

**ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С. П. КОРОЛЕВА"**

И.Н. ЕРЕМИНА, А.Г. САНОЯН

**ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ**

САМАРА 2008

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С. П. КОРОЛЕВА"

И.Н. ЕРЕМИНА, А.Г. САНОЯН

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

*Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебно-методического пособия*

САМАРА
Издательство СГАУ
2008

УДК 621.382(075)

ББК 32.844.1

Е 702

Рецензенты: д-р техн. наук, проф. СамГУ А. Н. К о м о в;

д-р техн. наук, проф. Н. Д. С е м к и н

Еремина И.Н.

Е 702 **Физико-технические основы устройств микроэлектроники:** учеб.-метод. пособие / *И.Н. Еремина, А.Г. Саноян.* – Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2008. – 84 с. : ил.

ISBN 978-5-7883-0662-9

В пособии изложены теоретические положения и физико-технические методы анализа параметров физических сред и элементов конструкций, используемых в конструкторско-технологической практике создания микроэлектронных устройств. Приведен большой круг задач и упражнений по рассматриваемой тематике. Форма представления учебного материала ориентирована на значительный объем самостоятельной работы студентов.

Рекомендуется для студентов, обучающихся по специальности 200800 заочной формы обучения. Разработано на кафедре «Наноинженерия».

УДК 621.382(075)

ББК 32.844.1

ISBN 978-5-7883-0662-9

© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2008

СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК ОСНОВНЫХ УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ.....	5
ВВЕДЕНИЕ.....	7
1. МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В КОНСТРУКТОРСКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ СОЗ- ДАНИЯ УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ.....	9
1.1 Физическая сущность статистического метода анализа макро- скопических систем.....	9
1.2 Активационная модель протекания элементарных физико- химических процессов.....	11
1.3 Определение концентрации активных, с энергетической точ- ки зрения, частиц.....	12
1.4 Динамическое равновесие элементарных процессов в макро- скопических системах.....	14
1.5 Определение срока службы изделий на основе статистиче- ских методов физической надежности.....	16
1.6 Специфика протекания термоактивационных процессов в ус- ловиях внешних силовых воздействий. Кинетическая теория прочности материалов.....	17
1.7 Задачи и упражнения к разделу №1.....	19
1.7.1 Определение концентрации активных частиц, ответст- венных за протекание элементарных физико-химичес- ких процессов.....	19
1.7.2 Статистический анализ физико-химических процессов, используемых в технологической практике создания элементов электронных устройств.....	24
1.7.3 Оценка срока службы технических устройств с позиций активационной модели расходования ресурса.....	27
2 КОНТАКТНЫЕ И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДО- ТЕЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ.....	30
2.1 Физические основы выпрямляющего эффекта электронно- дырочного перехода в полупроводниковых структурах.....	30
2.2 Контактная разность потенциалов и толщина слоя объемного заряда.....	34

2.3 Вольт-амперная характеристика контактной системы «металл – полупроводник».....	37
2.4 Задачи и упражнения к разделу №2.....	43
2.4.1 Общие рекомендации по решению задач и упражнений..	43
2.4.2 Контактные явления в системах "Металл №1 - Металл №2"	45
2.4.3 Контактные явления в системах «Металл – Полупроводник».....	47
3 ЭНТРОПИЙНЫЕ МЕТОДЫ И ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ.....	53
3.1 Цели и задачи энтропийного подхода.....	53
3.2 Формальное представление технических объектов и технологии их создания	54
3.3 Показатели качества технологий на микроскопическом уровне рассмотрения.....	57
3.4 Показатели качества технологий на макроскопическом уровне рассмотрения.....	59
3.5 Показатели качества реальных технологий.....	61
3.6 Информационный потенциал и дефицит технологии создания изделий.....	63
3.7 Информационный запас качества и срок службы изделий.....	64
3.8 Процесс создания микроструктур в рамках представлений теории кодирования дискретной информации.....	65
3.9 Алгоритмическая энтропия и самоорганизация сложных атомных структур	67
3.10 Общие принципы пространственно-временной организации и эволюции микроэлектронных устройств.....	72
3.11 Задачи и упражнения к разделу №3.....	74
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	80
СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ.....	82
ПРИЛОЖЕНИЕ Справочные данные общего характера.....	83

СПИСОК ОСНОВНЫХ УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

$[A]$, $[B]$ – текущие концентрации реагента и продукта, участвующих в химическом процессе, моль/л

C – сложность изделия с позиций информационных подходов

H_c , H_m , H_p – энтропия технологического процесса создания изделия при использовании случайной, реальной и обеспечивающей появление функционального качества изделия технологии создания изделия, бит (для технических объектов), нит (для физических объектов)

I , ΔI – информационный потенциал и дефицит реальной технологии создания изделий, бит

J_M , J_{II} – ток термоэлектронной эмиссии электронов из металла в полупроводник и из полупроводника в металл, А

K – показатель качества технологии на микроскопическом уровне рассмотрения

K_n , K_o – константы скорости протекания прямого и обратного химического процесса, с^{-1} (для химического взаимодействия первого порядка)

K_{n0} , K_{o0} – предэкспоненциальные множители конкретного химического процесса

k – постоянная Больцмана, Дж/К

L – толщина слоя объемного заряда (длина экранирования Дебая), м

M_c , M_m , M_p – количество индивидуальных реализаций атомной структуры изделия при использовании случайной, реальной и обеспечивающей появление функционального качества изделия технологии размещения индивидуальных атомов

$(m+1)$ – количество типов атомов, размещение которых возможно при проведении реального технологического процесса

N_0 , N_a – полная концентрация частиц, активированных в энергетическом плане

N – количество ячеек размещения индивидуальных атомов при создании пространственной структуры (физического объема) изделия

n – количество дополнительных взаимно независимых элементарных измерительных операций, проведение которых необходимо для устранения информационного дефицита технологии создания изделия

P – показатель выхода годных изделий в производственной практике, %

p_i – вероятность размещения в индивидуальной ячейке атома i -го типа

R – дифференциальное сопротивление р-п перехода, Ом

S – термодинамическая энтропия макроскопических объектов, Дж/град

T – абсолютная температура в рабочих средах, К

U_k – контактная разность потенциалов, В

W_a – энергия активации, необходимая для активизации элементарного физико-химического процесса, эВ (Дж/моль)

W_{an}, W_{ao} – энергии активации протекания прямого и обратного химического процесса, эВ

ΔW – ширина запрещенной зоны в собственном полупроводнике (расстояние от примесного уровня до потолка валентной зоны (или дна зоны проводимости) в полупроводнике), эВ

α_m, α_p – избирательность технологического процесса, обеспечиваемая технологией создания изделий и закладываемая конструктором на этапе проектирования

μ – подвижность носителей электрических зарядов (при прыжковом механизме электропроводности), $\text{м}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$

τ – срок службы конструкционного материала (изделия), при воздействии возмущающих факторов среды эксплуатации, с

ВВЕДЕНИЕ

Учебно-методическое пособие состоит из ряда независимых разделов, тематическая направленность которых непосредственно связана с различными аспектами конструктивно-технологической направленности, актуальными при создании элементов конструкций и устройств современной твердотельной микроэлектроники.

В первом разделе рассмотрены вопросы использования аппарата статистической физики в проблематике, связанной с анализом кинетики элементарных физико-химических процессов. В инженерном плане эта проблематика конструктивно-технологической направленности вытекает из необходимости обеспечения заданных функциональных параметров на этапе производства изделий электронной техники и их стабильности в процессе эксплуатации. Большое количество разноплановых задач и упражнений в данном разделе позволяет продемонстрировать универсальность и эффективность использования методов статистической физики в современной инженерной практике.

Во втором разделе рассмотрены энергетические диаграммы твердотельных контактных систем с участием металлов и полупроводников, нашедшие широкое распространение в элементной базе современных устройствах микроэлектроники. Приведенные в наглядном графическом виде задачи и упражнения существенно облегчают изучение этого, достаточно сложного, материала. Этот материал включен в пособие в силу того обстоятельства, что рассмотренные зонные энергетические диаграммы являются ключевым моментом при решении вопросов, связанных с обеспечением необходимого функционального назначения элементов конструкций твердотельной микроэлектроники в интегральном исполнении. В целях облегчения процесса восприятия этого учебного материала он выполнен в виде графических схем энергетических диаграмм контактных систем различного типа.

В третьем разделе представлены материалы, посвященные рассмотрению вопросов оценки качества конструктивно-технологической деятельности при создании элементов конструкций и устройств микроэлектроники. Оригинальность подхода основана на использовании энтропийных методов анализа параметров порядка на атомно-молекулярном уровне

рассмотрения твердотельных структур, на основании которых реализуются устройства твердотельной электроники. Выбор оговоренного подхода обусловлен чрезвычайно высокими показателями степени упорядоченности физических сред, используемых в твердотельной электронике (что исключает использование термодинамических методов анализа, основанных на физике сплошных сред). Введены в рассмотрение энтропийные показатели качества технологических процессов и твердотельных структур и показана их взаимосвязь с производственными показателями технологических процессов создания реальных изделий. Обращено особое внимание на представление об информационном потенциале и дефиците технологии создания устройств твердотельной электроники. Усвоению материала способствует комплекс задач и упражнений по тематике раздела.

Пособие предназначено для подготовки специалистов с учетом специфики заочной формы обучения, предполагающей большой объем часов, отводимых на самостоятельное освоение учебного материала. Последнее обстоятельство обусловило структуру и тематику настоящего пособия. Специфика представления материала в пособии заключается в рациональном сочетании теоретических (в лаконичной форме изложения и достаточном для понимания ключевых моментов объеме) и практических материалов, в виде задач и упражнений различного уровня сложности.

Для эффективного усвоения материала пособия необходимо предварительное знакомство студентов с рядом разделов курса общей физики (молекулярная физика, атомная физика) и высшей математики (интегральное и дифференциальное исчисление, теория вероятностей).

1. МЕТОДЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ В КОНСТРУКТОРСКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ПРАКТИКЕ СОЗДАНИЯ УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ

1.1 Физическая сущность статистического метода анализа макроскопических систем

Методы статистической физики благодаря их универсальности нашли весьма широкое использование в современной конструкторско-технологической практике создания элементов конструкций микроэлектронных устройств. В частности, они позволяют рассмотреть кинетические закономерности элементарных физико-химических процессов, лежащих в основе создания и функционирования элементов конструкций и устройств электронной техники.

Все технические устройства (включая электронные изделия) представляют собой макроскопические объекты, имеющие концентрацию атомов (молекул) порядка 10^{23} атомов/см³. Столь большое количество частиц не позволяет проводить анализ состояния макросистем с помощью законов (уравнений) механики. Именно поэтому для этой цели используются статистические подходы и методы анализа. Учитывая значительную роль понятия энергии при рассмотрении динамики протекания практически всех физических процессов, она (энергия) принята в качестве основного параметра статистического подхода.

Согласно выводам молекулярной физики средняя кинетическая энергия W_K движения частиц равна:

$$W_K = n \frac{kT}{2}, \quad (1.1)$$

где n – число степеней свободы индивидуальной частицы (поступательные, вращательные, колебательные);

k – постоянная Больцмана ($1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К);

T – температура (в градусах Кельвина).

Из выражения (1.1) видно, что каждая степень свободы обеспечивает энергией (в среднем по ансамблю частиц), равной $kT/2$. Следует, однако, отметить, что индивидуальные частицы в веществе (ввиду хаотического характера теплового движения) обладают различными энергиями,

отличающимися от $kT/2$ как в меньшую, так и в большую сторону. В этой связи более тонкий анализ состояния макросистемы предполагает определение количества частиц ΔN_i , энергия которых заключена в интервале значений от W_i до $W_i + \Delta W$.

В физической и технической практике принято оперировать не параметром ΔN_i (который при устремлении ΔW к нулю теряет физический смысл), а параметром $\Delta N_i / \Delta W$, который получил название полной функции распределения частиц по энергиям. В классическом приближении (статистика Максвелла) с использованием предельного перехода ($\Delta \rightarrow d$) имеем:

$$\frac{dN}{dW} = \alpha W^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right), \quad (1.2)$$

где α — постоянный нормирующий множитель.

График зависимости $(dN/dW) = \varphi(W)$ представлен на рис. 1.1.

Вид графика (с наличием максимума) функции плотности распределения частиц по энергиям обусловлен конкурентным влиянием двух частных моментов:

- монотонно возрастающей функцией плотности квантовых энергетических состояний (см. выражение (1.2), фрагмент — $W^{\frac{1}{2}}$);
- монотонно убывающей функцией вероятности заполнения квантовых энергетических состояний (см. выражение (1.2), фрагмент — $\exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$).

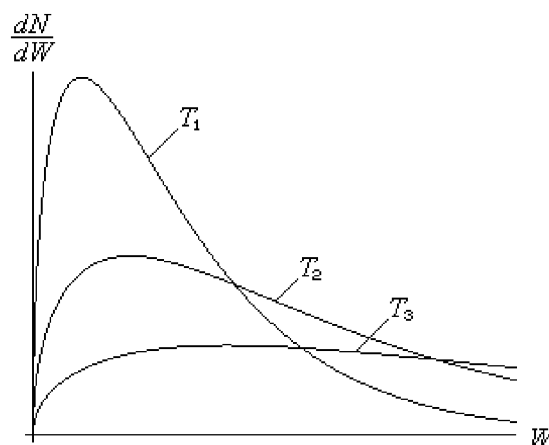


Рис. 1.1. Полная функция распределения частиц по энергиям ($T_1 < T_2 < T_3$)

Для последующего изложения представляют интерес следующие моменты, представленные на рис. 1.1:

- площадь под графиком полной функции плотности распределения частиц по энергиям равна полному количеству частиц в макросистеме N_0 ;
- положение максимума на графике полной функции плотности распределения частиц по энергиям соответствует значению энергии $W = kT/2$;
- с увеличением температуры в макросистеме значение максимума плотности распределения частиц по энергиям снижается, а положение максимума смещается в сторону больших значений энергии.

Приведенная выше статистика Максвелла применима к атомам (молекулам), находящимся в бесполом пространстве. В противном случае (т.е. при наличии потенциальных полей) в числителе под экспонентой появляется сумма кинетической (тепловой) и потенциальной составляющих энергии частицы.

1.2 Активационная модель протекания элементарных физико-химических процессов

Все элементарные физико-химические процессы, лежащие в основе технологии создания изделий и их последующей деградации, имеют активационный характер. Последнее означает, что для реализации этих процессов, атомам (молекулам) изначально необходимо обладать энергией более некоторого определенного порогового значения (характерного для рассматриваемого процесса), называемого энергией активации процесса – W_a .

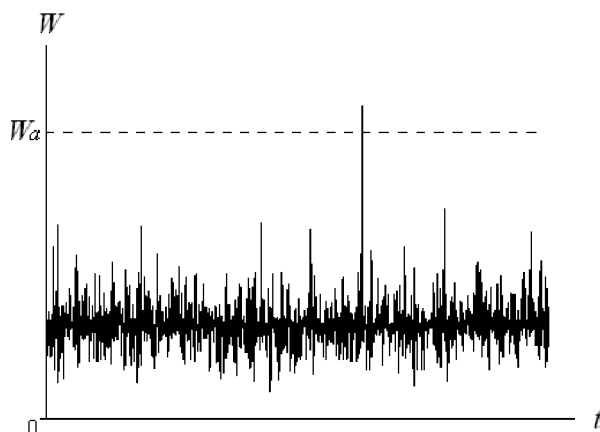


Рис. 1.2. Флуктуация энергии частицы, приводящая к реализации элементарного процесса

Именно этим обстоятельством обусловлена определенная устойчивость технических объектов к внешним возмущениям и технологические трудности создания изделий на этапах их производства (см. рис. 1.2).

Диапазон типичных значений энергий активации W_a для ряда распространенных в технологической практике создания электронной аппаратуры элементарных физико-химических процессов приведен в табл. 1.1.

Т а б л и ц а 1.1. Значения энергий активации типовых элементарных процессов

№ п/п	Наименование элементарного процесса	Энергия активации процесса W_a , эВ	
		минимум	максимум
1	Физическая адсорбция	0,005	0,01
2	Хемосорбция	0,01	3,0
3	Диффузия (поверхностная)	0,5	2,0
4	Диффузия (объемная)	1,0	3,0
5	Ионизация атомов	1,5	28
6	Химический процесс	1,0	5,0
7	Образование атомных вакансий в кристаллах	2,5	4,0
8	Перемещение атома в междоузлие кристалла	2,0	5,0

Примечание: поскольку в ряде справочников значение энергии активации W_a приводится в единицах Ккал / моль, в рамках выполнения настоящей работы следует произвести перевод единиц измерения согласно равенству: 1 эВ = 23 Ккал / моль.

Необходимо отметить, что приведенные в справочной литературе значения энергии активации W_a относятся к индивидуальным процессам как таковым, в то время как на практике зачастую имеет место параллельное протекание сразу нескольких индивидуальных процессов. В этом случае в качестве энергии активации принято рассматривать некоторое условное значение W_a , в котором интегрированно нашли свое проявление все индивидуальные процессы.

1.3 Определение концентрации активных, с энергетической точки зрения, частиц

Согласно вышеизложенной активационной модели протекания индивидуальных физико-химических процессов следует, что в указанном процессе могут принимать участие только те атомы, энергия которых превышает энергию активации W_a .

В первом приближении можно принять, что скорость (интенсивность) протекания индивидуальных физико-химических процессов будет пропорциональна концентрации таких высокоэнергетических частиц – N_a . Определим концентрацию N_a . Для этого проинтегрируем выражение (1.2):

$$N_a = \int_{W_a}^{\infty} dN = \int_{W_a}^{\infty} \alpha W^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) dW. \quad (1.3)$$

Для упрощения операции интегрирования учтем то обстоятельство, что в практическом плане нас интересует случай, когда выполняется условие $W_a \gg kT$, т.е. существенным является только фрагмент $\exp\left(-\frac{W}{kT}\right)$.

С учетом этого обстоятельства:

$$N_a = \beta \int_{W_a}^{\infty} \exp\left(-\frac{W}{kT}\right) dW, \quad (1.4)$$

где β – постоянный нормирующий множитель.

В результате интегрирования для концентрации активных частиц имеем:

$$N_a = N_0 \exp\left(-\frac{W_a}{kT}\right), \quad (1.5)$$

где N_0 – полная концентрация частиц.

Графическая интерпретация концентрации активных частиц N_a представлена на рис. 1.3 в виде заштрихованного участка.

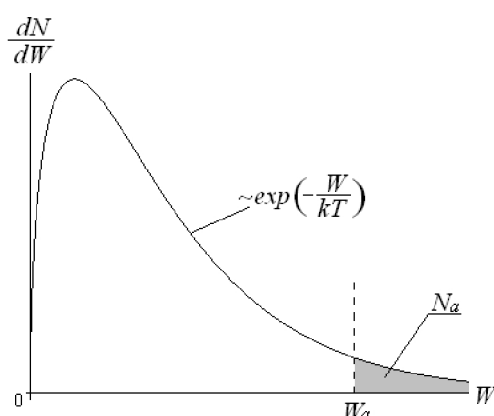


Рис. 1.3. Определение количества активных частиц с помощью распределения частиц по энергии

Согласно рис. 1.1 и 1.3 следует, что концентрация активных частиц N_a (площадь заштрихованного участка на рис. 1.3):

- уменьшается с увеличением энергии активации W_a ;
- увеличивается с увеличением температуры T .

Из вышеизложенного следует, что неблагоприятные физико-химические процессы (с большими значениями энергии активации W_a), приводящие к деградации элементов конструкций устройств, являются принципиально неустраняемыми.

1.4 Динамическое равновесие элементарных процессов в макроскопических системах

Все физико-химические процессы, протекающие в макроскопических системах, на атомном уровне рассмотрения являются обратимыми. Последнее означает, что параллельно с каждым элементарным атомным процессом (назовем его условно –_прямым) протекает обратный ему процесс, противодействующий протеканию прямого процесса. Некоторые примеры обратимого характера протекания элементарных процессов приведены в табл. 1.2.

Т а б л и ц а 1.2 Примеры обратимого характера протекания элементарных процессов

№ п/п	Элементарный процесс.	
	прямой	обратный
1	Адсорбция атомов	Десорбция атомов
2	Ионизация атома	Рекомбинация иона
3	Поглощение фотона	Испускание фотона
4	Диссоциация	Ассоциация
5	Реакция разложения	Реакция соединения
6	Реакция окисления	Реакция восстановления

Анализ условия равновесия между прямым и обратным процессами можно проиллюстрировать на примере химического процесса:



где A – атомы реагента;
 B – атомы продукта;

K_{π}, K_o – константы скорости протекания соответственно прямого и обратного химических процессов, определяемые в виде:

$$K_{\pi} = K_{\pi 0} \exp\left(-\frac{W_{\pi}}{kT}\right), \quad (1.7)$$

$$K_o = K_{o 0} \exp\left(-\frac{W_o}{kT}\right), \quad (1.8)$$

где $K_{\pi 0}, K_{o 0}$ – постоянные для данного химического процесса величины;

W_{π}, W_o – энергии активации протекания соответственно прямого и обратного химического процесса.

Скорости прямого (v_{π}) и обратного (v_o) химических процессов можно представить в виде:

$$v_{\pi} = \frac{d[A]}{dt} = K_{\pi}[A], \quad (1.9)$$

$$v_o = \frac{d[B]}{dt} = K_o[B], \quad (1.10)$$

где $[A], [B]$ – текущие концентрации реагента и продукта.

