

УДК 539.231

## Розробка математичної моделі автоматизованої системи управління нанесення наноструктурованих діелектричних плівок

Д. В. Гурін, І. Ш. Невлюдов

*Харківський національний університет радіоелектроніки, Україна*

У статті розглянуто розробку математичної моделі автоматизованої системи управління отримання наноструктурованих діелектричних плівок. В ході розробки математичної моделі були визначені оптимальні керуючі впливи, проведено дослідження осадження плівок та вибір критерію оптимальності. Наведені результати розрахунку оптимізації технологічного процесу одержання плівок та схема варіантів оптимального управління, що дозволило розробити математичну модель технологічного процесу осадження наноструктурованих діелектричних плівок.

**Ключові слова:** *наноструктуровані діелектричні плівки, критерій оптимальності, керуючі впливи, катодне розпилення, напилення у вакуумі.*

В статье рассмотрена разработка математической модели автоматизированной системы управления получения наноструктурированных диэлектрических пленок. В ходе разработки математической модели были определены оптимальные управляющие воздействия, проведено исследование осаждения пленок и выбор критерия оптимальности. Приведены результаты расчетов оптимизации технологического процесса получения пленок и схема вариантов оптимального управления, это позволило разработать математическую модель технологического процесса осаждения диэлектрических пленок.

**Ключевые слова:** *наноструктурированные диэлектрические пленки, критерий оптимальности, управляющие воздействия, катодное распыление, напыление в вакууме.*

The article deals with the development of the mathematical model of an automated control system for the dielectric film production. The mathematical model being developed, the optimal control actions have been determined. The study of the film deposition and the optimality criterion selection has been made. The results of the calculations to optimize the technological process of film obtaining and the scheme of optimal control options are presented. It allows developing the mathematical model of the technological process of the dielectric film deposition.

**Key words:** *nanostructured dielectric films, the optimality criterion, control actions, cathode sputtering, vacuum deposition.*

### 1. Вступ

Для реалізації процесу отримання наноструктурованих діелектричних плівок необхідно провести моделювання та визначити критерій оптимальних керуючих впливів, для отримання плівок з прогнозованими властивостями [1, 2].

Оптимізація технологічного процесу осадження діелектричних плівок складається з трьох етапів: вибору критерію оптимальності того параметра, який кладеться в основу оцінки технологічного процесу; дослідження технологічного процесу і знаходження математичного опису, що визначає залежність критерію оптимальності від технологічних факторів; аналізу отриманих залежностей і визначення оптимальних умов проведення технологічного процесу.

## 2. Дослідження процесу осадження плівок і вибір критерію оптимальності

З метою дослідження та подальшої оптимізації процесу осадження діелектричних плівок використані дані п'ятифакторного п'ятирівневого збалансованого експерименту класичного плану [2].

В якості вихідних параметрів процесу осадження діелектричних плівок, що визначають їх електрофізичні властивості, обрані:

$$\operatorname{tg}\delta, E_{np}, \varepsilon, \rho, n - (Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5),$$

де  $\operatorname{tg}\delta$  - тангенс кута діелектричних втрат;

$E_{np}$  - пробивна напруга;

$(Y_1, Y_2, Y_3, Y_4, Y_5)$  - електрофізичні властивості.

В якості контрольованих і керованих факторів взяті  $P$  (тиск),  $T_n$  (температура),  $I_p$  (струм розряду),  $M$  (матеріал підкладки),  $K$  (матеріал катода) – відповідно  $X_1, X_2, X_3, X_4, X_5$ . Контрольованим, але некерованим чинником взято  $\gamma$  – кількість парів води в остаточній атмосфері підковпачного пристрою.

В результаті проведеного експерименту отримано більше трьох тисяч значень вихідних параметрів. Дисперсійний аналіз отриманого масиву даних, дозволив встановити, що найбільший вплив на вихідні параметри надають  $P, T_n, I_p, \gamma$ .

Дослідження фізико-хімічних особливостей процесу реактивного катодного розпилення та осадження діелектричних плівок, проведене раніше, а також обробка даних, отриманих в результаті проведення активного планованого експерименту, дозволили встановити, що мінімальне значення  $\operatorname{tg}\delta$  забезпечує найкраще значення решти параметрів  $(E_{np}, \varepsilon, \rho, n)$ . Це дозволяє істотно спростити математичну модель процесу осадження.

Проведений дисперсійний аналіз дає можливість встановити впливають або не впливають досліджувані фактори на параметри діелектричних плівок, але він не дозволяє визначити ступінь і характер їх впливу. Ці питання можуть бути вирішені, якщо провести кореляційний і регресивний аналіз.

