$  ( $a$  – постоянная решетки) от границы раздела металл-полупроводник, в области запрещенной зоны появляются дополнительные электронные состояния, что может привести к увеличению электропроводности этих слоев. В структурах  $\text{GCr}_2$ ,  $\text{GCr}_4$  и  $\text{GCr}_6$  ПЭС атомов кремния, расположенных на расстоянии меньше  $1,1a$  от границы раздела металл – полупроводник, в области энергий, соответствующей ширине запрещенной зоны, изменяется незначительно.

Полученные результаты моделирования процесса ИЛО структуры металл – кремний и моделирования ЭЭС структур кремний – металл – кремний могут быть использованы для оптимизации технологических режимов процесса ИЛО, уточнения электрофизических параметров полупроводниковых приборов, а также физического моделирования характеристик перспективных активных элементов сверхскоростных ИС.