В условиях химического равновесия (т. е. при $v_{\pi} = v_o$) имеем:

$$K_p = \frac{K_{\pi}}{K_o} = \frac{[B_p]}{[A_p]}, \quad (1.11)$$

где $[A_p], [B_p]$ – равновесные концентрации реагента и продукта;

K_p – константа равновесия химического процесса.

Таким образом, при химическом равновесии имеет место определенное соотношение равновесных концентраций реагента и продукта (последнее свидетельствует о принципиальной невозможности достижения полной переработки реагента в продукт).

В рассмотренном случае статистические факторы нашли свое проявление в выражениях (1.7) и (1.8). Более наглядно этот момент представлен на рис. 1.4, на котором отображены полные функции распределения ансамблей молекул реагента и продукта по энергии в различные моменты времени протекания химического процесса.

Центральным моментом рис. 1.4 является то обстоятельство, что площади под кривыми распределения реагента уменьшаются (ввиду протекания прямого химического процесса) со временем, а площади продукта

- увеличиваются. Этот процесс продолжается до тех пор, пока концентрации активных частиц для прямого и обратного процессов не сравняются. В последнем случае имеет место динамическое равновесие системы.

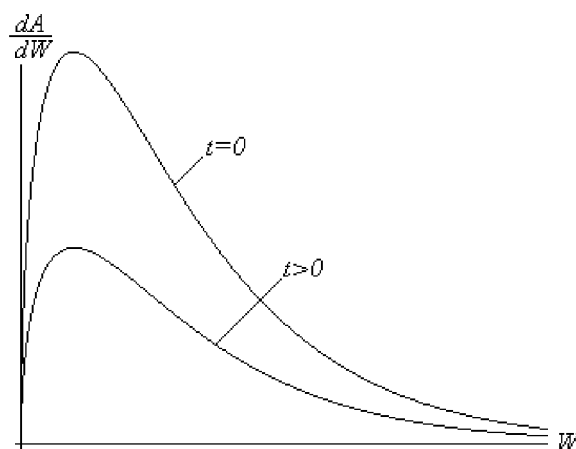


Рис. 1.4. Эволюция полных функций распределения молекул реагента и продукта по энергии со временем

Термин "динамическое равновесие" характеризует тот факт, что равновесные концентрации реагента и продукта удовлетворяют условию (1.11), но при этом в системе непрерывно происходят как прямые, так и обратные химические процессы на элементарном (атомном) уровне.

1.5 Определение срока службы изделий на основе статистических методов физической надежности

Изложенные выше методы физической статистики могут быть использованы для проведения оценки срока службы (долговечности) изделия при различных температурах эксплуатации. Предполагается, что процесс разрушения (деградации) изделия протекает по термоактивационному механизму, и, следовательно, процессу деградации изделия можно поставить в соответствие некоторое интегральное значение энергии активации старения – W_c (на практике в качестве W_c используется наименьшая энергия активация процесса, приводящего к деградации изделия по рассматриваемому функциональному показателю изделия).

Предположим, что на основании экспериментальных данных известен срок службы изделия τ_1 при температуре эксплуатации изделия T_1 . Требуется оценить срок службы изделия τ_2 при температуре эксплуатации из-

делия T_2 в предположении, что температура T_2 не очень сильно отличается от T_1 в том смысле, что физико-химический механизм деградации изделия остается неизменным.

Примем гипотезу, что потеря функционального качества изделия наступает по мере накопления в изделии микроскопических (на атомном уровне) дефектов в количестве N_d . В этом случае в первом приближении можно принять, что N_d пропорционально сроку службы изделия τ и вероятности возникновения микродефекта:

$$N_d = \gamma \tau_1 \exp\left(-\frac{W_c}{kT_1}\right), \quad (1.12)$$

$$N_d = \gamma \tau_2 \exp\left(-\frac{W_c}{kT_2}\right), \quad (1.13)$$

где γ — постоянная величина.

Из выражений (1.12) и (1.13) после преобразований имеем:

$$\tau_2 = \tau_1 \exp\left[\frac{W_c}{k} \frac{(T_1 - T_2)}{T_1 T_2}\right]. \quad (1.14)$$

При использовании выражения (1.14) следует проявлять известную осторожность в выборе интервала ($T_1 - T_2$) с той точки зрения, чтобы при изменении температуры имело место сохранение физического механизма деградации изделия.

Выражение (1.14) может быть использовано в том числе и для определения режимов ускоренных испытаний изделий с целью сокращения длительности и трудоемкости процесса испытаний путем повышения температуры испытания изделия.

1.6 Специфика протекания термоактивационных процессов

в условиях внешних силовых воздействий.

Кинетическая теория прочности материалов

Как отмечалось выше, внешние силовые поля могут оказывать существенное влияние на динамику протекания элементарных физико-химических процессов в рассматриваемом физическом объекте. При анализе последних будем считать, что силовое поле характеризуется только одной физической величиной, которую обозначим F . Согласно современным физическим представлениям внешнее силовое воздействие на эле-

ментарные процессы может быть сведено к его влиянию на энергию активации процессов. Таким образом, в данном случае вместо фиксированного значения энергии активации W_a следует ввести функцию $W_a(F)$. Определение конкретного вида функциональной зависимости $W_a(F)$ представляет весьма сложную физическую задачу. В этой связи в практических расчетах в первом приближении используют линейную зависимость между W_a и F :

$$W_a = W_{a0} \pm aF, \quad (1.15)$$

где W_{a0} – энергия активации процесса при отсутствии внешнего силового поля;

a – постоянный коэффициент, характеризующий степень влияния поля на энергию активации.

Знак "+" в выражении (1.15) соответствует случаю, когда наложение внешнего поля приводит к увеличению энергии активации, а знак "–" к ее уменьшению.

С учетом зависимости (1.3) определение числа энергетически активных частиц можно проводить с помощью выражения:

$$N_a = N_0 \exp\left(-\frac{W_{a0} \pm aF}{kT}\right). \quad (1.16)$$

Указанный подход получил весьма широкое распространение при анализе вопросов кинетической прочности твердых тел. В данном случае под прочностью понимается способность материалов сохранять целостность под действием механических нагрузок.

Целостность материала обеспечивается за счет связей между его атомами. В этой связи в рамках данного подхода разрушение материалов рассматривается как процесс последовательного разрыва межатомных связей в сечении разрушения. Согласно основным принципам кинетической теории прочности разрыв связей при внешней механической нагрузке происходит по следующей последовательности:

- внешняя механическая нагрузка снижает энергию межатомных связей в материале;
- за счет тепловых флуктуаций происходит разрыв связи;
- механическая нагрузка раздвигает атомы, затрудняя процесс рекомбинации.

Зависимость величины энергии активации процесса разрушения материала от механического напряжения σ определяется выражением:

$$W_a = W_{a0} - \gamma\sigma, \quad (1.17)$$

где W_{a0} – энергия активации процесса разрушения при отсутствии механической нагрузки;

γ – постоянный коэффициент.

В расчетной практике принято оперировать не количеством активных частиц, а долговечностью материала τ . С учетом (17) долговечность определяется выражением:

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{W_{a0} - \gamma\sigma}{kT}\right), \quad (1.18)$$

где τ_0 – период тепловых колебаний атомов материала.

Трудности практического использования выражения (1.18) обусловлены необходимостью:

- установления факта термоактивационного механизма деградации конкретного типа материала (устройства);
- экспериментального определения параметров термоактивационной модели деградации, таких как W_{a0} , γ , τ_0 .

1.7 Задачи и упражнения к разделу №1

1.7.1 Определение концентрации активных частиц, ответственных за протекание элементарных физико-химических процессов

Задание №1.1 Построить график зависимости относительной концентрации (N_a / N_0) активных частиц (атомов) от температуры при известном значении энергии активации элементарного процесса – W_a .

№ варианта	W_a , эВ	Температура вещества (К)			
		5	10	50	100
1	0.010	5	10	50	100
2	0.025	10	50	100	200
3	0.050	50	100	150	200
4	0.075	50	100	200	300
5	0.10	100	150	200	300
6	0.25	100	150	200	300
7	0.50	100	150	200	300
8	0.75	200	300	400	500

Окончание задания №1.1

9	1.00	200	300	400	500
10	1.20	200	300	400	500
11	1.50	300	600	900	1200
12	1.75	300	600	900	1200
13	2.00	300	600	900	1200
14	2.50	600	900	1200	1500
15	3.00	600	900	1200	1500

Задание №1.2 Во сколько раз необходимо повысить температуру вещества (начальные температуры – T_0), чтобы концентрация активных частиц возросла в десять раз. (При известном значении энергии активации элементарного процесса W_a .)

№ варианта	W_a , эВ	Температура вещества - T_0 , К		
1	0.010	5	10	50
2	0.025	5	10	50
3	0.050	50	100	150
4	0.075	50	100	200
5	0.10	100	150	200
6	0.25	100	150	200
7	0.50	100	150	200
8	0.75	200	300	400
9	1.00	200	300	400
10	1.20	200	300	400
11	1.50	300	600	900
12	1.75	300	600	900
13	2.00	300	600	900
14	2.50	600	900	1200
15	3.00	600	900	1200

Задание №1.3 Определить концентрацию носителей зарядов в собственном полупроводнике при известном значении ширины запрещенной зоны $W_{\text{п}}$.

№ варианта	$W_{\text{п}}$, эВ	Температура полупроводника – T_0 , К			
1	0.5	50	100	150	200
2	0.6	50	100	150	200
3	0.7	50	100	150	200

Окончание задания №1.3

4	0.8	50	100	150	200
5	0.9	100	150	200	250
6	1.0	100	150	200	250
7	1.1	100	150	200	250
8	1.2	100	150	200	250
9	1.3	150	200	250	300
10	1.4	150	200	250	300
11	1.5	150	200	250	300
12	1.6	150	200	250	300
13	1.7	200	250	300	400
14	1.8	200	250	300	400
15	1.9	200	250	300	400

Задание №1.4 Определить относительную концентрацию ионов в газовой фазе при известном значении энергии ионизации ($W_{\text{и}}$) и температуре газа.

№ варианта	Вещество	$W_{\text{и}}$, эВ	T , К
1	H	13.6	1000
2	He	24.6	1500
3	N	14.5	1000
4	O	13.6	1000
5	Ne	21.5	1500
6	Xe	12.1	1000
7	NH	13.1	1000
8	NH ₂	11.4	1000
9	NH ₃	10.2	1000
10	H ₂	15.4	1000
11	CH ₂	11.8	1000
12	CH	9.8	1000
13	OH	13.2	1000
14	H ₂ O	12.6	1000
15	CO	14.0	1000
16	C ₂ H ₅ OH	10.3	1000
17	Cl ₂	11.5	1000
18	CCl	12.9	1000
19	CCl ₂	13.1	1000
20	CCl ₃	8.8	1000

Задание №1.5 Определить макроскопическую скорость движения носителей зарядов (ионов) - v_E , принимая во внимание прыжковый (термоактивационный) механизм подвижности (μ) носителей зарядов в конденсированных средах.

Примечание: $\mu = \mu_0 \exp(-W_{\pi} / k T)$, где $\mu_0 = 10^{-8} \text{ (м}^2/\text{с)}/\text{В}$.

№ варианта	W_{π} , эВ	E , В/см	T , К
1	0.010	1000	10
2	0.025	900	50
3	0.050	800	75
4	0.075	700	100
5	0.10	600	125
6	0.25	500	150
7	0.50	400	175
8	0.75	300	200
9	1.00	200	250
10	1.20	100	300
11	1.50	1000	350
12	1.75	900	400
13	2.00	800	450
14	2.50	700	500
15	3.00	600	550

Задание №1.6 Отношение $N_{a1} / N_{a2} = 2$, где индексы 1 и 2 характеризуют различные температуры вещества T_1 и T_2 . Определить температуру T_2 , если известны: T_1 , W_{a1} , W_{a2} .

№ варианта	W_{a1} , эВ	W_{a2} , эВ	T_1 , К
1	0.010	0.020	50
2	0.025	0.040	50
3	0.050	0.075	50
4	0.075	0.10	50
5	0.10	0.20	100
6	0.25	0.50	100
7	0.50	0.75	100
8	0.75	1.00	100
9	1.00	1.10	200
10	1.20	1.30	200

Окончание задания №1.6

11	1.50	1.75	200
12	1.75	2.00	300
13	2.00	2.50	300
14	2.50	2.75	300
15	3.00	2.75	500

Задание №1.7 Разность температур $\Delta T = T_2 - T_1$ обеспечивает выполнение условия: $N_{a1} / N_{a2} = 0,1$. Определить значение энергии активации процесса (W_a).

№ варианта	ΔT , К	T_1 , К
1	10	10
2	50	50
3	75	75
4	100	100
5	100	125
6	100	150
7	50	175
8	50	200
9	70	250
10	70	300
11	150	350
12	150	400
13	100	450
14	100	500
15	150	550

Задание №1.8 Определить энергию активации подвижности ионов в разбавленных растворах по известному значению подвижности ионов при температуре 18° С.

№ варианта	Тип иона		Подвижность $\times 10^7$ (м ² /с)/В
	Катион	Анион	
1	К		67
2	Na		44
3	Li		33
4	H		320
5	Ag		54

6	Zn		46
7		J	67
8		Br	68
9		Cl	66
10		OH	174
11		NO ₂	62
12		VnO ₄	53

1.7.2 Статистический анализ физико-химических процессов, используемых в технологической практике создания элементов электронных устройств

Задание №1.9 Оценить равновесную концентрацию точечных дефектов (вакансий) в кристаллической решетке при условиях, что заданы: энергия активации образования точечного дефекта $W_{ад}$; температура кристалла T ; $N_0 = n$ (моль/литр).

№ варианта	$W_{ад}$, эВ	n	T , К
1	0.50	11	800
2	0.75	10	900
3	0.75	9	1000
4	0.75	8	1100
5	0.80	7	1200
6	0.80	9	1300
7	0.90	8	1400
8	1.00	7	1500
9	1.00	11	1550
10	1.20	10	1600
11	1.50	9	1650
12	1.75	8	1700
13	2.00	7	1750
14	2.50	9	1800
15	3.00	8	1850

Задание №1.10 Используя условия задачи № 2.2.1, определить значение отношения $N_{a,T=300K} / N_{a,T}$.

Задание №1.11 Определить скорость процесса десорбции примесных атомов с поверхности твердого тела, если известны значения энергии ак-

тивации процесса десорбции W_d и поверхностная концентрация примесных атомов N_0 .

№ варианта	T, K	W_d , эВ	N_0 , атом/см ²
1	50	0.5	10^{10}
2	100		
3	200		
4	400		
5	100	1.0	10^{11}
6	300		
7	600		
8	900		
9	100	1.5	10^{12}
10	300		
11	600		
12	900		
13	300	2.0	10^{13}
14	600		
15	900		
16	1200		

Задание №1.12 Определить значения и построить график зависимости константы равновесия химического процесса от температуры.

№ варианта	W_{ao} , эВ	$W_{ап}$, эВ	T, К			
1	0.6	0.5	50	100	300	600
2	0.8					
3	1.0					
4	1.2					
5	1.2	1.0				
6	1.5					
7	2.0					
8	3.0					
9	1.6	1.5	100	600	900	1200
10	2.0					
11	2.5					
12	3.0					

13	2.1	2.0				
14	2.5					
15	3.0					
16	4.0					

Задание №1.13 Построить график зависимости скорости химического процесса от температуры в начальный момент времени (C_0 – начальная концентрация реагента).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7	8
W_{ap} , эВ	0.5	0.7	0.9	1.2	1.5	1.8	2.1	2.4
C_0 , моль/л	0.01	0.1	1.0	1.5	2.0	3.0	4.0	5.0
№ варианта	9	10	11	12	13	14	15	16
W_{ap} , эВ	0.6	0.8	1.0	1.3	1.6	1.9	2.2	2.5
C_0 , моль/л	0.01	0.1	1.0	1.5	2.0	3.0	4.0	5.0

Задание №1.14 Рассматривается химический процесс типа: $A \Rightarrow B$. Определить концентрацию реагента А в момент τ от начала процесса.

№ варианта	$W_{\text{ан}}$, эВ	T, К	τ , с				
1	0.6	300	10	10^2	10^4	10^6	10^8
2	0.8						
3	1.0						
4	1.2						
5	1.2	600					
6	1.5						
7	2.0						
8	3.0						
9	1.6	900					
10	2.0						
11	2.5						
12	3.0						
13	2.1	1200					
14	2.5						
15	3.0						
16	4.0						

Задание №1.15 Построить график зависимости скорости химического процесса от времени ($C_0 = 1$ моль/л – начальная концентрация реагента).

№ варианта	1	2	3	4	5	6	7
W_{ap} , эВ	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7
T, (K)	50	100	150	200	250	300	350
№ варианта	9	10	11	12	13	14	15
W_{ap} , эВ	0.8	0.9	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4
T, K	400	450	500	550	600	650	700

**1.7.3. Оценка срока службы технических устройств
с позиций активационной модели расходования ресурса**

Задание №1.16 Определить срок службы материалов τ при температуре эксплуатации T, если известен срок службы материала τ_0 при температуре эксплуатации T_0 .

№ варианта	τ_0 , с	T_0 , K	W_c , эВ	T, K
1	10^6	300	1.0	600
2			1.1	650
3			1.2	700
4			1.3	750
5	10^7	400	1.4	800
6			1.5	850
7			1.6	900
8			1.7	950
9	10^8	500	1.8	1000
10			1.9	1050
11			2.0	1100
12			2.1	1150
13	10^8	600	2.2	1200
14			2.3	1250
15			2.4	1300
16			2.5	1500

Задание №1.17 Во сколько раз увеличится срок службы изделия, если энергия активации процесса старения изделия W_c возрастет на 10 % (при температуре эксплуатации изделия T_0).

№ варианта	W_c , эВ	τ_0 , с	T_0 , К
1	1.0	10^6	600
2	1.1		650
3	1.2		700
4	1.3		750
5	1.4	10^7	800
6	1.5		850
7	1.6		900
8	1.7		950
9	1.8	10^8	1000
10	1.9		1050
11	2.0		1100
12	2.1		1150
13	2.2	10^8	1200
14	2.3		1250
15	2.4		1300
16	2.5		1500

Задание №1.18 Определить температуру (T) режима ускоренных испытаний изделия, обеспечивающую сокращение продолжительности штатного режима испытаний (τ_0) в n раз, если известны: T_0 – температура штатного режима испытаний; W_c – энергия активации процесса старения изделия.

№ варианта	T ₀ , K	W _c , эВ	τ ₀ , с	n
1	300	1.0	10 ⁴	10
2	310			
3	320	1.2	5 * 10 ⁴	8
4	330			
5	340	1.4	10 ⁵	6
6	350			
7	360	1.6		5
8	370			
9	380	1.8	10 ⁶	4
10	390			
11	400	2.0		3
12	410			

13	420	2.2	10^7	2
14	430			
15	440	2.4		
16	450			

Задание №1.19 Определить долговечность материала τ в случае, если к нему приложена внешняя механическая нагрузка σ .

№ варианта	Температура, К	Энергия активации, эВ	Период тепловых колебаний, с	Коэффициент γ , мм ³	Механическое напряжение σ , нПа
1	300	1	10^{-12}	0.1	0.1
2	350	1	10^{-12}	0.1	0.1
3	300	1	10^{-11}	0.1	0.1
4	350	1	10^{-11}	0.1	0.1
5	300	1.5	10^{-12}	0.1	0.1
6	350	1.5	10^{-12}	0.1	0.1
7	400	1.5	10^{-12}	0.1	0.1
8	450	1.5	10^{-12}	0.1	0.1
9	300	2	10^{-12}	0.1	0.1
10	400	2	10^{-12}	0.1	0.1
11	500	2	10^{-12}	0.1	0.1
12	600	2	10^{-12}	0.1	0.1
13	300	2.5	10^{-12}	1	0.1
14	500	2.5	10^{-12}	1	0.1
15	700	2.5	10^{-11}	1	0.1
16	700	2.5	10^{-11}	0.1	0.1

2. КОНТАКТНЫЕ И ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

2.1. Физические основы выпрямляющего эффекта электронно-дырочного перехода в полупроводниковых структурах

Контакт двух полупроводников обладает выпрямляющим действием. Это значит, что сопротивление такого контакта зависит от направления проходящего через него тока. В одном направлении (запорном) оно велико, в противоположном (пропускном) – мало. Особенно сильно выпрямляющий эффект проявляется на границе раздела дырочного (р) и электронного (n) полупроводников, что обусловлено существенной разностью работ выхода электронов в этих материалах (работа выхода электрона из электронного полупроводника меньше, чем из дырочного). О таком контакте говорят как об электронно-дырочном (р-n) переходе.

Для получения р-n переходов в пластинку чистого собственного полупроводника вводят две примеси – донорную и акцепторную. Первая сообщает полупроводнику электронную, а вторая – дырочную проводимость. Например, если пластинка сделана из германия или кремния, то в качестве донора можно взять элемент пятой группы периодической системы (фосфор, мышьяк и пр.), а в качестве акцептора – элемент третьей группы (бор, индий и пр.). В результате в одной половине пластинки возникает электронная, а в другой – дырочная проводимость, а между обеими половинками – тонкий слой, называемый р-n переходом.