## 3. Математична модель процесу осадження діелектричних плівок

При вивченні процесу осадження діелектричних плівок неможливо розшифрувати ряд явищ, що впливають на їх електрофізичні властивості. Тому залежність:

$$Y = f(X_1 X_2 X_3 \dots X_n)$$

представляється у вигляді рівняння регресії:

$$Y = A_0 + \sum_{j=1}^K A_j X_j + \sum_{i \neq j} A_{ij} X_i X_j + \sum_{i=1}^{r,K} A_{ii} X_i^2 + \dots, \quad (3.1)$$

де  $A_i, A_{ij}, \dots, A_{ii}$  – коефіцієнти ряду Тейлора, тобто значення приватних похідних в точці, навколо якої проводиться розкладання невідомої функції:

$$A_i = \frac{\delta f}{\delta x_i}; \quad A_{ij} = \frac{\delta^2 f}{\delta x_i \delta x_j}; \quad A_{ii} = \frac{\delta^2 f}{\delta x_i^2}.$$

Перевірка адекватності лінійної апроксимації функції (3.1), з коефіцієнтами, певними методом найменших квадратів, показала, що рівняння першого порядку не описує процес осадження діелектричних плівок. Тому отримана поліноміальна математична модель процесу осадження плівок, побудована щодо обраного параметра – критерію якості  $tg\delta$ :

$$tg\delta = A_1P^2 + A_2I_p^2 + A_3T_n^2 + A_4P + A_5I_p + A_6T_n + \dots A_n. \quad (3.2)$$

Кореляційний аналіз моделі (3.2), проведений щодо випадкової величини  $\gamma$ , дозволив отримати математичну модель такого вигляду:

$$tg\delta = A_1P^2 + A_2I_p^2 + A_3T_n^2 + A_4P + A_5I_p + A_6T_n + A_7P_\gamma + A_8I_\gamma + A_9T_\gamma + A_{10}\gamma^2 + A_{11}\gamma + A_{12}, \quad (3.3)$$

де  $\gamma$  змінюється від 0 до 4 умовних одиниць, що відповідає зміні вмісту парів води в остаточній атмосфері підковпачного пристрою від 1 до 5 %.

Аналіз моделі (3.3) при різних значеннях вхідних параметрів показав, що поліноміальна математична модель адекватна процесу осадження діелектричних плівок.

Розраховуючи значення вхідних параметрів за моделлю (3.3) можна отримувати плівки із заданими властивостями.

#### 4. Оптимізація технологічного процесу отримання структур $SiO_2 - Si_xO_yN_z - Si_3N_4$

Технологічний процес отримання двох і тришарових структур на основі діелектричних плівок, синтезованих з використанням магнетронної розпилувальної системи, характеризується рядом керуючих (задають технологічний режим) та збуджуючих (діючих незалежно від людини) впливів, які визначають електрофізичні властивості синтезованих плівок.

Завдання оптимального управління технологічним процесом отримання діелектричних плівок полягає в розрахунку і підтримці на установці таких керуючих впливів, які забезпечували б із заданою продуктивністю одержання найбільш якісних плівок, з необхідними електрофізичними властивостями, незалежно від збуджуючих впливів [6].

Оптимізація та автоматизація процесу отримання структур  $SiO_2 - Si_xO_yN_z - Si_3N_4$  (діоксид кремнію, оксинітрид кремнію, нітрид кремнію) вимагає чіткого аналізу взаємозв'язків чинників процесу осадження. Це завдання може бути вирішено при наявності кількісного опису процесу – його математичної моделі [5].

#### 5. Математична модель технологічного процесу осадження діелектричних плівок $SiO_2, Si_xO_yN_z, Si_3N_4, Al_2O_3$ та структур на їх основі

У технологічному процесі отримання структури  $SiO_2 - Si_xO_yN_z - Si_3N_4$  можна виділити три основні стадії: осадження плівок  $SiO_2, Si_xO_yN_z, Si_3N_4$  відповідно. Кожна стадія характеризується керуючими впливами: тиск робочого

газу  $P_p$  температурою підкладки  $T_n$  та струмом розряду, що визначає швидкість осадження тобто продуктивність процесу.

Мас-спектрометричний аналіз залишкового та робочого складу газів показав, що найбільш істотний вплив на процес осадження та електрофізичні властивості діелектричних плівок надає присутність парів води.

Тому, основним збуджуючим впливом вибрано кількість води, що міститься у залишковій атмосфері підковпачного пристрою[3].

Якість діелектричних плівок характеризується трьома основними параметрами: тангенсом кута діелектричних втрат, діелектричної проникністю, електричною міцністю.

Було встановлено, що умови, відповідні мінімальному значенню  $tg\delta$  забезпечують отримання плівок з найкращими показниками.

Тому для управління процесом осадження прийнятий критерій-мінімум  $tg\delta$  отриманих плівок при заданому  $\gamma$ .

$$\min \frac{\varphi(I, P, T, \gamma)}{\gamma} = \gamma_0,$$

де  $\varphi(I, P, T, \gamma)$  залежність  $tg\delta$  від  $I, P, T, \gamma$ .

Для отримання математичної моделі якості кожної плівки в явному вигляді використані експериментальні дані трьохфакторного, трьохрівневого експерименту з випадковими зміною четвертого фактора – збуджуючого впливу.

