

УДК 539. 612: 539. 612: 621. 382

## СОЗДАНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ, РЕАЛИЗУЮЩЕГО МЕТОДЫ РАСЧЕТА СИЛ СЦЕПЛЕНИЯ АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СВЯЗЕЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ, ОБЛУЧЕННЫХ НАПРАВЛЕННЫМИ ПОТОКАМИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

М.С. Поликарпов

Научный руководитель – к.т.н., доцент А.И. Колпаков  
Самарский государственный аэрокосмический университет  
имени академика С.П. Королёва

Необходимость использования тонких пленок металлов в качестве маскирующих слоев предъявляет повышенные требования к величине их адгезии, т.к. даже незначительное ее уменьшение приводит к значительному подтраливанию по границе металл-диэлектрик и необратимому изменению дифракционного микрорельефа.

Сила сцепления атомов, молекул металла и диэлектрика определяются прочностью их химических связей, ван-дер-ваальсовыми силами, наличием промежуточных слоев, химическим взаимодействием, чистотой поверхности и т.д. Поэтому определение их численного значения экспериментальными методами представляется достаточно сложной задачей, упрощение которой связано с моделированием адгезионных процессов аналитическими методами.

В настоящей работе предлагается метод оценки адгезионной прочности тонких пленок металла к поверхности подложки используя для этого равенство:

$$A = N_0 \exp \left[ - \exp \left( \frac{E_{Sub-C_xH_y}}{E_{Me-C_xH_y}} \right) \right] \left[ 1 + \left( \frac{t_{obl}}{t_{ib}} \right)^{3/2} \exp \left( 1 - \frac{E_{Me-C_xH_y}}{E_n(U)} \right) \right] \frac{1}{V_{gr} N_a} \sum_{i=1}^l \Delta E_i,$$

где  $V_{gr}$  – объем межфазной границы;  $N_a$  – число Авагадро;  $\Delta E_i$  – разность энергий единичных связей для  $i$ -го компонента межфазной границы;  $l$  – число компонентов (материалов), образующих межфазную границу. Для упрощения численного расчета данного равенства предлагается программное обеспечение, позволяющее сократить проведение дорогостоящих и трудоемких расчетов адгезионных свойств структур металл-полупроводник. Программа написана в среде визуальной разработки – Basic (Microsoft Visual Basic 6.0) с использованием библиотеки для работы с файлами (Microsoft Scripting Runtime). В рабочем режиме Программа запрашивает необходимые данные для расчета сил сцепления, контролирует правильность ввода как параметров, так и единиц их измерения. Для повышения качества ввода данных имеется встроенная база материалов, содержащая любое количество записей. Каждый материал имеет 9 параметров: теплоемкость, коэффициент температуропроводности, величину, характеризующую энергетические свойства материала, энергию единичной связи поверхности подложки с органикой, энергию единичной связи напыленного материала с органикой, число разорванных связей на поверхности оксида, молярную массу, атомную массу, диаметр атома, плотность контактирующих материалов. Имеются функции поиска материала, добавления данных и редактирования. В программе также имеется модуль построения графических зависимостей, основанный на принципе табуляции функции с учетом области допустимых значений и корректно отображающий функции, расположенные в разных четвертях, и циклические функции.