Примесные уровни в запрещенной зоне расположены в электронном полупроводнике вблизи зоны проводимости, а в дырочном полупроводнике – вблизи валентной зоны. Благодаря этому средняя энергия электрона проводимости и уровень химического потенциала μ_n в первом полупроводнике будут выше, а работа выхода – меньше, чем во втором слое с химическим потенциалом μ_p (рис. 2.1).

Приведем полупроводники в контакт друг с другом. Электроны будут переходить из первого полупроводника во второй. Электронный полупроводник будет заряжаться положительно, а дырочный – отрицательно. В тонком слое между ними появится контактное электрическое поле, направленное от электронного полупроводника к дырочному полупроводнику. В результате этого энергетические уровни электронного полупроводника начнут опускаться, а дырочного – подниматься.

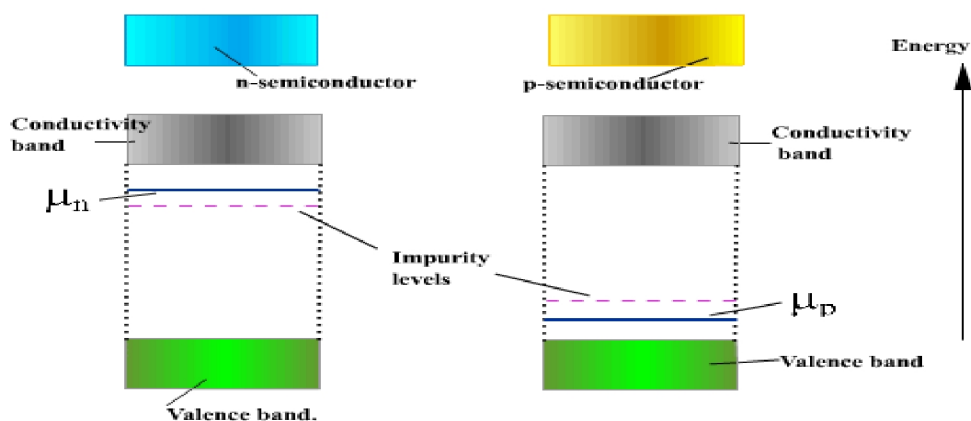


Рис. 2.1. Зонные энергетические диаграммы полупроводников р и n типов

Контактное электрическое поле E_k будет препятствовать переходу электронов в дырочный полупроводник. Процесс перехода прекратится, когда уровни химического потенциала в обоих полупроводниках сделаются одинаковыми. Переходный слой становится сильно обедненным основными носителями тока (электронами в n-полупроводнике и дырками в р-полупроводнике). Его сопротивление оказывается во много раз больше суммарного сопротивления обоих полупроводников. На рис. 2.2 приведена схема энергетических уровней в случае контакта полупроводников с разным типом примесей в отсутствие внешнего электрического поля.

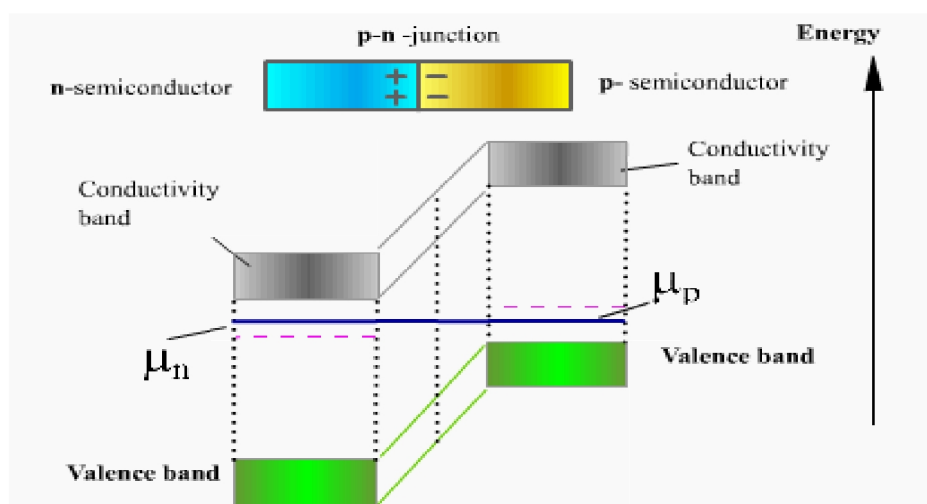


Рис. 2.2. Равновесные энергетические диаграммы при контакте полупроводников р и n типов (в отсутствие внешнего источника э.д.с.)

Следует отметить тот факт, что представленные на рис. 2.2 энергетические диаграммы являются упрощенными, поскольку не отражают фактора искривления энергетических уровней в полупроводниках на границе раздела сред.

Присоединим к рассмотренной выше контактной системе внешнюю э.д.с. так, как это показано на рис. 2.3: минус – к р-кристаллу, плюс – к n-кристаллу.

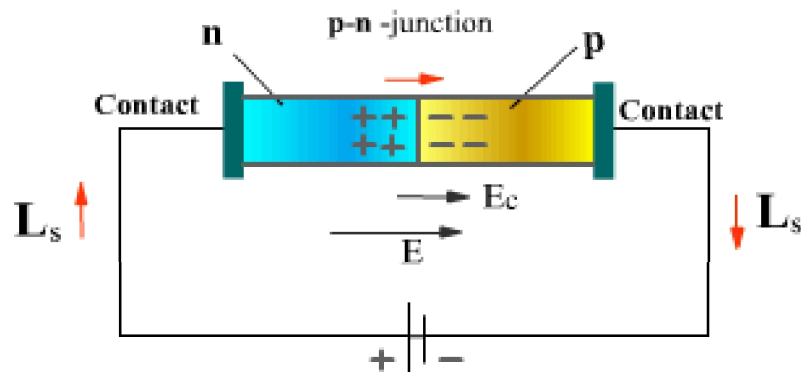


Рис. 2.3. Обратное подключение р-n перехода

Такое подключение называется «обратным». Внешнее электрическое поле E при этом направлено от электронного полупроводника к дырочному, т.е. одинаково с контактным полем E_c . Такое поле усиливает контактное поле E_c и тем самым еще больше уменьшает концентрацию основных носителей (дырок и электронов проводимости) в переходном слое. Сопротивление переходного (обедненного) слоя еще больше возрастет. Величина тока I_s через полупроводник в случае подачи на него напряжения очень мала, так как определяется концентрацией неосновных носителей заряда, которая при комнатных температурах, как правило, незначительна.

Переменим теперь полярность подключения полюсов внешней э.д.с. (рис. 2.4). Такое подключение будем называть «прямым». В этом случае внешнее поле E будет направлено против контактного поля E_c . Тогда электроны проводимости и дырки будут беспрепятственно проникать в переходный слой и сопротивление последнего практически исчезнет. Величина тока через контакт будет определяться уже основными носителями тока, концентрация которых велика, и ток через р-n переход будет значительным.

Если ток переменный, то в зависимости от его направления и силы сопротивление контакта становится пульсирующим, изменяясь от нуля практически до бесконечности. В соответствии с этим ток через контакт будет проходить только тогда, когда внешнее поле E направлено от дырочного полупроводника к электронному полупроводнику (рис. 2.4). На этом принципе работают полупроводниковые выпрямители.

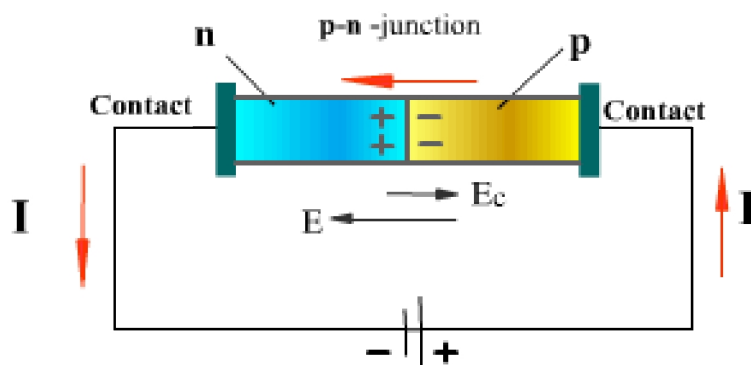


Рис. 2.4. Прямое подключение p-n перехода

Зависимость тока I от напряжения (вольт-амперная характеристика) p-n перехода описывается выражением:

$$I = c \left(\exp \left(\pm \frac{e \cdot U}{2 \cdot k \cdot T} \right) - 1 \right) \exp \left(\frac{-\Delta W}{2 \cdot k \cdot T} \right), \quad (2.1)$$

где c – постоянная, не зависящая от температуры и приложенного напряжения;

ΔW – ширина запрещенной зоны;

U – приложенное напряжение;

e – величина заряда электрона;

T – температура полупроводника;

k – постоянная Больцмана.

Множитель $c \cdot \exp \left(\frac{-\Delta W}{2 \cdot k \cdot T} \right) = I_s$ – компонента тока, обусловленная неосновными носителями заряда:

$$I = I_s \left(\exp \left(\pm \frac{e \cdot U}{2 \cdot k \cdot T} \right) - 1 \right). \quad (2.2)$$

Знак «+» в показателе степени соответствует напряжению U_{np} , приложенному в прямом направлении (рис. 2.4), знак «-» соответствует напряжению $U_{обр}$, приложенному в обратном направлении (рис. 2.3). Из формулы (2.2) следует, что при комнатной температуре ток через p-n переход, смещенный в прямом направлении, возрастает экспоненциально с ростом напряжения, даже если напряжение составляет всего несколько десятых вольта. В случае обратного смещения при тех же значениях напряжения величина тока равна I_s и, соответственно, очень мала.

Типичный вид вольт-амперной характеристики полупроводникового диода (p-n перехода) представлен на рис. 2.5. Полупроводниковые диоды-

выпрямители применяются в электронике: для выпрямления и преобразования электрических колебаний высокой частоты, усиления и генерации электрических колебаний, в счетно-решающих электронных устройствах и т.д. Полупроводниковые выпрямители отличаются высоким к.п.д., малыми габаритами и невысокой стоимостью. Один из типов германиевых выпрямителей состоит из пластинки германия с электронной проводимостью, в которую с одной стороны вварен шарик индия, а с другой – шарик олова. Оловянный шарик служит электродом для включения выпрямителя в цепь. Индий сообщает германию дырочную проводимость. При нагревании индий диффундирует в германий, вследствие чего вблизи индиевого электрода возникает дырочная проводимость, а на некоторой глубине – выпрямляющий p-n переход.

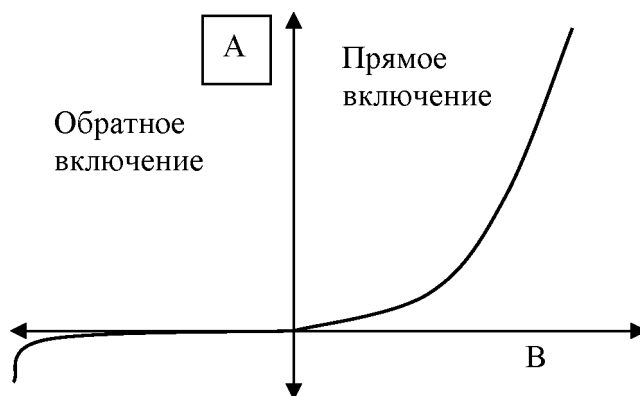


Рис. 2.5. Вольт-амперная характеристика полупроводникового диода

Такие выпрямители при площади контакта 1 мм^2 и напряжении 1 В пропускают токи больше 1 А , причем пропускаемые токи обратного направления обычно не превышают нескольких микроампер. При площади контакта в несколько см^2 выпрямители могут пропускать токи в несколько сотен ампер. При этом их пробойные напряжения могут достигать сотен вольт.

2.2. Контактная разность потенциалов и толщина слоя объемного заряда

Рассмотрим явления в контакте металл–полупроводник при отсутствии поверхностных состояний. Возьмем контакт электронного полупроводника (*n*-типа) и металла в предположении, что работа выхода электрона из полупроводника $\Phi_{\text{П}}$ меньше работы выхода электрона из металла

Φ_M , то есть $\Phi_{II} < \Phi_M$. На рис. 2.6,а показана зонная энергетическая диаграмма металла (Me) и полупроводника (п/п), не находящихся в контакте друг с другом. Термодинамическая работа выхода – это расстояние от уровня вакуума E_0 до уровня Ферми в металле F_M или в полупроводнике F_{II} :

$$\Phi_M = E_0 - F_M. \quad (2.3a)$$

$$\Phi_{II} = E_0 - F_{II}. \quad (2.3б)$$

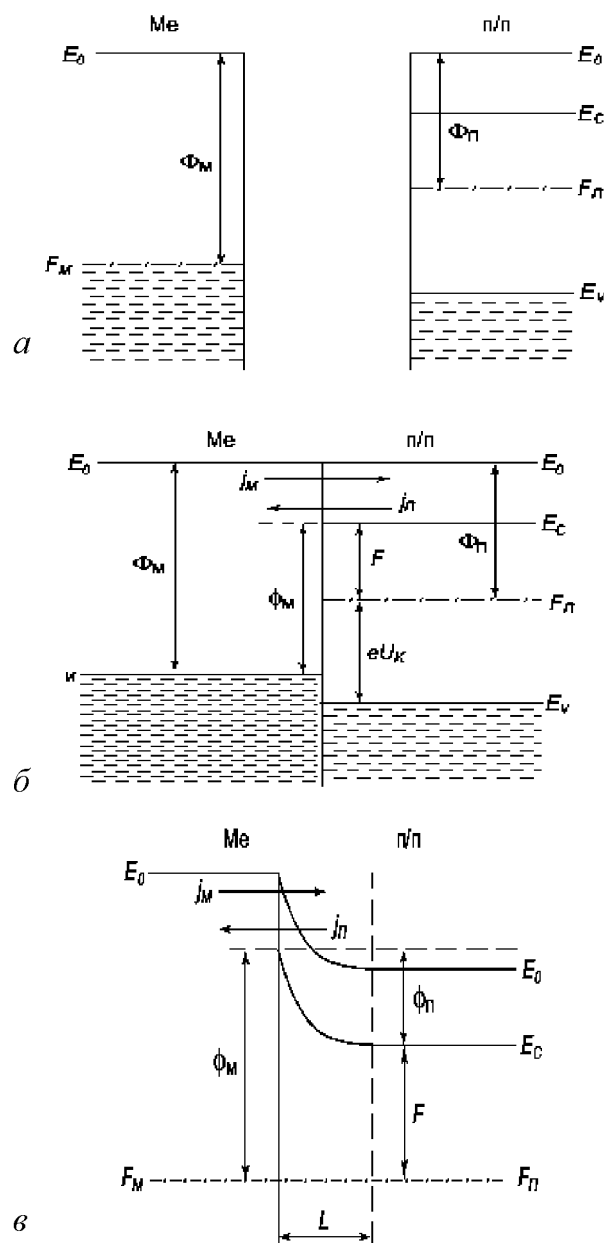


Рис. 2.6. Зонная энергетическая диаграмма контактной системы «металл – полупроводник»: а – Me и п/п далеко друг от друга; б – момент соприкосновения Me и п/п ($t = 0$); в – после установления термодинамического равновесия в контактной системе

Если металл и полупроводник привести в непосредственный контакт (рис. 2.6,б), то электроны будут переходить преимущественно из полупроводника в металл, так как уровень Ферми в полупроводнике в момент соединения с металлом лежит выше, чем в металле: $F_{\Pi} > F_{\text{М}}$. При этом металл заряжается отрицательно, а полупроводник – положительно. Направленный поток электронов проходит над потенциальным барьером, который возникает в приконтактной области полупроводника (рис. 2.6,в). Этот поток электронов будет иметь место до тех пор, пока уровни Ферми F_{Π} и $F_{\text{М}}$ не выровняются, после чего установится динамическое равновесие (токи j_{Π} и $j_{\text{М}}$ будут равны друг другу). Между металлом и полупроводником возникает контактная разность потенциалов:

$$U_{\text{К}} = \frac{F_{\Pi} - F_{\text{М}}}{e}, \quad (2.4)$$

где e – абсолютная величина заряда электрона.

Здесь при выводе этой формулы разность уровней $F_{\Pi} - F_{\text{М}}$ берется из рис. 2.6,а или 2.6,б, так как после установления равновесия (рис. 2.7) $F_{\Pi} = F_{\text{М}}$. Величина $\varphi_{\text{М}}$ – это высота потенциального барьера со стороны металла, она имеет смысл работы выхода электронов из металла в полупроводник, равной расстоянию от уровня Ферми до зоны проводимости на границе. Величина $F = E_{\text{С}} - F_{\Pi}$ в глубине проводника (рис. 2.6,в). При этом имеет место следующее равенство:

$$\varphi_{\text{М}} = e \cdot U_{\text{К}} + F. \quad (2.5)$$

Таким образом, в приконтактной области полупроводника возникает слой положительного объемного заряда толщиной L (рис. 2.6,в). Из этого слоя все электроны ушли в металл. В физике полупроводников доказывается, что толщина этого слоя:

$$L = \sqrt{\frac{2 \cdot \varepsilon \cdot \varepsilon_0 \cdot U_{\text{К}}}{e \cdot n_0}}, \quad (2.6)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость полупроводника;

ε_0 – электрическая постоянная;

n_0 – концентрация свободных электронов в глубине полупроводника (т.е. при $x > L$).

Величина L обычно составляет $10 \div 100$ нм. Концентрация свободных электронов в металле значительно больше, чем в полупроводнике, поэтому толщина отрицательного слоя объёмного заряда в металле ничтожно мала и не дает вклада в контактную разность потенциалов. Толщина слоя объёмного заряда L называется *длиной экранирования Дебая*. Этот слой экранирует внутреннюю часть полупроводника от проникновения туда контактного поля. Рассмотрим условие динамического равновесия при контакте металла и полупроводника (см. рис. 2.6,в). Ток термоэлектронной эмиссии электронов из металла в полупроводник над потенциальным барьером высотой φ_M дается уравнением Ричардсона-Дэшмена:

$$J_M = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{\varphi_M}{k \cdot T}\right), \quad (2.7)$$

где A – постоянная;
 T – абсолютная температура;
 k – постоянная Больцмана;
 S – площадь контакта.

Обратный ток термоэлектронной эмиссии электронов из полупроводника в металл J_{II} равен (см. рис. 2.6,в):

$$J_{II} = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{e \cdot U_K + F}{k \cdot T}\right), \quad (2.8)$$

где величина $eU_K + F$ играет роль работы выхода электрона из полупроводника в металл.

При динамическом равновесии $J_M = J_{II}$. Этот же вывод следует и из уравнения (2.5).

2.3. Вольт-амперная характеристика контактной системы «металл – полупроводник»

Наличие потенциального барьера на границе металл – полупроводник приводит к тому, что возможно явление выпрямления переменного тока, а ВАХ для постоянного тока будет несимметричной. За положительное напряжение U примем такое напряжение, когда металл имеет положительный потенциал относительно полупроводника. Так как в области объёмного заряда L (приконтактной области полупроводника) свободных электронов практически нет, то удельное сопротивление этой области очень велико и все внешнее напряжение будет падать здесь. При $U > 0$ все

уровни в полупроводнике сдвинутся вверх на величину eU (рис. 2.7,а). Переход электронов из полупроводника в металл облегчится, высота барьера со стороны полупроводника уменьшится, а со стороны металла высота барьера остается прежней – φ_M . Результирующий поток электронов направлен от полупроводника к металлу и увеличивается с ростом напряжения. При $U < 0$ все энергетические уровни в полупроводнике сдвинутся вверх на величину eU (см. рис. 2.7,б) и высота потенциального барьера со стороны полупроводника увеличится, а со стороны металла вновь не изменится. Вследствие этого поток электронов J_{Π} со стороны полупроводника уменьшится, и при увеличении U этот поток станет очень мал. В общем случае при любой полярности напряжения результирующий ток $J = J_{\Pi} - J_M$. Из диаграммы, представленной на рис. 2.7, при любой полярности приложенного напряжения получим:

- ток, обусловленный термодинамической эмиссией электронов из металла в полупроводник, по-прежнему определяется формулой (2.7);
- ток, обусловленный термодинамической эмиссией электронов из полупроводника в металл:

$$J_{\Pi} = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{-\varphi_{\Pi}}{k \cdot T}\right), \quad (2.9a)$$

$$J_{\Pi} = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{e \cdot U_K - \varphi_M}{k \cdot T}\right); \quad (2.9б)$$

- уравнение (2.5) остается справедливым и при наличии внешнего напряжения. Результирующий ток равен:

$$J = J_M \cdot \exp\left(\frac{e \cdot U_K}{k \cdot T} - 1\right), \quad (2.10)$$

где J_M дается формулой (2.7).

Используя уравнение (2.5), можно записать для тока:

$$J_M = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{-\varphi_M}{k \cdot T}\right), \quad (2.11a)$$

$$J_M = S \cdot A \cdot T^2 \cdot \exp\left(\frac{-(e \cdot U_K + F)}{k \cdot T}\right). \quad (2.11б)$$

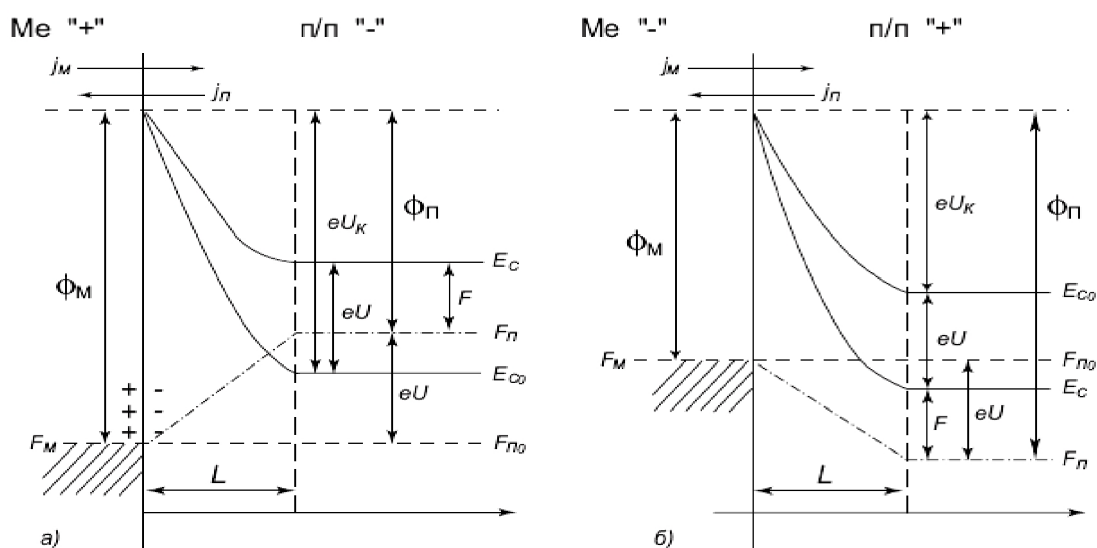


Рис. 2.7. Зонная диаграмма контактной системы «металл – полупроводник»:
а – при положительном напряжении; б – при отрицательном напряжении

Вольт-амперная характеристика (ВАХ), построенная по уравнению (2.10), показана на рис. 2.8 (кривая 1). При $eU \gg kT$ ток быстро (экспоненциально) растет. При $eU \gg kT$ (но $U < 0$) ток становится постоянным $J_S \equiv J_M$, то есть не зависящим от U , и малым. Этот ток J_S получил название тока насыщения.

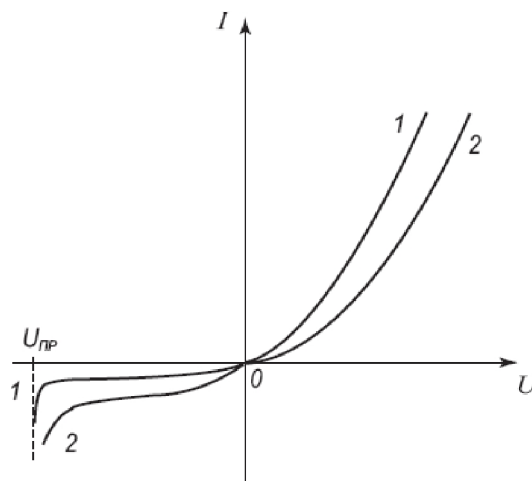


Рис. 2.8. Вольт-амперная характеристика выпрямляющего контакта полупроводника с металлом: 1 – диодная теория; 2 – диффузионная теория

Вышеприведенный вывод ВАХ получил название *диодной теории*. Эта теория справедлива, если токи J_M и J_P обусловлены термоэлектронной эмиссией, когда электроны вылетают из металла или полупроводника с тепловыми скоростями v_T . Но в нашем случае эти электроны вылетают не в вакуум, а должны пролететь через слой объемного заряда толщиной L

без столкновений с атомами решетки полупроводника. Если же длина свободного пробега электрона l значительно меньше толщины барьера L ($l \ll L$), то электрон в процессе перехода испытывает много столкновений с решеткой и быстро теряет свою тепловую скорость направленного движения. Электрон будет двигаться через барьер под действием электрического поля напряженностью E с дрейфовой скоростью

$$U = \mu \cdot E, \quad (2.12)$$

где μ – подвижность электронов.

Величина токов будет определяться формулой:

$$J = S \cdot e \cdot \mu \cdot n(x) \cdot E(x), \quad (2.13)$$

где поле $E(x)$ и концентрация $n(x)$ электронов может зависеть от координаты x .

Так будет в области барьера, где объемный заряд, обусловленный контактной разностью потенциалов, делает поле $E(x)$ неоднородным. Ток, протекающий через полупроводник, должен быть одинаков в любом поперечном сечении полупроводника. Вычислим этот ток при $x = 0$, который протекает над вершиной потенциального барьера. Согласно статистике электронов в энергетических зонах полупроводника известно, что концентрация электронов в зоне проводимости равна:

$$n = N_C \cdot \exp\left(\frac{-(E_C - E_{\Pi})}{k \cdot T}\right), \quad (2.14a)$$

$$n = N_C \cdot \exp\left(\frac{-F}{k \cdot T}\right), \quad (2.14б)$$

где N_C – эффективная плотность состояний в зоне проводимости полупроводника.

При отсутствии внешнего напряжения, как видно из рис. 2.6, вблизи границы $F = E_C - E_{\Pi} = \varphi_M$. Поэтому концентрация свободных электронов в полупроводнике у самой границы (при $x = 0$):

$$n_s = N_C \cdot \exp\left(\frac{-\varphi_M}{k \cdot T}\right). \quad (2.15)$$

Как видно из рис. 2.7,а и б, величина n_s не изменяется при приложении внешнего напряжения любой полярности, так как около границы величина $F = E_C - E_{\Pi} = \varphi_M$ от напряжения U не зависит. Напряженность электрического поля E_s в полупроводнике около границы с металлом (при $x = 0$)

$$E_S = \frac{U + U_K}{L}, \quad (2.16)$$

так как в этом случае поля, создаваемые внешним напряжением U и контактной разностью потенциалов U_K , складываются.

При $U = 0$ в состоянии динамического равновесия результирующий ток $J = J_{\Pi} - J_M = 0$. Из уравнений (2.13), (2.15) и (2.16) при $U = 0$ получим:

$$J_S = S \cdot e \cdot \mu \cdot n_S \cdot E_S, \quad (2.17a)$$

$$J_S = S \cdot e \cdot \mu \cdot N_S \frac{U_K}{L} \exp\left(\frac{-\varphi_M}{k \cdot T}\right). \quad (2.17b)$$

Эти уравнения определяют ток, создаваемый потоком электронов из полупроводника в металл под действием контактного поля $E_K = U_K / L$. Но при равновесии $J_{\Pi} = J_M$. Это значит, что из металла в полупроводник течёт такой же электронный ток J_M , но он имеет диффузионную природу, так как в слое объёмного заряда $n = n(x)$ концентрация свободных электронов зависит от координаты. При подаче напряжения U из тех же уравнений (2.13), (2.15) и (2.16) получим, что диффузионный поток электронов из металла через барьерный слой в полупроводнике создает ток:

$$J_S = S \cdot e \cdot \mu \cdot N_S \frac{U_K + U}{L} \exp\left(\frac{-\varphi_M}{k \cdot T}\right). \quad (2.18)$$

Видно, что напряжение U увеличивает диффузионный ток (сравните уравнения (2.16) и (2.17)). Связано это с тем, что напряжение U изменяет вид распределения $n(x)$. Однако обратный поток электронов из полупроводника в металл j изменяется из-за изменения высоты потенциального барьера со стороны полупроводника под влиянием напряжения U (рис. 2.7):

$$J_{\Pi} = J_M \cdot \exp\left(\frac{e \cdot U}{k \cdot T}\right). \quad (2.19)$$

В итоге результирующий ток $J = J_{\Pi} - J_M$ будет равен:

$$J = J_S \left(\exp\left(\frac{e \cdot U}{k \cdot T}\right) - 1 \right), \quad (2.20)$$

что по форме совпадает с уравнением (2.10), но только ток насыщения j_s определяется не уравнением (2.11), а уравнением (2.18). Используя (2.5), получим:

$$J_S = S \cdot e \cdot \mu \cdot N_S \frac{U_K + U}{L} \exp\left(\frac{-(e \cdot U + F)}{k \cdot T}\right). \quad (2.21)$$

Эта теория получила название диффузионной теории. ВАХ, даваемая уравнением (2.18), показана на рис. 2.8 (кривая 2). Ток «насыщения» J_s из (2.16) теперь зависит от приложенного напряжения, что часто наблюдается экспериментально.

В литературных источниках уравнение (2.21) принято представлять в виде:

$$J_s = S \cdot e \cdot \mu \cdot n_0 \frac{U_K + U}{L} \exp\left(\frac{-e \cdot U_K}{k \cdot T}\right), \quad (2.22)$$

где $n_0 = N_S \cdot \exp\left(\frac{-F}{k \cdot T}\right)$;

n_0 – концентрация свободных электронов в глубине полупроводника (при $x > L$).

В заключение отметим, что слой объёмного заряда L получил название запирающего слоя, а потенциальный барьер – барьера Шоттки. Напряжение $U > 0$ называется прямым, а $U < 0$ – обратным. Поэтому соответственно говорят о прямых и обратных токах через контакт.

Одностороннюю проводимость контактов металл – полупроводник используют для изготовления полупроводниковых усилителей переменного тока. Для выпрямления технических токов низкой частоты ($f = 50$ Гц) широко применяют селеновые выпрямители, в которых запирающий слой образуется у границы слоя Se и металлического электрода. Металлический электрод обычно состоит из сплава различных металлов (например, Bi, Cd и Sn). Для выпрямления токов высокой частоты применяют германиевые и кремниевые «точечные» СВЧ-детекторы. К пластине полупроводника прижимается или приваривается металлическая проволока малого диаметра (микроны).

Контакты металл–полупроводник разных других конфигураций широко используют для создания быстродействующих нелинейных элементов, которые часто называются диодами Шоттки. В уравнениях (2.10) диодной теории и (2.19) диффузионной теории величины токов J_{Π} и J_s определяются при $U \rightarrow 0$. Воспользуемся уравнением вольт-амперной характеристики диффузионной теории и определим дифференциальное сопротивление p - n перехода при очень малых значениях напряжения.

$$\ln R = \frac{e \cdot U_K}{k \cdot T} + \ln A, \quad (2.23)$$

где $A = \ln j_0 + \ln \frac{U_K}{L} + \ln \frac{k \cdot T}{e}$.

Графическая зависимость $\ln R - 1/T$ позволяет определить величину контактной разности потенциалов U_K :

$$\frac{\Delta \ln R}{1/T} = \frac{e \cdot U_K}{k}. \quad (2.24)$$

Тангенс угла наклона экспериментальной зависимости $\ln R - 1/T$, домноженный на параметр ke , дает значение U_K :

$$U_K = \frac{k}{e} \cdot \frac{\Delta \ln R}{1/T}. \quad (2.25)$$

Если все величины имеют размерность системы СИ, то величина контактной разности потенциалов U_K выражена в вольтах.

2.4. Задачи и упражнения к разделу №2

2.4.1 Общие рекомендации по решению задач и упражнений

В настоящем пособии рассматриваются вопросы построения энергетических диаграмм в контактных системах типа:

- "Металл №1 - Металл №2";
- "Металл - полупроводник".

Подобные системы нашли широкое распространение в элементах конструкций современных микроэлектронных устройств при реализации активных и пассивных компонентов.

Материалы представлены в виде задач и упражнений (преимущественно в графическом виде). При выполнении работ от студента требуется:

- раскрыть содержание представленных графических отображений с физико-технической точки зрения;
- решить предложенные варианты задач по рассматриваемой тематике и построить графическое отображение;
- дать развернутое определение элементам графического отображения, выделенных на графиках с помощью стрелок.

В целях облегчения восприятия учебного материала на начальном этапе освоения в графических материалах использованы цветовые отли-

чия ряда графических элементов в энергетических диаграммах. Список использованных графических и символьных элементов представлен в табл. 2.1.

Т а б л и ц а 2.1. Условные графические и символьные отображения, используемые в задачах и упражнениях

№ п/п	Условное обозначение графического или сим- вольного элемента	Физический смысл графического или символьного элемента
1		Уровень Ферми металла
2		Уровень Ферми полупроводника
3		Энергетический уровень дна зоны проводимости полупроводника
4		Энергетический уровень потолка валентной зоны полупроводника
5		Энергетический уровень в пределах вакуумного зазора
6		Нулевой уровень энергии
7	q	Электрический заряд электрона
8	U	Электрический потенциал внешнего источника питания
9	$W_{\text{вых}}$	Работа выхода электрона из твердого тела
10	d	Протяженность вакуумного зазора между контактирующими материалами
11	d_n	Протяженность приповерхностной области полупроводника с избыточным электрическим зарядом
12	N	Условное обозначение донорной области полупроводника
13	p	Условное обозначение акцепторной области полупроводника
14	k	Постоянная Больцмана
15	T	Абсолютная температура, ° К
16	E_k	Напряженность электрического поля в контактной области
17	μ_n	Электрохимический потенциал полупроводника донорного типа
18	μ_p	Электрохимический потенциал полупроводника акцепторного типа

В ряде графических примеров специально допущены ошибки в построениях энергетических диаграмм. В этих, «неправильных», случаях

необходимо обосновать физическую суть допущенных в приведенных рисунках противоречий (обратить особое внимание на протяженность обедненных областей с учетом концентраций основных носителей зарядов).

2.4.2. Контактные явления в системах "Металл №1 - Металл №2"

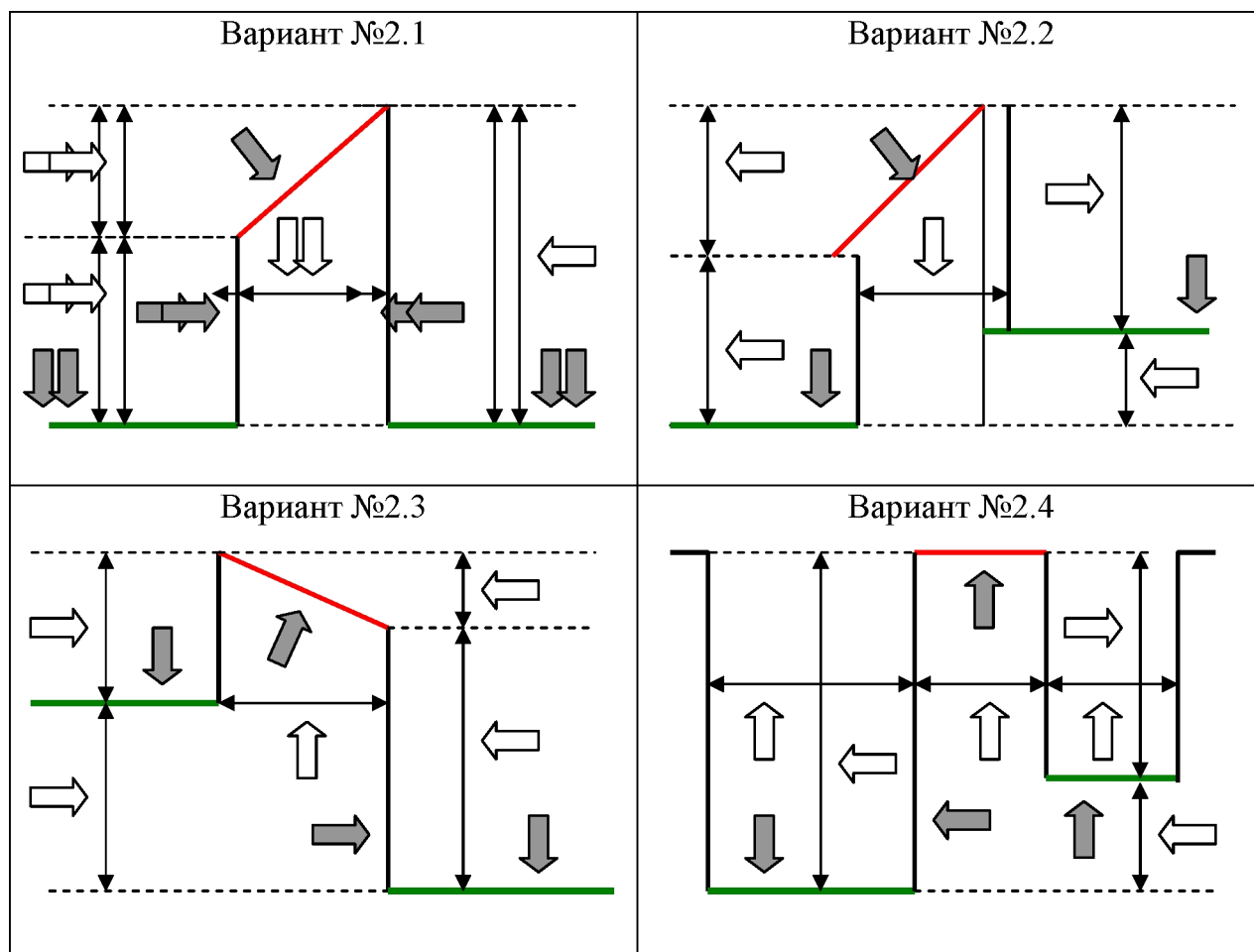
Построение энергетических диаграмм производится на основании зонных энергетических диаграмм металлов, принимающих участие в создании контактной системы.

При построении энергетических диаграмм в контактных системах с участием только металлов необходимо учитывать следующие моменты:

- В начальный момент времени ($t = 0$) оба вещества имеют одинаковое расположение "0" энергетического уровня.
- После установления равновесия в системе оба металла имеют одинаковое расположение уровня Ферми.
- Вещество с меньшей работой выхода выступает в качестве эмиттера электронов, а вещество с большей работой выхода выступает в качестве акцептора электронов.
- После установления равновесия в контактной системе приповерхностная область (толщиной порядка $1 \text{ \AA}$) вещества с меньшей работой выхода приобретает положительный заряд.
- После установления равновесия в контактной системе приповерхностная область (толщиной порядка $1 \text{ \AA}$) вещества с большей работой выхода приобретает отрицательный заряд.
- Величина поверхностного заряда, появляющаяся на поверхностях раздела (благодаря перешедшим электронам из вещества с меньшей работой выхода в вещество с большей работой выхода) в результате установления равновесия составляет по порядку величины 10^{12} электрон/см² (для справки: количество электронов, находящихся на поверхности металла, составляет по порядку величины 10^{15} электрон/см², а в объеме – 10^{23} электрон/см³).
- После установления равновесия в контактной системе в вакуумном зазоре устанавливается контактная разность потенциалов (КРП), обусловленная разностью работ выхода веществ, принимающих участие в создании контактной системы.

- Отрицательный потенциал внешнего источника электропитания (батареи) смещает уровень Ферми вещества вверх на величину, равную $q \cdot U$, где: q - заряд электрона; U - потенциал источника.

Ниже представлены задачи и упражнения по тематике «Контактные явления в системах: "Металл №1 - Металл №2"»



Вариант №2.5 Построить энергетическую диаграмму системы “ $M_1 - M_2$ ”		Вариант №2.6 Построить энергетическую диаграмму системы “ $M_1 - M_2$ ”	
А). $W_{\text{вых } 1} = 4.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 1.0 \text{ эВ.}$ $d = 10 \text{ А.}$	Б). $W_{\text{вых } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $d = 20 \text{ А.}$	А). $W_{\text{вых } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В; } U_2 = +3 \text{ В.}$	Б). $W_{\text{вых } 1} = 2.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В; } U_2 = +2 \text{ В.}$
В). $W_{\text{вых } 1} = 4.0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 4.0 \text{ эВ.}$ $d = 30 \text{ А.}$	Г). $W_{\text{вых } 1} = 0.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $d = 40 \text{ А.}$	В). $W_{\text{вых } 1} = 4.0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В; } U_2 = -4 \text{ В.}$	Г). $W_{\text{вых } 1} = 0.5 \text{ эВ.}$ $W_{\text{вых } 2} = 3.0 \text{ эВ.}$ $U_1 = 0 \text{ В; } U_2 = -5 \text{ В.}$

Вариант №2.7 Построить энергетическую диаграмму контактной системы “ $M_1 - M_2 - M_3$ ”
--

А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 4 \text{ эВ.}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 6 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 0 \text{ эВ.}$
Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 4 \text{ эВ.}$	Ж). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	З). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 0 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	И). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$	К). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ.}$ $W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$

Вариант №2.8 Построить энергетическую диаграмму контактной системы "M ₁ -M ₂ -M ₃ "	
А). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В; } U_2 = 0 \text{ В; } U_3 = -2 \text{ В}$	Б). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 1 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В; } U_2 = 0 \text{ В; } U_3 = -2 \text{ В}$
В). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 1 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 5 \text{ В; } U_2 = 4 \text{ В; } U_3 = -3 \text{ В}$	Г). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 1 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В; } U_2 = 0 \text{ В; } U_3 = 2 \text{ В}$
Д). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 2 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В; } U_2 = 6 \text{ В; } U_3 = -1 \text{ В}$	Е). $W_{\text{ВЫХ } 1} = 4 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 2} = 3 \text{ эВ; } W_{\text{ВЫХ } 3} = 3 \text{ эВ.}$ $U_1 = 1 \text{ В; } U_2 = 2 \text{ В; } U_3 = -1 \text{ В}$

2.4.3. Контактные явления в системах «Металл - Полупроводник»

Построение энергетических диаграмм производится на основании зонных энергетических диаграмм металлов и полупроводников, принимающих участие в создании контактной системы.

При построении энергетических диаграмм в контактных системах с участием полупроводников (хотя бы в качестве одного из элементов системы) необходимо учитывать следующие моменты:

- Общая методология построения энергетических диаграмм контактных систем с участием полупроводников аналогична методике построения диаграмм для систем "Металл №1 - Металл №2".

- Основное отличие энергетических диаграмм контактных систем с участием полупроводников (в отличие от диаграмм контактных систем с участием только металлов) состоит в том, что объемная концентрация носителей зарядов в собственных ($10^{10} - 10^{14}$ электрон/см³) и примесных ($10^{15} - 10^{19}$ электрон/см³) полупроводниках гораздо ниже объемной концентрации носителей зарядов в металлах (10^{23} электрон/см³).

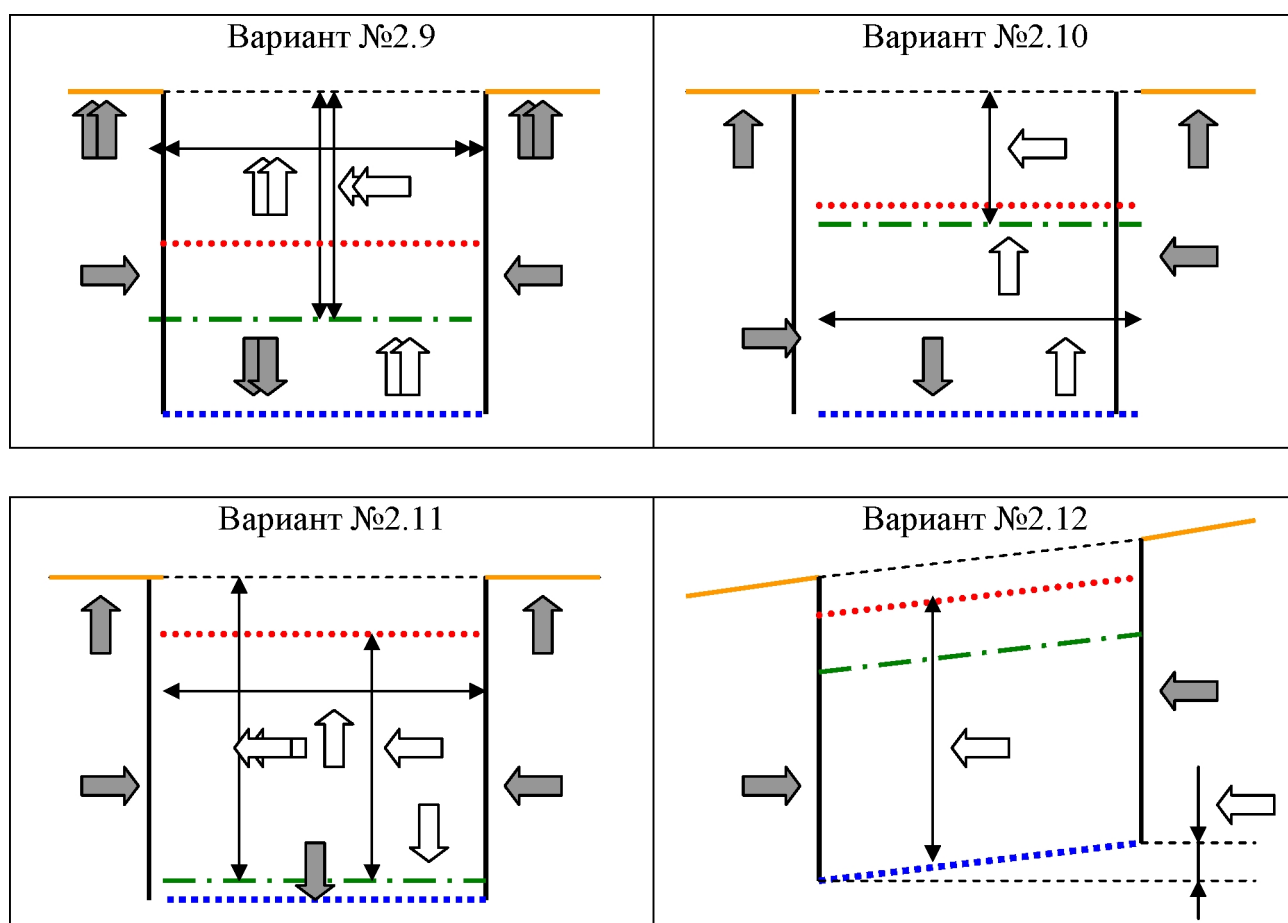
- В энергетических диаграммах контактных систем с участием полупроводников не отображается участок, соответствующий области вакуумного зазора (последнее обусловлено тем обстоятельством, что протяженность области вакуумного зазора – d (порядка $10 \text{ \AA}$) существенно

меньше протяженности приповерхностной области объемного заряда в полупроводниках – $d_{\text{п}} (10^3 - 10^5 \text{ \AA})$.

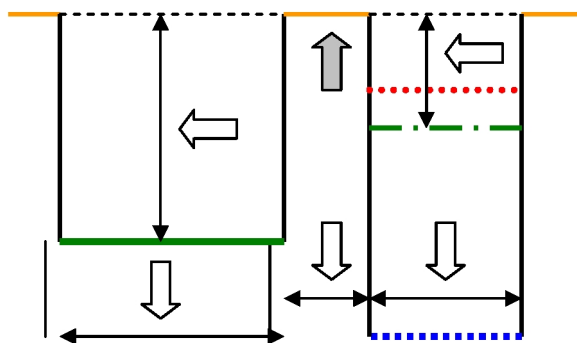
- Приповерхностная область объемного заряда в полупроводниках может быть обеднена (запорный слой) или обогащена основными носителями зарядов (зависит от того, какие носители зарядов приходят (уходят) в полупроводник в процессе установления термодинамического равновесия).

- На участке, соответствующем приповерхностной области объемного заряда в полупроводниках, отображается фактор изгиба энергетических уровней (зон) как реакция на тот факт, что на этом участке существует электрическое поле, способствующее образованию контактной разности потенциалов.

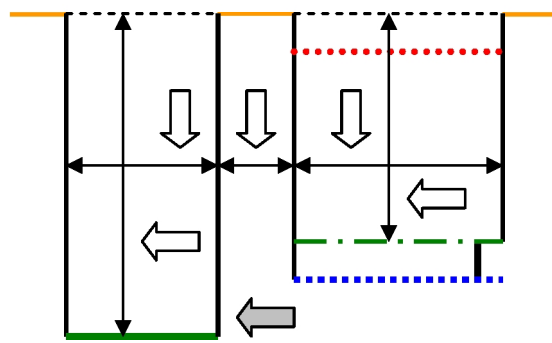
Варианты задач и упражнений по тематике «Контактные явления в системах "Металл - Полупроводник"»



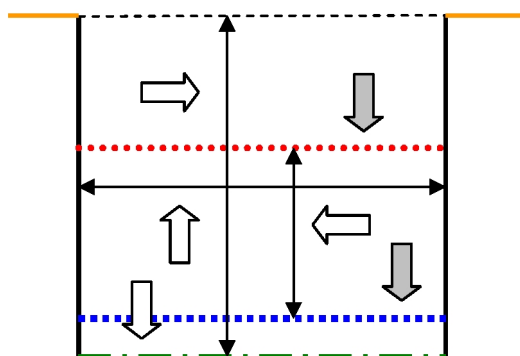
Вариант №2.13



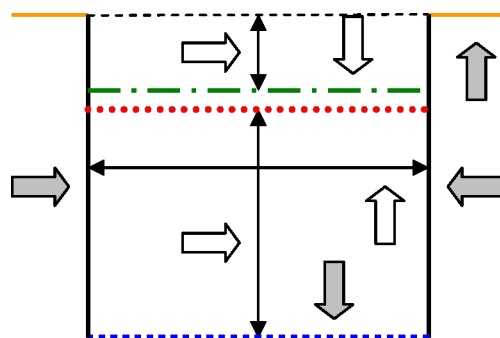
Вариант №2.14



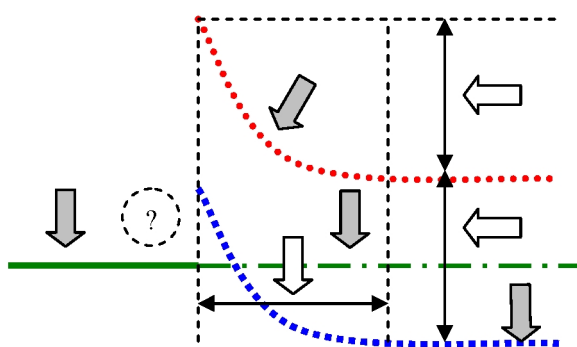
Вариант №2.15



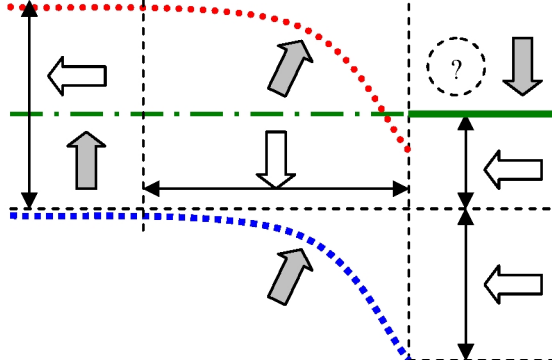
Вариант №2.16



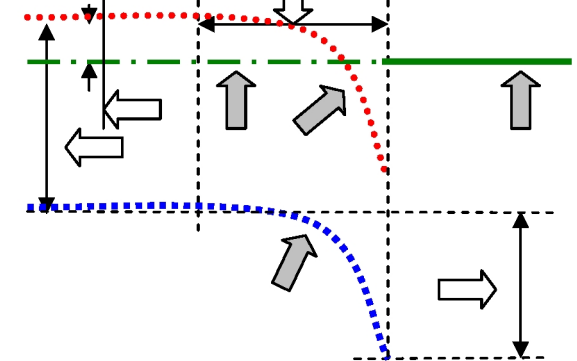
Вариант №2.17



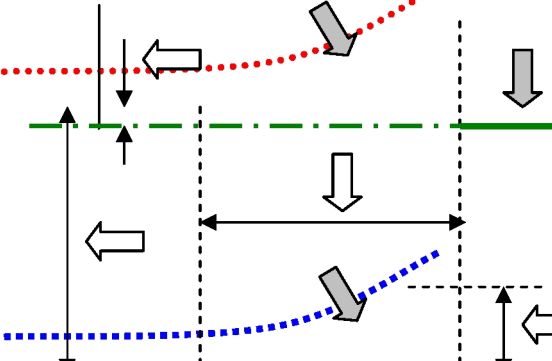
Вариант №2.18

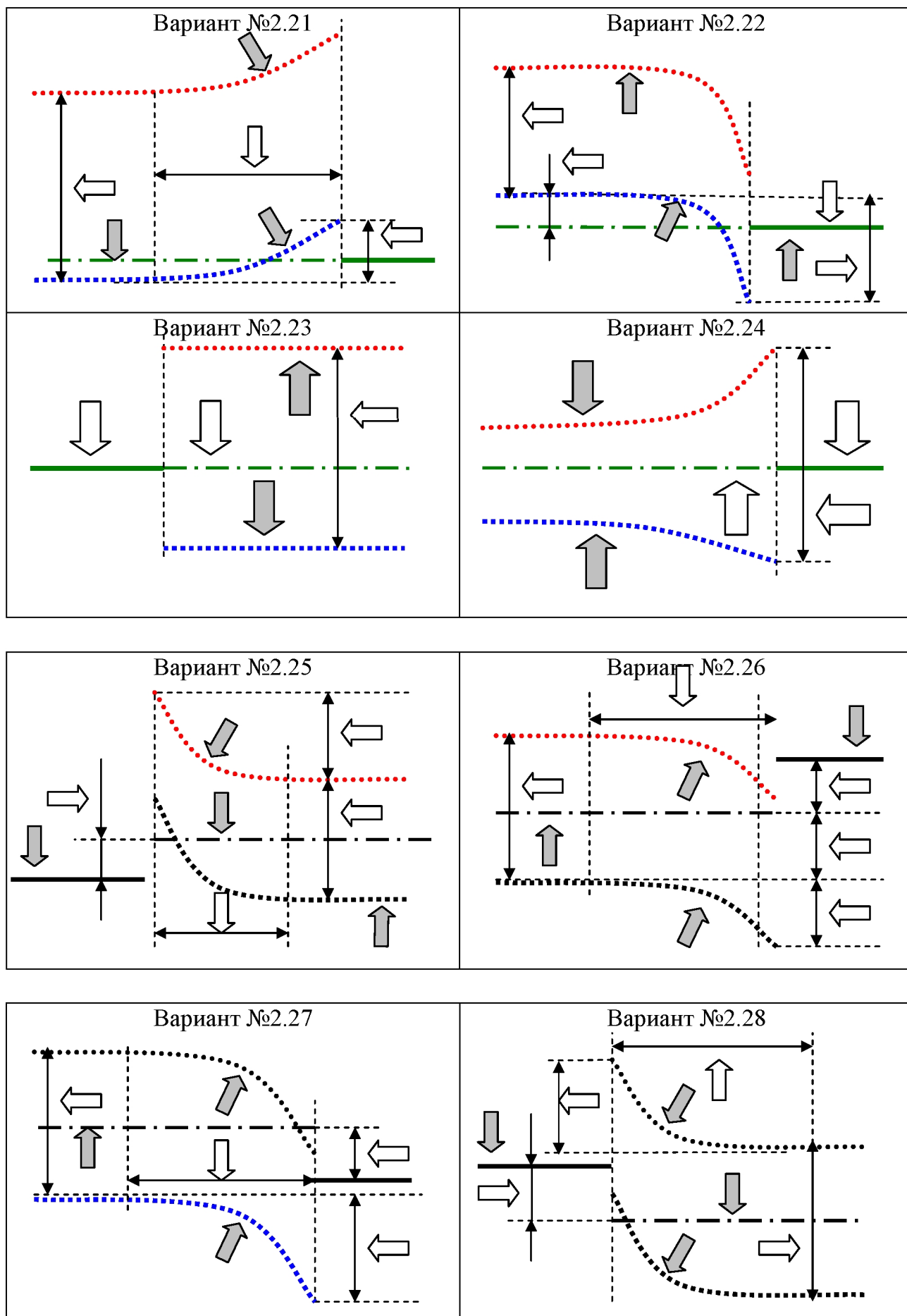


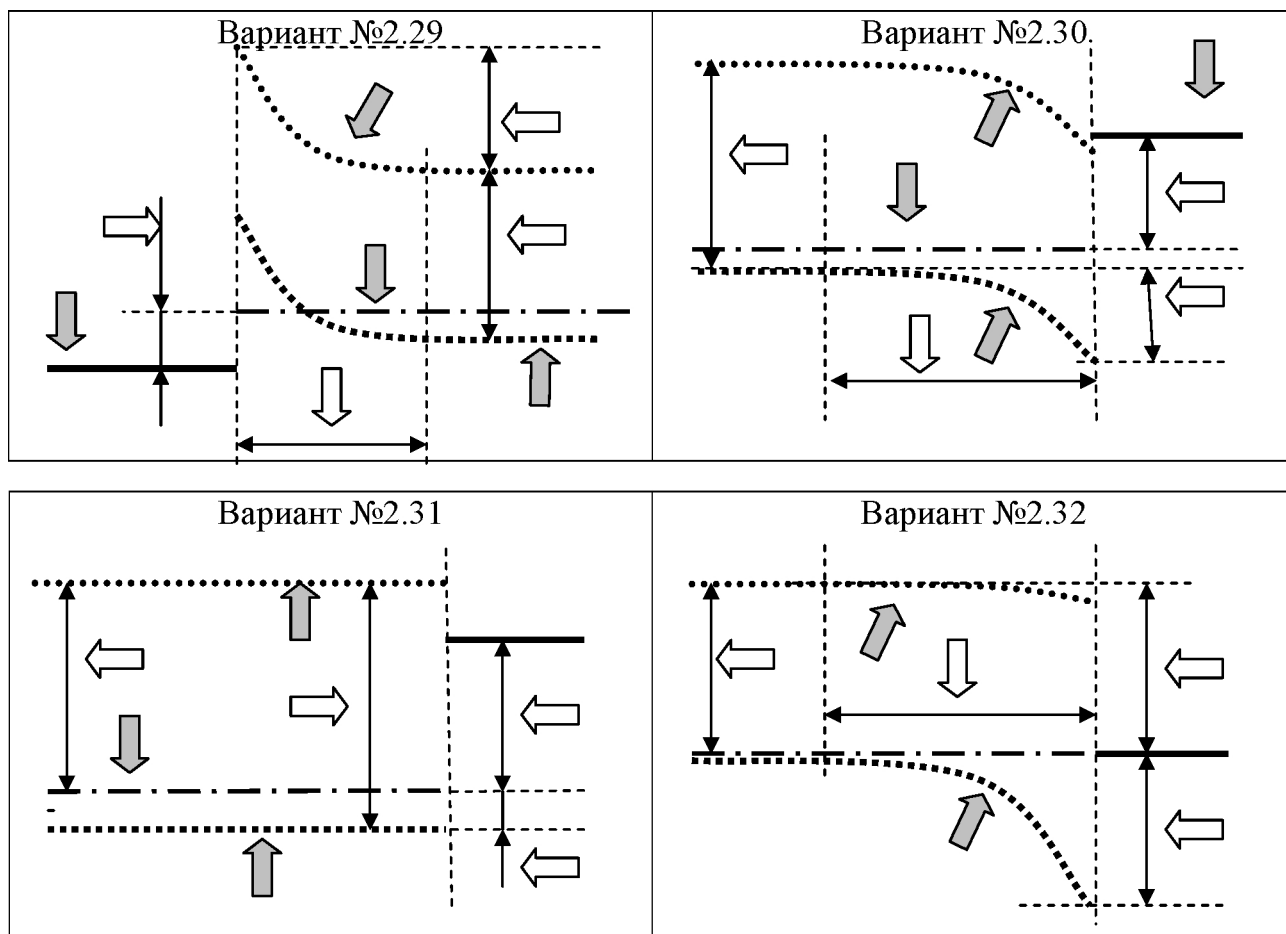
Вариант №2.19



Вариант №2.20







Вариант №2.33 Построить энергетическую диаграмму контактной системы «М–П/П _г »			
А). $W_M = 4.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.	Б). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	В). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 4.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Г). $W_M = 0.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0.5$ эВ.
Д). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0$ эВ.	Е). $W_M = 1$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Ж). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 3.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	З). $W_M = 2$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.
Вариант №2.34 Построить энергетическую диаграмму контактной системы «М–П/П _д »			
А). $W_M = 4.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.	Б). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	В). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 4.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Г). $W_M = 0.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0.5$ эВ.
Д). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0$ эВ.	Е). $W_M = 1$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Ж). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 3.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	З). $W_M = 2$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.
Вариант №2.35 Построить энергетическую диаграмму контактной системы «М – П /П _а »			
А). $W_M = 4.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.	Б). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	В). $W_M = 1.5$ эВ. $W_{п/п} = 4.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Г). $W_M = 0.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0.5$ эВ.
Д). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 1.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 0$ эВ.	Е). $W_M = 1$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 1$ эВ.	Ж). $W_M = 2.5$ эВ. $W_{п/п} = 3.0$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 2$ эВ.	З). $W_M = 2$ эВ. $W_{п/п} = 2$ эВ. $\Delta W_{п/п} = 3$ эВ.

3. ЭНТРОПИЙНЫЕ МЕТОДЫ И ПОКАЗАТЕЛИ КАЧЕСТВА МИКРО- И НАНОТЕХНОЛОГИЙ

3.1 Цели и задачи энтропийного подхода

Для современных интегральных электронных устройств характерна чрезвычайно высокая степень упорядоченности материальных сред, обеспечивающая функциональное качество устройств. В практическом плане это обстоятельство приводит к необходимости развития технологической базы, способной реализовать элементы конструкций субмикронных размеров. В этой связи все большую роль приобретают вопросы обеспечения топологического и континуального порядка физических сред, уровень проработки которых в настоящее время недостаточен для практических целей. Достигнутые и перспективные уровни микроминиатюризации оперируют с физическими объемами менее 10^{-6} мкм³, что обуславливает проблематичность использования в конструкторско-технологической практике макроскопических подходов анализа, основанных на методах физики сплошных сред. Состояние отмеченных выше моментов стимулирует развитие нетрадиционных методов анализа технологических процессов, позволяющих объединить микро- и макроскопические подходы.

Целью настоящего раздела является разработка энтропийных показателей качества микро- и нанотехнологий, основанных на базовых принципах теории информации, что позволит:

- 1) ввести в конструкторско-технологическую практику универсальные критерии качества технологических процессов и сложности изделий независимо от функционального назначения последних;
- 2) установить уровень информационного обеспечения технологии создания изделия, необходимый для достижения приемлемых с практической точки зрения производственно-технических показателей;
- 3) обеспечить эффективный диалог между конструктором и технологом изделий на основе единых с методологической точки зрения представлений о процессе создания изделий новой техники;
- 4) сблизить микро- и макроскопические подходы и методы анализа материальных сред и функциональных факторов в конструкторско-технологической практике создания изделий;

5) определить необходимый уровень априорного запаса качества изделия, необходимого для обеспечения заданного срока службы изделия в регламентированных условиях эксплуатации;

6) оценить целесообразный (предельно достижимый) уровень обеспечения упорядоченности материальных (атомно-молекулярных) сред в изделии в зависимости от интенсивности воздействующих возмущающих факторов среды эксплуатации;

7) разработать в обозримом будущем методы и подходы, необходимые при анализе параметров стабильности технологических процессов атомной сборки изделий с учетом интенсивности проявления факторов флуктуационной природы.

Рассматриваемая энтропийная модель и критерии оценки качества технологических процессов применимы к технологическим процессам и изделиям любого типа (вне зависимости от функционального назначения изделия), однако их практическая эффективность тем выше, чем больше сложность изделия в части уровня требований к атомно-молекулярной упорядоченности твердотельных структур. В этой связи приведенные результаты количественных оценок относятся в основном к изделиям нано- и микроэлектроники, для которых характерна весьма высокая степень упорядоченности материальных сред в элементном и структурном отношениях.

3.2. Формальное представление технических объектов и технологии их создания

Пусть имеется некоторый объем физического пространства V , в пределах которого необходимо реализовать техническое изделие с заданным функциональным назначением. Не умаляя общности рассмотрения, указанный объем может быть представлен в виде совокупности упорядоченных N ячеек размещения индивидуальных атомов определенного типа. Имеется также рабочая среда, содержащая $(m + 1)$ типов атомов как необходимого для заполнения индивидуальной ячейки размещения, так и нежелательного (примесного) характера (в количестве m типов). Процесс создания изделия состоит в размещении определенных типов атомов в индивидуальных ячейках объема V . Результат размещения атомов считается удачным, если он обеспечивает появление в изделии необходимого функционального назначения.

В качестве примера подобного упорядоченного размещения атомов можно рассмотреть диодную структуру, реализованную на основе полупроводникового плавного р-п перехода. На рис. 3.1 представлены (в одномерном приближении) зависимости концентраций донорной $C_d(x)$ и акцепторной $C_a(x)$ примесей от глубины залегания x слоя легирующей примеси в р-п переходе. Характерная особенность р-п перехода состоит в том, что он с термодинамической точки зрения является неравновесной структурой (как и любое другое изделие), и поэтому во временной эволюции испытывает тенденцию к разрушению искусственно созданной структурой.

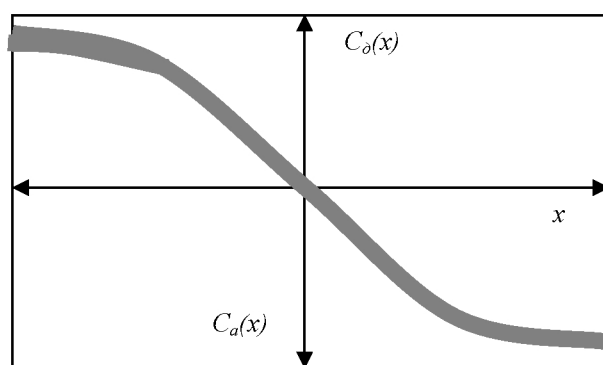


Рис. 3.1. Зависимости концентраций донорной $C_d(x)$ и акцепторной $C_a(x)$ примесей от глубины залегания x слоя легирующей примеси

Темной штриховкой на рисунке обозначена область допустимых (с точки зрения конструктора изделия) вариаций концентрационных зависимостей, обеспечивающих функциональное назначение (качество) диодной структуры. Следует отметить тот факт, что данное изделие является вырожденной конструкцией (ансамблем), поскольку в этом случае необходимое функциональное назначение изделия может быть реализовано чрезвычайно большим количеством частных кривых распределения примесей, находящихся в пределах оговоренной штриховой области (негативным следствием вырожденности конструкции изделия является появление начального разброса функциональных параметров изделия). Последнее обстоятельство облегчает (в ряде случаев существенно) процесс изготовления изделия, ибо допускает определенную нестабильность технологических процессов, а следовательно, способствует повышению выхода годных изделий. Поэтому, с точки зрения практических интересов технолога, желательно, чтобы эта область была максимально широкой. Таким образом, видно, что интересы конструктора и технолога изделия диаметрально

расходятся в части их отношения к допустимому уровню вырожденности изделия, и их взаимоотношения должны строиться на компромиссных началах. Следует, однако, отметить, что в настоящее время конструктивная основа для принятия подобного рода компромиссов отсутствует, что переводит эту проблематику в плоскость волевых решений, и, как правило, в пользу интересов конструктора изделия, поскольку именно они являются инициаторами изделий новой техники. Это приводит к тому, что технолог постоянно вынужден «догонять» в своей практической деятельности запросы конструктора. В подобной ситуации, с учетом тенденции непрерывного возрастания сложности изделий, отсутствие единой методологической базы на пути установления упомянутого компромисса выступает в качестве сдерживающего фактора, поскольку конструктор не может предъявить технолог объективную количественную меру необходимого уровня технологического обеспечения при создании изделий новой техники. Это вынуждает технолога «вслепую», методом проб и ошибок, разрабатывать необходимое технологическое обеспечение (как правило, на основании имеющейся у него технологической базы), не располагая возможностью точно оценить несоответствие информационных потенциалов (см. ниже) изделия и технологии.

В рамках рассматриваемого подхода под технологией создания изделия следует понимать комплекс мер, направленных на повышение вероятности размещения атомов необходимого типа в определенных ячейках объема V (такой «нейтральный» подход не противоречит интересам и конструктора, и технолога, и в то же время сближает их позиции в методологическом плане).

Очевидно, что факту отсутствия технологии как таковой (назовем это условно "случайной технологией") соответствует множество реализаций размещения атомов мощностью:

$$N_c = (m + 1)^N, \quad (3.1)$$

где N - количество ячеек размещения в объеме V , необходимых для создания изделия.

Наличие такого фактора как технология в процессе создании изделия обеспечивает избирательный характер размещения атомов в элементарные ячейки объема V , что позволяет существенно уменьшить количество различных реализаций изделия до уровня $N_t \ll N_c$ (следует отметить, что понятие избирательности технологии включает в своем составе не только

факторы химического (элементного) состава, но и факторы структурного характера). Последнее обстоятельство предполагает включение в указанную совокупность $(m+1)$ типов атомов и структурных микрообъектов, например дефектов кристаллической структуры, таких как «атомная вакансия», «примесный атом» и т. д.

Как правило, не все реализации множества N_I обеспечивают необходимое функциональное качество изделия. Обозначим посредством N_i совокупности реализаций, обеспечивающих функциональное качество изделия. Тогда, в свете принятого подхода, практическая эффективность технологии создания изделия будет всецело определяться степенью перекрытия множеств реализации N_I и N_i . В частности, при выполнении условия $N_i < N_I$ выход годных изделий составит 100% (если только множества N_I и N_i не смещены относительно друг друга).

3.3. Показатели качества технологий на микроскопическом уровне рассмотрения

Рассматривая процесс размещения атома в индивидуальной ячейке объема V как случайное событие, для энтропии единичного размещения на атомном уровне имеем:

$$h_i = - \sum_{i=1}^{(m+1)} p_i \cdot \lg p_i, \quad (3.2)$$

где h_i – энтропия единичного размещения при наличии технологии;

p_i – вероятность размещения в индивидуальной ячейке атома i -го типа.

Выражение (3.2) является базовым для последующего рассмотрения энтропийного подхода. Однако его практическое использование сопряжено с трудностями, обусловленными необходимостью определения значений параметров p_i для всей совокупности атомов примесного характера. В этой связи введем в рассмотрение понятие избирательности технологии α в виде отношения вероятности размещения необходимого атома к суммарной вероятности размещения остальных m типов атомов, выступающих в качестве нежелательной примеси. Следует отметить, что для современного уровня развития технологии обработки материалов вероятность размещения необходимого атома $P \approx 1$. В этой связи количественную оценку параметра α можно произвести согласно выражению

$$\alpha = n_0/n, \quad (3.3)$$

где n_0 – полная концентрация атомов в технологических рабочих средах, включая как необходимые атомы, так и атомы примесного характера;
 n – полная концентрация атомов примесного характера.

С учетом допущения о равновероятности размещения примесных атомов и выражения (3.2) для энтропии размещения единичного атома имеем:

$$h_t = \frac{\lg m + (\alpha + 1) \cdot \lg(\alpha + 1) \cdot \alpha \cdot \lg \alpha}{\alpha + 1}. \quad (3.4)$$

Примем в качестве показателя качества технологии на микроскопическом (атомном) уровне рассмотрения параметр

$$K = (h_c - h_t)/h_c, \quad (3.5)$$

где $h_c = \lg(m + 1)$ – энтропия единичного размещения атома при случайной технологии.

В табл. 3.1 представлены значения рассмотренных показателей (K , α , h_b , h_c) при значении параметра $m = 100$, характерные для различных уровней технологии (определение параметра α проведено на основании предельно допустимой концентрации атомов примесного характера согласно выражению (3.3)).

Первые две позиции табл. 3.1 характеризуют соответственно перспективный (наноэлектроника) и достигнутый (микроэлектроника) уровни технологий, используемых при создании современных интегральных схем.

Данные позиции № 3 позволяют оценить уровень технологий, используемых в микроэлектронике, по отношению к возможностям макротехнологий, используемых в других отраслях техногенной деятельности.

Данные позиции № 5 (исходные атомно-молекулярные характеристики взяты из специальных источников) являются своеобразными ориентирами показателей качества антропогенных технологий. В позиции № 6 приведены значения предельно достижимых энтропийных показателей в зависимости от показателей температурных режимов проведения технологических процессов и энергии активации элементарных физико-химических процессов (использовано допущение о термоактивационном механизме элементарных физико-химических процессов).

Данные позиции № 6 свидетельствуют о проблематичности достижения избирательности $\alpha > 10^8$ (характерной для устройств микроэлектроники) при температурах проведения технологических процессов более 600°K

и энергиях активации элементарных процессов порядка $0,5 \div 1,0$ эВ. Данные позиции № 4 позволяют оценить абсолютный уровень развития всех типов технологий – от макро- до нанотехнологий.

Т а б л и ц а 3.1 Зависимость избирательности технологии α , энтропии единичного размещения h_i и показателя качества технологии K от уровня технологии (при: $m=100$)

№ п/п	Уровень технологии	α	h_i	K
1	Нанотехнология (нанoeлектроника)	$>10^{10}$	1×10^{-9}	$0,9^{(9)}$
2	Микротехнология (микроэлектроника)	10^8	1×10^{-7}	$0,9^{(7)}$
3	Макротехнология (машиностроение)	10^4	8×10^{-4}	0,9996
4	Случайный (отсутствие технологии)	10^{-2}	2 . 004	0
5	Биологический (ДНК):			
	а) уровень нуклеотида	$>10^{10}$	$<1 \times 10^{-9}$	$>0,9^{(9)}$
	б) атомный уровень	$>10^{12}$	$<1 \times 10^{-11}$	$>0,9^{(11)}$
6	Критический (флуктуационный):			
	а) $W = 1$ эВ $T = 300$ К	10^{21}	2×10^{-20}	$0,9^{(20)}$
		10^9	1×10^{-8}	$0,9^{(8)}$
	б) $W = 0,5$ эВ $T = 300$ К	10^9	1×10^{-8}	$0,9^{(8)}$
		10^5	1×10^{-5}	$0,9^{(4)}$

Примечание: запись вида $0,9^{(3)}$ означает 0,999.

3.4 Показатели качества технологий на макроскопическом уровне рассмотрения

Непосредственный анализ энтропийных показателей качества на макроскопическом уровне рассмотрения сопряжен со значительными трудностями, обусловленными необходимостью учета условных энтропий всевозможных реализаций атомных последовательностей длиной N . Однако учитывая тот факт, что в реальной технологической практике создания элементов конструкций микроэлектронных устройств параметры $\alpha > 10^4$ и $N > 10^6$ (при минимальном объеме элементов устройства более 10^{-6} мкм³) можно считать, что технологический процесс является энтропийно устойчивым. В этом случае, согласно теореме об асимптотической равновероятности индивидуальных случайных реализаций, полное множество реализаций, включающих в себя N атомов (элементов), может быть представлено в виде суммы двух подмножеств, одно из которых имеет ну-

левую суммарную вероятность его проявления, а другое, с существенно меньшей мощностью, состоит из совокупности равновероятных реализаций. Таким образом, для энтропии технологического процесса, используемого при создании атомной структуры содержащей N элементов (атомов), имеем:

$$H_t = N \cdot h_t = \lg N_t, \quad (3.6)$$

где N_t – мощность множества равновероятных реализаций с учетом фактора избирательности технологии.

В табл. 3.2 представлены значения энтропии H_t в зависимости от физического объема устройства и уровня технологии, используемого при его создании.

Т а б л и ц а 3.2 Зависимость энтропии макроскопических объектов H_t от их объема и уровня технологии (при $t = 100$)

№	Уровень технологии	Объем устройства			
		1мм ³	1мкм ³	10 ⁻³ мкм ³	10 ⁻⁶ мкм ³
1	Перспективный (нанотехнология)	1 · 10 ¹⁵	1 · 10 ³	1 · 10 ⁰	1 · 10 ⁻³
2	Высокий (микротехнология)	1 · 10 ¹⁷	1 · 10 ⁵	1 · 10 ²	1 · 10 ⁻¹
3	Случайный	2 · 10 ²⁴	2 · 10 ¹²	2 · 10 ⁹	2 · 10 ⁶

Использование допущения в форме выражения (3.6) приводит к равенству показателей качества технологии на микро- и макроскопических уровнях рассмотрения. Представляется очевидным, что в реальной производственной практике показатель качества технологии на макроскопическом уровне рассмотрения должен быть непосредственно связан со сложностью изделия (см. ниже выражение (3.9)). С позиций энтропийного подхода в качестве объективной меры сложности устройства C следует принять показатель вида:

$$C = (H_c - H_i) / H_c, \quad (3.7)$$

где $H_c = \lg N_c$ – энтропия в отсутствие технологии как таковой;

$H_i = \lg N_i$ – энтропия реализаций, обеспечивающих функциональное качество устройств.

Определение значения параметра N_i относится к проблематике конструктора изделия. Следует, однако, отметить, что в настоящее время конструктор не готов к такой постановке вопроса, а оперирует в своей деятельности макропараметрами (материальных сред и устройств) термодинамического характера. Подобный подход эффективен для устройств и

технологий их создания при $\alpha < 10^4$, для которых не играют существенной роли эффекты флуктуационной природы. В противном случае становится проблематичным использование в конструкторско-технологической практике представлений континуального характера. В этой связи возможность объединения микро- и макроскопических подходов в рамках единой методологии рассмотрения является позитивным моментом энтропийных моделей технологии создания изделий, в особенности для устройств микроэлектроники.

3.5 Показатели качества реальных технологий

Ввиду сложности определения параметра N_i прямыми методами проведем его оценку на основе традиционных производственных показателей. Из всей совокупности последних в качестве параметра, определяющего взаимосвязь между параметрами H_t и H_i , уместно рассмотреть вероятность выхода годных изделий. Представляется очевидным, что в первом приближении вероятность выхода годных изделий P зависит от соотношения между избирательностью технологии α_t и избирательностью α_i , заложенной конструктором изделия для безусловного ($P=1$) достижения функционального качества устройства (на практике, как правило, выполняется условие $\alpha_t < \alpha_i$):

$$P = \alpha_t / \alpha_i. \quad (3.8)$$

С учетом выражения (3.3) и (3.7) для необходимой энтропии единичного размещения h_i при условии $\alpha_i \gg 1$ имеем:

$$h_i = \frac{P}{\alpha_t} \cdot \lg \frac{m \cdot \alpha_t}{P}. \quad (3.9)$$

В табл. 3.3 представлены значения параметров α_i и h_i в зависимости от уровня технологии и вероятности выхода годных устройств при $m = 100$.

Т а б л и ц а 3.3 Зависимость избирательности и энтропии единичного размещения h_i от уровня технологии и вероятности выхода годных устройств (при $m = 100$)

Уровень технологии	Показатель	Вероятность выхода годных устройств				
		10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	0,5	1,0
Перспективный (нанотехнологии)	h_i	$1,5 \cdot 10^{-12}$	$1,4 \cdot 10^{-11}$	$1,3 \cdot 10^{-10}$	$6,2 \cdot 10^{-10}$	$1,2 \cdot 10^{-9}$
	α_i	10^{13}	10^{12}	10^{11}	$2 \cdot 10^{10}$	10^{10}
Высокий (микротехнологии)	h_i	$1,3 \cdot 10^{-10}$	$1,2 \cdot 10^{-9}$	$1,1 \cdot 10^{-8}$	$5,2 \cdot 10^{-8}$	10^{-7}
	α_i	10^{11}	10^{10}	10^9	$2 \cdot 10^8$	10^8

Согласно данным табл. 3.3 достижение приемлемой эффективности производства ($P > 0,1$) возможно для изделий с показателями $\alpha_i < 10^{11}$ и 10^9 соответственно для перспективного и высокого уровней технологии. В табл. 3.4 представлены значения N_i в зависимости от объема и вероятности выхода годных устройств, полученные на основании данных табл. 3.3.

Т а б л и ц а 3.4 Зависимость количества реализаций N_i от физического объема и вероятности выхода годных устройств (при $m = 100$)

Уровень технологии	Объем, мкм ³	Вероятность выхода годных устройств				
		10^{-3}	10^{-2}	10^{-1}	0,5	1,0
Перспективный (нанотехнологии) ($\alpha_i = 10^{10}$)	1	31	(14)	(130)	(620)	(10^3)
	10^{-3}	1,00	1,03	1,34	4,23	15,8
	10^{-6}	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
Высокий (микротехнологии) ($\alpha_i = 10^8$)	1	(130)	(10^3)	(10^4)	($5 \cdot 10^4$)	(10^5)
	10^{-3}	1,34	15,8	(11)	(52)	(10^2)
	10^{-6}	1,00	1,00	1,02	1,12	1,26

Примечание: запись вида (14) означает, что $\lg N_i = 14$.

Наличие в табл. 3.4 значений N_i , близких единице, свидетельствует о том, что для данных позиций конструктором закладывается, а технолог необходимо реализовать (при приемлемой вероятности выхода годных изделий) практически вырожденные конструкции, которым соответствуют единичные реализации размещения атомов. В то же время следует отметить, что для современных устройств ($V > 1$ мкм³) количество реализаций N_i при $P > 0,1$ достигает значений $N_i > 10^{130}$. В свете вышеизложенного весьма важным моментом является установление взаимосвязи между сложностью изделий (закладываемой конструктором на этапе проектирования) и возможностью их практической реализации технологом. Указанная взаимосвязь может быть установлена на основании выражений (3.4), (3.6) и (3.7) в виде:

$$P = \frac{1 - C}{1 - K}. \quad (3.10)$$

Последнее выражение устанавливает эффективность согласования конструкторских решений (параметр C) с технологическими возможностями изготовления (параметр K) устройств для типичных производственных ситуаций, удовлетворяющих условию $H_t > H_i$.

3.6 Информационный потенциал и дефицит технологии создания изделий

В соответствии с общими концепциями теории информации в качестве информационного потенциала технологий уместно рассматривать параметр вида

$$I = H_c - H_t, \quad (3.11)$$

где, в отличие от вышеизложенного, целесообразно рассматривать энтропии преобразования единичного объема физического пространства. В этом случае параметр I выступает в качестве объективной меры абсолютного уровня достижений технологии в историческом разрезе, т.е. с учетом всего практического опыта, накопленного человечеством до настоящего момента времени. Однако в повседневной практике технолога интересует не столько информационный потенциал, сколько информационный дефицит ΔI , ограничивающий выход годных изделий:

$$\Delta I = H_t - H_i. \quad (3.12)$$

С учетом выражений (3.5)-(3.7) и (3.10) имеем:

$$\Delta I = N \cdot h_t(1 - P). \quad (3.13)$$

Устранение информационного дефицита достигается посредством расширения метрологического обеспечения технологии. Отсюда следует, что минимальное количество метрологических операций, устраняющих информационный дефицит технологии, составит:

$$n = \Delta I / I_1, \quad (3.14)$$

где I_1 – информационная емкость единичной метрологической операции.

Устанавливая параметр I_1 в виде

$$I_1 = \lg(L/I), \quad (3.15)$$

где L и I соответственно диапазон измерения и погрешность измеряемой величины, и используя выражения (3.12) и (3.13), получаем:

$$n = \frac{N \cdot h_t(1 - P)}{\lg(L/I)}. \quad (3.16)$$

Для проведения количественных оценок можно использовать в первом приближении усредненное значение $\lg(L/I) = 6$, характерное для всех отраслей технической деятельности. Например, этому значению логарифма соответствует значение абсолютной погрешности 1 μ А при измерении силы тока в интервале 0 – 1 А. Параметр n определяет необходимую меру информационных потоков в системе “ рабочая среда - технология - из-

делие” с целью обеспечения негэнтропийного принципа создания техногенных объектов. В частности, для устранения информационного дефицита технологии создания изделия, реализуемого в объеме $V=1 \text{ мкм}^3$ с вероятностью выхода годных $P=0,5$, с целью обеспечения показателя $P=1$ потребуется количество метрологических операций n порядка 10^2 и 10^4 соответственно для перспективного и высокого уровней технологии.

3.7 Информационный запас качества и срок службы изделий

Атомную структуру изделия можно рассматривать как своеобразную матрицу памяти, в которой “записано” функциональное назначение изделия. Качество “записи” определяется начальной физической (конфигурационной) энтропией $S_o = k H_t$, где k – постоянная Больцмана. В процессе эксплуатации изделия в нем происходят процессы деградации на атомном уровне, что приводит к возрастанию физической энтропии и, следовательно, к “стиранию” функциональной памяти (процесс деградации можно рассматривать как процесс нежелательной “технологии” с энтропийными показателями, представленными в позиции №6 табл. 3.1).

Суммарное возрастание энтропии изделия в процессе эксплуатации ΔS может быть определено с помощью параметра “скорости производства энтропии” – ν .

$$\Delta S = \int_0^{\tau} \nu dt, \quad (3.17)$$

где τ – длительность процесса эксплуатации изделия.

Введя в рассмотрение понятия о критических уровнях физической и информационных энтропий $S_k = k \cdot H_k$ (при которых наступает полная потеря функционального качества изделия) и используя условие

$$\Delta S = S_k - S_o, \quad (3.18)$$

определяем срок службы изделия в виде уравнения интегрального типа:

$$k(H_k - H_t) = \int_0^{\tau_k} \nu dt, \quad (3.19)$$

где τ_k – предельный срок службы изделия.

Таким образом, параметр $\Delta I_k = H_c - H_t$ выступает в качестве информационного запаса качества изделия, обеспечивающего его функциональное качество на протяжении срока службы изделия τ_k .

3.8 Процесс создания микроструктур в рамках представлений теории кодирования дискретной информации

Как упоминалось выше, упорядоченные атомные микроструктуры можно рассматривать как своеобразную матрицу памяти, в которой “записано” функциональное назначение изделия. С этой точки зрения можно считать, что в атомной структуре проведено кодирование определенной дискретной информации относительно ее упорядоченности (с точки зрения реализации необходимого функционального назначения). Подобный подход позволяет при проведении анализа энтропийных параметров микроструктур использование теории кодирования дискретной информации. Возможность использования теории кодирования дискретной информации основана на том, что реальные микро- и наноструктуры могут быть представлены в виде совокупности отдельных атомно-молекулярных слоев, при этом позиция каждого атома в мономолекулярном слое может рассматриваться в качестве элемента сообщения.

На рис. 3.2 представлено схематическое отображение возможного способа информационного «кодирования» твердотельной структуры на примере упорядоченного расположения индивидуальных атомов в мономолекулярном слое.

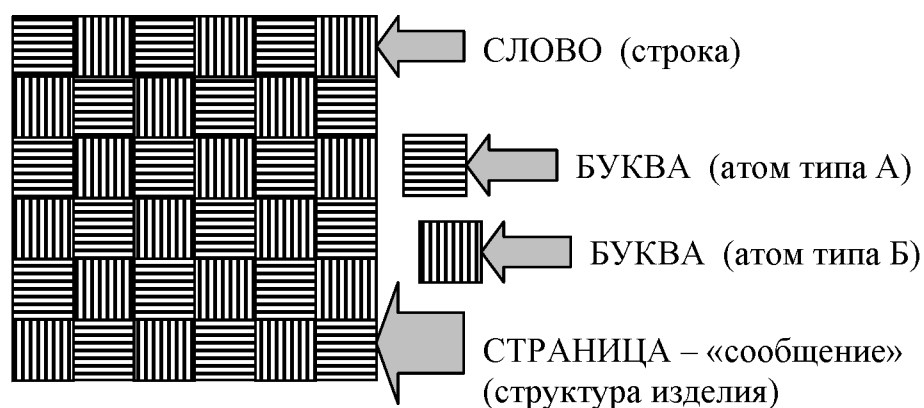


Рис. 3.2. Схематическое отображение фрагмента структуры изделия в рамках представлений теории кодирования сигналов

При выполнении кодирования предполагается заданной последовательность (как правило, большая) сообщений (объектов) $\xi_1, \xi_2, \dots$ вместе со своими вероятностями появления, т.е. последовательность случайных величин. Следовательно может быть вычислена соответствующая ей энтропия (и количество информации H , содержащееся в этой случайной последовательности).

довательности, воспринимаемой как «сообщение»). Эта информация может быть записана различными реализациями записи, в рассматриваемом случае – расположением индивидуальных атомов в пределах подложки.

Представленное выше определение количества информации целесообразно при рассмотрении процессов преобразования информации из одного вида в другой, т.е. при проведении процедуры кодирования информации (технологический процесс в расширенной трактовке также следует рассматривать в качестве своеобразного кодирования структуры изделия на атомном уровне физической реализации).

Существенно, что при таком преобразовании выполняется закон сохранения количества информации. Здесь можно провести аналогию с законом сохранения энергии. Этот закон является ключевым основанием для введения понятия энергии. Однако закон сохранения информации сложнее закона сохранения энергии в двух отношениях. Закон сохранения энергии устанавливает точное равенство энергий при их взаимопревращениях, в процессе эволюции физической системы. При превращении же информации имеет место более сложное соотношение, а именно «не больше - ($\leq$)», т.е. информация не может возрасти при проведении кодирования.

Знак равенства соответствует случаю оптимального кодирования. Поэтому, при формулировке закона сохранения информации приходится говорить лишь о возможности существования такого кодирования. Таким образом, должно иметь место равенство количества информационного обеспечения технологии (применительно к рассматриваемому случаю речь может идти об адекватном соответствии информационного потенциала технологии в части совершенства оборудования и используемых материалов) и информационного потенциала изделия, изначально заложенного конструктором на этапе проектирования.

Второе обстоятельство состоит в том, что равенство является приближенным (а не точным), асимптотическим, т.е. справедливым для достаточно сложных сообщений (объектов). Точный знак равенства возможен в предельном случае. В последнем случае имеется полная аналогия с законами статистической термодинамики, которые справедливы для систем, состоящих из очень большого числа атомов. Информация может быть записана различными реализациями, в особенности, если речь идет о невырожденной (см. выше) конструкции изделия. Если N – число таких

реализаций, то указанный закон сохранения количества информации заключается в равенстве $H = \ln M$, осложняемый упомянутыми двумя обстоятельствами (в действительности $H < \ln M$).

Методология анализа качества технологических процессов, основанная на принципах кодирования случайных последовательностей, может быть распространена на все типы производственных процессов, но ее применение представляется более предпочтительным для случая технологий атомной сборки. Примем, что дискретный процесс создания изделия по технологии атомной сборки является стационарным, т.е. все законы распределения $P\{\xi_1, \dots, \xi_r\}$ (произвольной кратности r) не меняются при сдвиге:

$$P\{\xi_1, \dots, \xi_r\} = P\{\xi_{k_1+a}, \dots, \xi_{k_r+a}\}, \quad (3.20)$$

где a – любое целое число.

Величина сдвига a предполагается такой, что значения $\{k_1+a, \dots, k_r+a\}$ не выходят за пределы области K определения параметра k . Предполагается, что область определения параметра не ограничена в обе стороны.

В практическом плане понятие стационарности, оговоренных выше случайных последовательностей ассоциирует с представлениями об устойчивости (стабильности) реальных технологических процессов в производственной практике создания изделий и перекликается с введенными ранее представлениями об энтропийной устойчивости случайных процессов. Выполнение этого условия позволяет рассмотреть процесс создания изделия на основе методологии теории информации в части анализа процессов «передачи сообщений» при наличии помех и пропускной способности каналов связи. В последнем случае под пропускной способностью следует понимать взаимосвязь элементов из всей совокупности информационного обеспечения технологических процессов производства изделия.

3.9 Алгоритмическая энтропия и самоорганизация сложных атомных структур

В последнее время все настойчивее проявляется тенденция к использованию технологии атомной сборки при создании наноразмерных изделий (структур). При этом предлагается использовать механизмы самосборки изделий на атомно-молекулярном уровне обеспечения технологических процессов. Сочетание этих двух моментов сближает позиции в понимании понятия «технологический процесс» применительно к

созданию как техногенных, так и биологических объектов (изделий). В этой связи уместно рассмотреть проблематику технологических процессов атомной самосборки наноразмерных изделий на примере формальных аспектов механизмов создания и эволюции элементарных биологических структур – «биополимеров». Приводя нижеследующие материалы, преследуется цель раскрыть методологические принципы кинетического анализа с привлечением фактора самоорганизации систем, нежели ознакомить читателя с достижениями в области теории биологической эволюции.

Рассмотрим множество линейных объектов (в частности цепных макромолекул), построенных из элементарных «кирпичиков» A, B, C, D (в качестве последних могут выступать как индивидуальные атомы, так и отдельные молекулярные образования). При длине линейного объекта v (количество элементов цепи) возможны 4^v различных реализаций последовательностей. Если допустить, что длина цепи составит 10^6 «кирпичиков» (характерное значение для биополимеров), то число возможных последовательностей оказывается столь огромным и открывает такое число возможностей, которое за 10^{18} секунд существования вселенной не могло быть реализовано и вполне может считаться «практически бесконечным».

Рассмотрим теперь кинетическую модель системы последовательностей (реализаций), например $\{DABC\}$, $\{BDABD\}$, $\{DDABCD\}$ и т.д., которые в результате взаимодействия с внешней средой могут самовоспроизводиться с некоторой скоростью. При копировании в редких случаях могут спонтанно возникать случайные ошибки (мутации), из-за которых копия будет немного отличаться от оригинала. Существует также возможность присоединения к последовательности справа или слева одного из четырех мономеров. Далее на систему накладывается условие отбора (элемента самоорганизации):

- либо ограничивается общее число существующих в системе полимеров (проблема существования);
- либо ограничивается приток мономеров из окружающей среды (проблема сырья).

Множество всех последовательностей произвольной длины можно упорядочить, пронумеровав их натуральными числами. Из многих возможных способов выберем следующую процедуру нумерации:

$i = 0$; нулевая последовательность,

$i = 1-4$; A, B, C, D,
 $i = 5-20$; AA, AB, AC, AD, BA, BB, BC, BD, CA, CB, CC, CD, DA, DB, DC, DD,
 $i = 21-32$; AAA, AAB, AAC, AAD, ABA, ABB, ABC, ABD, ACA, ACB, ACC, ACD и т.д.

Изучение последовательностей молекул тесно связано с задачами кодирования в теории информации. Молекулярные «кирпичики» A, B, C, D соответствуют символам четырехбуквенного алфавита. В теории информации всякую конечную последовательность букв называют словом, поэтому мы можем называть наши последовательности молекул «молекулярными словами». Пользуясь такой формальной аналогией между цепными молекулами и «словами» из теории информации, мы можем непосредственно позаимствовать многие понятия и теоремы теории кодирования.

Возьмем, например, понятие расстояния $d(i, j)$ между двумя последовательностями (реализациями): $i = \{z_1, z_2, \dots, z_k\}$, $j = \{y_1, y_2, \dots, y_L\}$, где $z_n, y_n \in \{A, B, C, D\}$, которое мы определим как минимальное число несовпадений двух последовательностей при всевозможных наложениях их друг на друга. Для определения расстояния между последовательностями $i = \{DACB\}$ и $j = \{BDADBB\}$ построим всевозможные наложения и проведем сравнение с целью выявления совпадающих фрагментов:

D	A	C	B	D	A	C	B	D	A	C	B
<u>B</u>	<u>D</u>	<u>A</u>	<u>D</u>	<u>B</u>	<u>B</u>	<u>B</u>	D	A	<u>D</u>	B	<u>B</u>
<u>B</u>	<u>D</u>	<u>A</u>	<u>D</u>	<u>B</u>	<u>B</u>	<u>B</u>	<u>D</u>	<u>A</u>	<u>D</u>	<u>B</u>	<u>B</u>

и т. д. и, подсчитав минимальное число несовпадений, получим, что $d(i, j) = 3$.

Еще более важным является введенное Колмогоровым понятие алгоритмической энтропии $K(i)$ последовательности i , которую можно понимать как меру сложности последовательности. Понятие «сложность» системы (по Колмогорову) имеет очень большое значение для практических целей, поскольку она позволяет математически строго отличать упорядоченные и случайные последовательности. Основная идея Колмогорова состоит в том, что последовательность считают случайной, если ее нельзя построить с помощью программы, которая была бы короче самой последовательности. Таким образом, «сложность», грубо говоря, есть мера длины кратчайшей программы, задающей последовательность. Другими сло-

вами, сложность последовательности i есть длина кратчайшего описания последовательности на языке L .

Общий алгоритм вычисления $K(i)$ для данной последовательности i неизвестен, однако к искомому минимуму можно приблизиться, сравнивая длину различных программ, представляющих последовательность. Понятие алгоритмической энтропии является существенным обобщением понятия информационной энтропии Шеннона. Интуитивно ясно, что $K(i)$ можно рассматривать как меру содержащейся в последовательности i информации. Сложность $K(i)$ определяет меру упорядоченности множества последовательностей и показывает, увеличивается или уменьшается количество информации при переходе от последовательности i к последовательности j (например, в результате мутации). Принято считать, что только сочетание идей Эйгена и Колмогорова может помочь ответить на вопрос, каким образом в природе могли возникнуть молекулы нуклеиновых кислот, в которых закодирован большой объем информации.

Перейдем теперь к математической формулировке кинетики эволюции рассматриваемой системы последовательностей. Обозначим через $N_i(t)$ число существующих в системе в момент t цепных молекул с последовательностью

$$i = \{z_1 z_2, \dots, z_v\}; \quad z_k \in \{A, B, C, D\},$$

а их концентрацию – через $x_i(t) = N_i(t)/V$. Полное число цепных молекул всех видов предполагается постоянным, так что в формальной математической записи условие отбора имеет вид:

$$N = \sum_i N_i(t) = \text{const.} \quad (3.21)$$

Условие постоянства общего числа цепных молекул приводит к конкуренции между различными их видами; исход этой борьбы определяется главным образом скоростью самовоспроизведения цепной молекулы E_i . Кинетику эволюции можно описать кинетическим уравнением

$$\Delta N_i(t) = (E_i - \langle E \rangle) N_i(t) \Delta t + q_i(t) \Delta t. \quad (3.22)$$

Здесь $\Delta N_i(t)$ – изменение числа молекул вида i за интервал времени Δt , состоящее из вклада точного самовоспроизведения и вклада воспроизведения с ошибкой $q_i(t) \Delta t$.

Скорости воспроизведения E_i и мутационные функции q_i являются в нашей простой модели единственными величинами, которые предполагаются известными. Из этого вытекают все существенные для процесса эво-

люции свойства цепных молекул. Для настоящих цепных молекул истинный вид функций E_i и q_i конечно неизвестен. Однако с физической точки зрения кажутся весьма правдоподобными два предположения:

- скорость воспроизведения E_i является возрастающей функцией сложности $K(i)$ цепной молекулы;
- вероятность a_{ij} перехода от последовательности j к последовательности i уменьшается с увеличением расстояния между последовательностями $d(ij)$.

Справедливость второго предположения очевидна, поскольку ошибочная копия должна всегда быть близкой к оригиналу; действительно, как правило, не на месте оказывается только один мономер, в худшем случае – несколько. Примером может служить мутация вида $\text{BDACAD} \rightarrow \text{BDABAD}$, содержащая один несовпадающий элемент с оригиналом, и соответственно $d(ij) = 1$. Предположение об относительной малости изменений при мутации обеспечивает известную плавность процесса эволюции: вновь возникающие виды не слишком отличаются от прежних.

Значительно сложнее обосновать предположение о связи между сложностью и скоростью воспроизведения. Следует исходить из предположения, что воспроизведение цепной молекулы из имеющихся в окружающей среде «кирпичиков» представляет сложный процесс, для осуществления которого необходима информация. Вообще говоря, для осуществления такого воспроизведения цепной молекуле необходимо иметь «воспроизводящий аппарат», принцип и способ действия которого должны быть заложены в последовательности. Подтверждением того, что такое предположение соответствует действительности, может служить анализ воспроизведения ДНК в клетке. В этом процессе в числе других участвует фермент, так называемая ДНК-полимераза. При синтезе белков содержащаяся в молекуле ДНК информация вначале «переписывается» на короткие, легко считываемые простые спирали молекулы РНК-носителя (аппарат транскрипции). За распознавание «кирпичиков» и установку их в правильном порядке целиком отвечает транспортная молекула РНК при участии активного фермента.

Таким образом, видно, что в самовоспроизведении ДНК принимает участие сложный аппарат, для создания которого молекула должна иметь его «чертежи» и «функциональные схемы». Отсюда можно сделать вывод,

что скорость воспроизведения цепной молекулы должна увеличиваться с ростом ее сложности, т.е. с увеличением количества закодированной в ней информации. Такую же или даже более важную роль играет, конечно, качество закодированной информации. Во всяком случае некоторое количество закодированной информации является хотя и недостаточным, но необходимым условием для осуществления процесса самовоспроизведения молекулы.

На основе изложенного можно, например, принять для простых математических моделей процесса эволюции, что

$$E_i = g[K(i)], \quad (3.23)$$

где $K(i)$ – сложность системы (по Колмогорову),

$g(K)$ – монотонно возрастающая действительная функция действительного аргумента K .

Если информация взвешена, то вместо сложности $K(i)$ следует использовать величину $\omega(i) = K(i)G(i)$, где $G(i)$ — действительная (положительная) весовая функция.

3.10 Общие принципы пространственно-временной организации и эволюции микроэлектронных устройств

Настоящий раздел, в некотором роде, дополняет материалы раздела 3.7 в части внесения большей конкретики в анализ процессов деградации применительно к микроэлектронным структурам (МЭС). В разделе 3.7 вопросы старения (деградации) изделий рассматривались с позиции процессов эволюции информационной энтропии изделия в процессе его срока службы. В целях установления общности энтропийных подходов (информационных и термодинамических), вопрос о деградации изделий в процессе его эксплуатации будет рассмотрен и с термодинамической точки зрения.

Теория флуктуации термодинамических параметров является связующим звеном между теориями термодинамического равновесия и необратимых (неравновесных) процессов. Согласно ее выводам вероятность возникновения флуктуации в изолированной системе для равновесного состояния выражается формулой Эйнштейна

$$P = B \exp(\Delta S/k), \quad (3.24)$$

где k – постоянная Больцмана;

$B \sim$ постоянный коэффициент;

ΔS – отклонения энтропии от своего равновесного значения.

При малых отклонениях от состояния термодинамического равновесия выражение (3.24) может быть представлено в виде:

$$P = B \exp(1/2(\Delta^2 S/k)). \quad (3.25)$$

Правомерность выражения (3.25) следует из возможности разложения в степенной ряд функции $S = S_0 + \Delta S + \frac{1}{2}\Delta^2 S$ и учета того обстоятельства, что в равновесном состоянии величина ΔS обращается в нуль.)

Справедливость выражения (3.25) для неравновесных состояний постулируется на основе гипотезы локального равновесия при выполнении определенных условий разделения временных масштабов между флуктуирующей системой и внешней средой: временные характеристики флуктуации должны быть малы по сравнению со временами релаксации параметров внешней среды. Из такой интерпретации очевидно, что критерии эволюции системы непосредственно связаны с вероятностью флуктуации. При этом стационарные (равновесные) состояния оказываются более вероятными, чем любые неравновесные состояния.

Выполнение критериев эволюции соответствует условиям термодинамической устойчивости, когда флуктуации как внешние, так и внутренние, являются затухающими и влияют только на характеристики шумов, но не на общие закономерности эволюции состояния системы. Положение существенно меняется, когда возникает неустойчивость вдали от равновесных или стационарных состояний при нелинейных соотношениях, например в области фазовых переходов. В этом случае флуктуации могут возрасти и в конечном итоге определяют новое устойчивое макроскопическое состояние системы. Таким образом, новые макроскопические состояния и структуры в смысле временной и пространственной организации являются результатом неустойчивости системы и возникают благодаря флуктуациям параметров в системе. Такая «самоорганизация» имеет непосредственное отношение к локальным процессам отказа МЭС, например процессам электрического пробоя изолирующих слоев интегральных схем.

В соответствии с макроскопическим подходом затухание флуктуации для устойчивых состояний термодинамических систем подчиняется релаксационным законам необратимых процессов, что является основанием для введения понятия мелкомасштабных и крупномасштабных флуктуа-

ций. При этом макроскопические неравновесные состояния и соответствующие им необратимые процессы интерпретируются в качестве крупномасштабных флуктуаций. Таким образом, термодинамический подход, основанный на необратимости физических процессов, объединяет различные точки зрения: классическую термодинамическую теорию устойчивости, теорию устойчивости Ляпунова, флуктуационную и эволюционную теорию. Такое обобщение термодинамики имеет существенное методологическое значение с точки зрения единства макроскопического процессуального подхода при описании сложных объектов различной физической природы.

3.11 Задачи и упражнения к разделу №3

Задание №3.1 Построить график зависимости количества возможных реализаций N_c от количества ячеек размещения N в наноструктуре при условии равной вероятности размещения каждого из m типов различных атомов, содержащихся в рабочей среде.

Задание №3.2 Определить количество реализаций $\lg N_c$ в зависимости от размеров рабочего поля наноструктуры (n_x, n_y) и количества типов размещаемых атомов m .

№ варианта	Количество ячеек рабочего поля		Количество типов размещаемых атомов m
	n_x	n_y	
1	5	5	10
2	10	10	10
3	20	20	10
4	50	50	10
5	5	5	50
6	10	10	50
7	20	20	50
8	50	50	50
9	5	5	100
10	10	10	100

Задание №3.3 Количество размещаемых типов атомов $m = 2$ (атомы типа А и В). Вероятности размещения атомов: $P_A = 0.9$; $P_B = 0.1$. Количество ячеек размещения атомов в рабочем поле наноструктуры (отображаемом в виде линейной цепочки) при $N = 5$.

Определить вероятность получения наноструктуры типа:

Вариант №	а	б	в	г
1	BBBBB	AAAAA	ABBBB	BAAAA
2	ABBBA	BAAAB	AABAA	BBABB
3	ABABA	BABAB	AAABV	BBBAA

Задание №3.4 Определить значения информационной энтропии размещения единичного атома при наличии технологии h_t при заданных значениях m и p_i .

№ варианта	Вероятность размещения в индивидуальной ячейке атома i -го типа p_i										
	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	p_7	p_8	p_9	p_{10}	p_{11}
1	0.5	0.5									
2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2						
3	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	
4	0.9	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
5	0.99	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001
6	0.999	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}	10^{-4}
7	$0,9^{(4)}$	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
8	$0,9^{(5)}$	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}
9	$0,9^{(6)}$	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}
10	0.9	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.091
11	0.999	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	10^{-6}	$9.91 \cdot 10^{-4}$
12	$0,9^{(4)}$	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	10^{-7}	$9.91 \cdot 10^{-5}$
13	$0,9^{(5)}$	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	$9.91 \cdot 10^{-6}$
14	$0,9^{(5)}$	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}					$9.95 \cdot 10^{-6}$
15	$0,9^{(5)}$	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	10^{-8}	4.97×10^{-6}	4.97×10^{-6}		
16	0.0909090 - для всех типов атомов («случайная» технология)										

Примечание: запись вида $0,9^{(4)}$ означает 0,9999.

Задание №3.5 Определить значения энтропийных показателей (K , α , h_t) для случаев (вариантов), рассмотренных в задаче 3.4.

Задание №3.6 Определить значения информационной энтропии нано- и микроструктур H_t при различных значениях параметров N и h_t (в позиции « h_t » указан № варианта из задания № 3.4).

№ варианта	N	h_t	№ варианта	N	h_t
1	10	№6	11	100	№4
2	20	№6	12	100	№5
3	50	№6	13	100	№7
4	10^2	№6	14	100	№8
5	10^3	№6	15	100	№9
6	10^4	№6	16	10^8	№10
7	10^5	№6	17	10^9	№11
8	10^6	№6	18	10^{10}	№12
9	10^7	№6	19	10^{11}	№13
10	10^8	№6	20	10^{12}	№15

Задание №3.7 Определить меру сложности устройства С в зависимости от параметров N, m и величины отношения H_c / H_i .

№ варианта	N	m	H_c / H_i	№ варианта	N	m	H_c / H_i
1	10^{10}	100	10^7	11	5	10	1
2	10^8	100	10^7	12	10	10	5
3	10^6	100	10^7	13	20	10	10
4	10^4	100	10^7	14	50	10	10^2
5	10^3	100	10^7	15	10^2	10	10^3
6	10^2	100	10^7	16	$2 \cdot 10^2$	50	10
7	50	100	10^7	17	$5 \cdot 10^2$	50	10^3
8	10	100	10^7	18	10^3	50	10^6
9	5	100	10^7	19	10^4	50	10^9
10	1	100	10^7	20	10^6	50	10^{12}

Задание №3.8 Определить энтропию единичного размещения атомов h_t в нано- и микроструктурах, обеспечивающую необходимый процент выхода годных изделий P при известных значениях параметров α_i и m.

№ варианта	P, %	m	α_i	№ варианта	P, %	m	α_i
1	99	10	10^4	15	99	10	10^{10}
2	90	10	10^4	16	90	10	10^{10}
3	60	10	10^4	17	60	10	10^{10}
4	40	10	10^4	18	40	10	10^{10}
5	10	10	10^4	19	10	10	10^{10}
6	1.0	10	10^4	20	1.0	10	10^{10}
7	0.1	10	10^4	21	0.1	10	10^{10}

Окончание задания №3.8

8	99	10	10^8	22	99	1	10^4
9	90	10	10^8	23	10	1	10^4
10	60	10	10^8	24	99	1	10^8
11	40	10	10^8	25	10	1	10^8
12	10	10	10^8	26	99	1	10^{10}
13	1.0	10	10^8	27	50	1	10^{10}
14	0.1	10	10^8	28	10	1	10^{10}

Задание №3.9 Определить процент выхода годных изделий P , если известно, что $h_c=2.004$ и h_t, h_i (см. данные таблицы).

№ варианта	h_t	h_i	N	№ варианта	h_t	h_i	N
1	10^{-9}	10^{-9}	10^2	15	10^{-9}	10^{-9}	10^4
2	10^{-8}	10^{-9}	10^2	16	10^{-8}	10^{-9}	10^4
3	10^{-7}	10^{-9}	10^2	17	10^{-7}	10^{-9}	10^4
4	10^{-6}	10^{-9}	10^2	18	10^{-3}	10^{-9}	10^4
5	10^{-5}	10^{-9}	10^2	19	10	10^{-9}	10^4
6	10^{-4}	10^{-9}	10^2	20	10^{-9}	10^{-9}	10^8
7	10^{-3}	10^{-9}	10^2	21	10^{-8}	10^{-9}	10^8
8	10^{-2}	10^{-9}	10^2	22	10^{-7}	10^{-9}	10^8
9	2.004	10^{-9}	10^2	23	10^{-3}	10^{-9}	10^8
10	10^{-6}	10^{-7}	10^3	24	10	10^{-9}	10^8
11	10^{-4}	10^{-7}	10^3	25	10^{-9}	10^{-9}	10^{12}
12	10^{-3}	10^{-7}	10^3	26	10^{-8}	10^{-9}	10^{12}
13	10^{-2}	10^{-7}	10^3	27	10^{-7}	10^{-9}	10^{12}
14	10	10^{-7}	10^3	28	10^{-3}	10^{-9}	10^{12}

Задание №3.10 Определить информационный дефицит технологии создания микро- и наноструктур ΔI по значениям, заданным в упражнении 3.9.

Задание №3.11 Определить минимальное количество метрологических операций n , устраняющих информационный дефицит технологии, по значениям, заданным в упражнении 3.9.

Задание №3.12 Определить выход годных изделий P в зависимости от информационного дефицита ΔI , физического объема микроструктуры V и энтропии единичного размещения атомов в элементарной ячейке h_t .

№ варианта	h_t	ΔI	$V, \text{мкм}^3$	№ варианта	h_t	ΔI	$V, \text{мкм}^3$
1	10^{-9}	10^{-7}	10^{-9}	15	10^{-9}	0.4	10^{-3}
2	10^{-8}	$0.2 \cdot 10^{-5}$	10^{-9}	16	10^{-8}	$0.3 \cdot 10$	10^{-3}
3	10^{-7}	$0.3 \cdot 10^{-4}$	10^{-9}	17	10^{-7}	$0.2 \cdot 10^2$	10^{-3}
4	10^{-6}	$0.4 \cdot 10^{-3}$	10^{-9}	18	10^{-3}	$0.3 \cdot 10^6$	10^{-3}
5	10^{-5}	$0.5 \cdot 10^{-2}$	10^{-9}	19	10	$0.4 \cdot 10^{10}$	10^{-3}
6	10^{-4}	$0.6 \cdot 10^{-1}$	10^{-9}	20	10^{-9}	$0.5 \cdot 10^3$	1.0
7	10^{-3}	$0.7 \cdot 1.0$	10^{-9}	21	10^{-8}	$0.6 \cdot 10^4$	1.0
8	10^{-2}	$0.8 \cdot 10$	10^{-9}	22	10^{-7}	$0.7 \cdot 10^5$	1.0
9	2.004	$2 \cdot 10^2$	10^{-9}	23	10^{-3}	$0.8 \cdot 10^9$	1.0
10	10^{-6}	0.6	10^{-6}	24	10	$0.9 \cdot 10^{13}$	1.0
11	10^{-4}	$0.9 \cdot 10^2$	10^{-6}	25	10^{-9}	$0.8 \cdot 10^6$	10^3
12	10^{-3}	$0.8 \cdot 10^3$	10^{-6}	26	10^{-8}	$0.7 \cdot 10^7$	10^3
13	10^{-2}	$0.7 \cdot 10^4$	10^{-6}	27	10^{-7}	$0.6 \cdot 10^8$	10^3
14	10	$0.6 \cdot 10^7$	10^{-6}	28	10^{-3}	$0.5 \cdot 10^{12}$	10^3

Задание №3.13 Определить суммарное возрастание энтропии изделия в процессе эксплуатации ΔS , если известны зависимости скорости производства энтропии в процессе эксплуатации микро- и наноструктуры и срока службы изделия τ .

№ варианта	Зависимости скорости производства энтропии ν , Дж(град·с) ⁻¹	τ , с
1	$\nu = \nu_0 = \text{const}$ ($\nu_0 = 10^{-9}$ Дж·(град·с) ⁻¹)	$2 \cdot 10^8$
2	$\nu = \nu_0 + \beta t$ ($\nu_0 = 10^{-10}$ Дж·(град·с) ⁻¹ , $\beta = 10^{-15}$ Дж·град ⁻¹ с ⁻²)	10^7
3	$\nu = \nu_0 + \gamma t^2$ ($\nu_0 = 10^{-9}$ Дж·(град·с) ⁻¹ , $\gamma = 10^{-7}$ Дж·с ⁻³ ·град ⁻¹)	$5 \cdot 10^7$
4	$\nu = \nu_0 + \beta t + \gamma t^2$ ($\nu_0 = 10^{-8}$ Дж(град·с) ⁻¹ , $\beta = 10^{-8}$ Дж·град ⁻¹ с ⁻² , $\gamma = 10^{-16}$ Дж·с ⁻³ ·град ⁻¹)	10^8
5	$\nu = \nu_0 e^{\epsilon t}$ ($\nu_0 = 10^{-6}$ Дж(град·с) ⁻¹ , $\epsilon = 10^{-8}$ с ⁻¹)	10^9
6	$\nu = \nu_0 e^{-\epsilon t}$ ($\nu_0 = 10^{-6}$ Дж(град·с) ⁻¹ , $\epsilon = 10^{-9}$ с ⁻¹)	$5 \cdot 10^8$
7	$\nu = \nu_0 + \gamma t^2 - \sigma e^{\epsilon t}$ ($\nu_0 = 10^{-6}$ Дж(град·с) ⁻¹ , $\gamma = 10^{-16}$ Дж·с ⁻³ ·град ⁻¹ , $\epsilon = 10^{-8}$ с ⁻¹)	10^7

Задание №3.14 Определить срок службы изделия τ_k , если известны энтропия изделия с учетом технологического фактора H_t , критическая энтропия H_k и параметры скорости производства энтропии ν_0 , β , n .

№ варианта	N _t , дит	N _k /N _t	υ ₀ , Дж(град·с) ⁻¹	β, Дж(град) ⁻¹	n	Примечание
Стационарный процесс деградации изделия: υ=const						
1	10 ⁵	1.1	10 ⁻¹²	1		Температура эксплуатации T=300 К. Энергия активации процесса деградации W=2.0 эВ
2	10 ⁴	1.1	10 ⁻¹²	5		
3	10 ³	1.1	10 ⁻¹²	10		
4	10 ²	1.1	10 ⁻¹²	20		
5	10 ¹	1.1	10 ⁻¹²	50		
6	10 ⁵	11	10 ⁻⁸	10		Температура эксплуатации T=600 К. Энергия активации процесса деградации W=1.4 эВ
7	10 ⁴	11	10 ⁻⁸	20		
8	10 ³	11	10 ⁻⁸	50		
9	10 ²	11	10 ⁻⁸	1		
10	10 ¹	11	10 ⁻⁸	5		
Нестационарный линейный процесс деградации изделия: υ=υ ₀ + βt						
11	10 ⁵	1.1	10 ⁻¹²	1		Температура эксплуатации T=300 К. Энергия активации процесса деградации W=1.5 эВ
12	10 ⁴	1.1	10 ⁻¹²	5		
13	10 ³	1.1	10 ⁻¹²	10		
14	10 ²	1.1	10 ⁻¹²	20		
15	10 ¹	1.1	10 ⁻¹²	50		
16	10 ⁵	11	10 ⁻⁸	1		Температура эксплуатации T=600 К. Энергия активации процесса деградации W=1.1 эВ
17	10 ⁴	11	10 ⁻⁸	2		
18	10 ³	11	10 ⁻⁸	10		
19	10 ²	11	10 ⁻⁸	20		
20	10 ¹	11	10 ⁻⁸	50		
Нестационарный нелинейный процесс деградации изделия: υ=υ ₀ + βt ⁿ						
21	10 ⁵	1.1	10 ⁻¹²	1	0.1	Температура эксплуатации T=300 К. Энергия активации процесса деградации W=1.3 эВ
22	10 ⁴	1.1	10 ⁻¹²	5	1	
23	10 ³	1.1	10 ⁻¹²	10	2	
24	10 ²	1.1	10 ⁻¹²	20	3	
25	10 ¹	1.1	10 ⁻¹²	50	4	
26	10 ⁵	11	10 ⁻⁸	1	0.1	Температура эксплуатации T=600 К. Энергия активации процесса деградации W=0.9 эВ
27	10 ⁴	11	10 ⁻⁸	2	1	
28	10 ³	11	10 ⁻⁸	10	2	
29	10 ²	11	10 ⁻⁸	20	3	
30	10 ¹	11	10 ⁻⁸	50	4	

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотренные в первом разделе теоретические модели и подходы относятся к одному частному случаю активации элементарных физико-химических процессов, а именно термическому типу активации. В конструкторско-технологической практике создания устройств микроэлектроники широко используются и ряд других способов активации элементарных физико-химических процессов (фотонная, электронная, ионная, комбинированная). В этих случаях кинетика протекания элементарных физико-химических процессов «жестко» привязана к интенсивности иницирующих (активационных) потоков лучевой или корпускулярной природы. Однако и в этом случае термоактивационные модели протекания элементарных физико-химических процессов играют довольно существенную роль, но уже в качестве дестабилизирующего фактора, ограничивающего качественные показатели основного технологического процесса. Это обстоятельство определяет интерес к термоактивационным моделям в случаях использования альтернативных методов активации элементарных физико-химических процессов (в особенности, если учесть тот факт, что температуры в локальных областях материалов рабочих сред могут достигать значительных величин).

Относительно рассмотренных энтропийных моделей изделий и критериев качества технологий следует отметить, что они наиболее эффективны применительно к изделиям высокой сложности. С практической точки зрения, представленные подходы позволяют оценить предельные возможности технологий и целесообразный уровень сложности (упорядоченности) изделий, обеспечивающих приемлемые производственные показатели. Дальнейшее развитие энтропийного подхода предполагает отказ от гипотезы равновероятности индивидуальных реализаций в пределах множества N_i в пользу использования более реалистичного (в частности нормального) распределения последних. В этом случае следует ожидать некоторого смягчения требований к параметру избирательности технологического процесса α_i . Существенный интерес представляет рассмотрение вопросов корреляции при размещении индивидуальных атомов. Однако, несмотря на значительные достижения по данному вопросу в математическом плане, на этом пути имеются определенные трудности физического

характера, обусловленные отсутствием уверенных данных об атомных корреляционных функциях в конденсированных средах. Рассмотренные энтропийные модели и подходы органично согласуются по своей методологической базе со спецификой технологических процессов атомной сборки наноструктур. Действительно, и в том и другом случае речь идет о последовательности дискретных событий (размещении индивидуальных атомов в заданное место расположения в структуре) с привлечением факторов вероятностного характера.

Изучение представленных выше современных подходов и методов анализа сложных технических систем позволит приблизить практику создания твердотельных микроэлектронных устройств к требованиям по функциональной устойчивости и надежности последних в реальных условиях эксплуатации. В частности, обеспечение необходимого уровня надежности изделий представляется невозможным без детального и корректного анализа физико-химических процессов, ответственных как за появление функционального качества изделий, так и за процессы их деградации, протекающие в ходе эксплуатации, на уровне требований 0,5–2 ФИТ (1 ФИТ соответствует объему выборки испытаний, подтверждающих необходимый уровень требований, порядка 10^9 приборочасов). Следует отметить, что обеспечение оговоренного выше уровня надежности является нетривиальной задачей и накладывает чрезвычайно высокий уровень требований методологического и метрологического плана на исследования непосредственно физико-химических процессов, лежащих в основе обеспечения упомянутых выше факторов устойчивости функционального и деградиационного характера.

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зиненко, В.И. Основы физики твердого тела / В.И. Зиненко. – М.: Физматлит, 2001. – 384 с.
2. Винтайкин, Б.Е. Физика твердого тела / Б.Е. Винтайкин. – М.: Изд-во МГТУ, 2006. - 360 с.
3. Физика твердого тела / И.К. Верещагин, С.М. Кокин, В.А. Никитенко [и др.]. – М.: Высшая школа, 2004. – 240 с.
4. Барыбин, А.А. Физико-технологические основы электроники / А.А. Барыбин, В.Г. Сидоров. – СПб: Лань, 2001. 328 с.
5. Байрамов, В.М. Основы химической кинетики и катализа / В.М. Байрамов. – М.: АKADEMA, 2003. – 256 с.
6. Штиллер, В. Уравнение Аррениуса и неравновесная кинетика / В. Штиллер. – М.: Мир, 2000. – 217 с.
7. Физические основы полупроводникового материаловедения: учеб. пособие / Ю.К. Ежовский, О.В. Денисова, В.Н. Воронцов [и др.]. – СПб.: СЗТУ, 2005. - 116 с.
8. Степаненко, И.К. Основы микроэлектроники / И.К. Степаненко. – М.: Лаборатория базовых знаний, 2000. - 488 с.
9. International Technology Roadmap for Semiconductors 2002 Update ([http:// public.net](http://public.net)).
10. Брандон, Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 377 с. (Brandon D., Caplan U. Microstructural Characterization of Materials. John Wiley & Sons Ltd. 1999.)
11. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкости / Я.И. Френкель. - Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2004. - 424 с.
12. Саноян, А.Г. Энтропийные модели и критерии оценки качества обработки материалов в микро- и нанотехнологиях / А.Г. Саноян. – М.: ФХОМ, 2006. – № 6. – С. 69 – 74.
13. Эйген, М. Самоорганизация материи и эволюция биологических макромолекул / М. Эйген. – М.: Мир, 2003. – 284 с.
14. Эбелинг, В. Образование структур при необратимых процессах: Введение в теорию диссипативных структур / В. Эбелинг. – Москва-Ижевск: Ин-т компьют. исслед. 2004. – 256 с. (Ebeling W/ Strukturbildung bei Irreversiblen Prozessen. Teubner Verlags-gesellschaft/ -1999.)
15. Барыбин, А.А. Физико-технологические основы электроники / А.А. Барыбин, В.Г. Сидоров. – СПб.: Лань. 2001. – 272 с.
16. Волков, А.В. Энтропийные модели микро- и нанотехнологий и структур: учеб. пособие / А.В. Волков, И.Н. Еремина, А.Г. Саноян. – Самара: Изд-во СГАУ, 2007.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Справочные данные общего характера

Т а б л и ц а П 1. Единицы энергии и работы.

Дж	ккал	эВ
1	$2.39 \cdot 10^{-4}$	$6.24 \cdot 10^{18}$
$4.19 \cdot 10^3$	1	$2.61 \cdot 10^{22}$
$1.6 \cdot 10^{-19}$	$3.83 \cdot 10^{-23}$	1

Т а б л и ц а П 2. Некоторые основные физические постоянные

Наименование постоянной	Значение
Газовая постоянная	8.31 Дж / (К моль).
Нормальный молярный объем	22.4 м ³ / моль .
Постоянная Авогадро	$6.02 \cdot 10^{23}$ моль ⁻¹ .
Постоянная Больцмана	$1.28 \cdot 10^{-23}$ Дж / К.
Масса покоя электрона	$9.10 \cdot 10^{-31}$ кг.
Масса покоя протона	$1.67 \cdot 10^{-27}$ кг.
Атомная единица массы	$1.66 \cdot 10^{-27}$ кг.
Элементарный электрический заряд	$1.60 \cdot 10^{-19}$ Кл .
Постоянная Планка	$6.62 \cdot 10^{-34}$ Дж с.
Число Фарадея	$9.65 \cdot 10^4$ Кл / моль.

Т а б л и ц а П 3. Приставки к единицам СИ

Приставка	Обозначение	Значение	Приставка	Обозначение	Значение
дека	да	10^1	деци	д	10^{-1}
гекто	г	10^2	санتي	с	10^{-2}
кило	к	10^3	милли	м	10^{-3}
мега	М	10^6	микро	мк	10^{-6}
гига	Г	10^9	нано	н	10^{-9}
тера	Т	10^{12}	пико	п	10^{-12}
пета	П	10^{15}	фемто	ф	10^{-15}
экса	Э	10^{18}	атто	а	10^{-18}

Т а б л и ц а П 4. Буквы греческого алфавита

α альфа	ι йота	ρ ро
β бета	χ каппа	σ сигма
γ гамма	λ ламбда	τ тау
δ дельта	μ мю	υ ипсилон
ε эпсилон	ν ню	ϕ фи
ζ дзета	ξ кси	χ хи
η эта	$\omicron$ омикрон	ψ пси
θ тета	π пи	ω омега

Учебное издание

*Еремина Ирина Николаевна,
Саноян Ашот Геворкович*

**ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ
УСТРОЙСТВ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ**

Учебно-методическое пособие

Редактор Н. С. К у п р и я н о в а
Компьютерная верстка Т. Е. П о л о в н е в а

Подписано в печать 18.12.2008. Формат 60х84 1/16.

Бумага офсетная. Печать офсетная.

Печ. л. 5.25.

Тираж 100 экз. Заказ .

Самарский государственный
аэрокосмический университет.
443086, Самара, Московское шоссе, 34.

Изд-во Самарского государственного
аэрокосмического университета.
443086 Самара, Московское шоссе, 34.