Залежність  $tg\delta$  від збуджуючого впливу представлена на рис. 5.1.

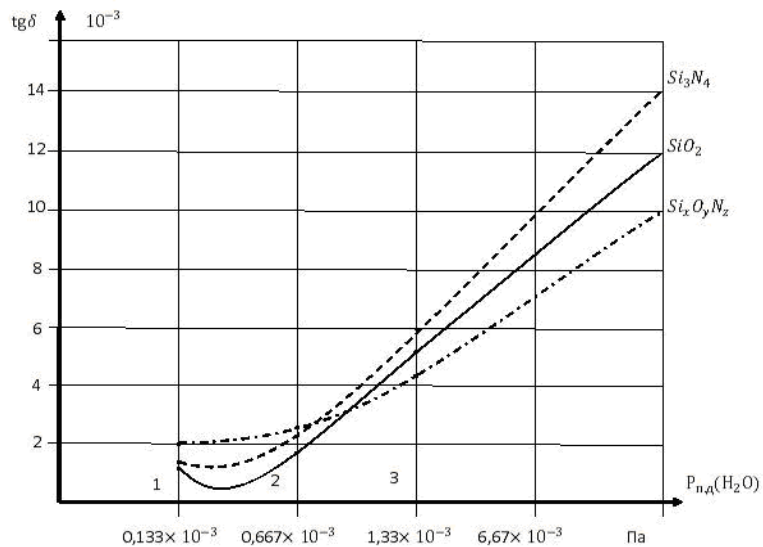


Рис. 5.1. Залежність  $tg\delta$  від збуджуючого впливу  $\gamma$  (парціального тиску пари води в камері  $P_{н,д}$ .)

У ході експерименту плівки осаджували при трьох різних значеннях керуючих впливів та всіх можливих комбінаціях цих значень.

З метою отримання в даному режимі осадження плівок при можливо більш рівномірному розподілі значень  $tg\delta$ , в допустимому діапазоні змін  $\gamma$  від 1 до 3 умовних одиниць, для кожної з 27 комбінацій керуючих впливів експеримент повторювався 5-10 разів.

У результаті обробки 600 ÷ 700 експериментальних значень по кожній діелектричній плівці нами отримані методом найменших квадратів поліноміальні математичні моделі якості плівок:

$$\varphi_{SiO_2} = (24870P^2 + 65,6I^2 + 0,1039\gamma^2 - 183,5P\gamma - 2,755I\gamma - 1686P - 31,094I + 1,672\gamma - 0,05T + 7,789) \cdot 10^{-3},$$

$$\varphi_{Si_3N_4} = (171300P^2 + 32,81I^2 + 0,00018T^2 + 0,495\gamma^2 - 0,0607T - 12,8581 - 965\gamma + 0,365\gamma - 0,0036T\gamma - 2,427\gamma - 95P\gamma + 12,951) \cdot 10^{-2},$$

де  $P$  – змінюється в інтервалі від 0,133 до 0,665 Па;

$I$  – змінюється в інтервалі від 0,18 до 0,28 А;

$T$  – змінюється в інтервалі від 160 до 300 °С.

$$\varphi_{Si_xO_yN_z} = (4,05 - 0,61\tilde{P} - 0,512\tilde{T} + 0,6924\tilde{\gamma} + 0,23185\tilde{I} + 0,31667\tilde{P}^2 + 1,0972\tilde{T}^2 + 0,0694\tilde{\gamma}^2 + 0,7244\tilde{I}^2 + 0,002777\tilde{P}\tilde{T} + 0,1568\tilde{P}\tilde{\gamma} + 0,0438\tilde{P}\tilde{I} + 0,005555\tilde{\gamma}\tilde{\gamma} + 0,46389\tilde{T}\tilde{I} - 0,0411\tilde{\gamma}\tilde{I}) \cdot 10^{-3},$$

де  $\tilde{P} = P \cdot 10^{-3} - 3$ ,  $\tilde{T} = T \cdot 10^{-2} - 1,8$ ,  $\tilde{I} = I \cdot 10 - 2,5$ ,  $\tilde{\gamma} = \gamma - 2$ .

$P$  – змінюється в інтервалі від  $1 \cdot 10^{-3}$  до  $5 \cdot 10^{-3}$  мм рт. ст.;

$T$  – змінюється в інтервалі від 180 до 200 °С;

$I$  – змінюється в інтервалі від 0,2 до 0,3 А.

Отримані моделі справедливі в інтервалі змін  $\gamma$  в діапазоні від 1 до 3 умовних одиниць. При цьому всі значення керуючих впливів не виходять з області допустимих значень.

У разі квадратичної залежності для отримання оптимальних керуючих впливів досить застосувати принцип необхідних умов екстремуму:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi_{SiO_2}}{dP} = (2 \cdot 24870P - 183,5\gamma - 1686) \cdot 10^{-3} = 0 \\ \frac{d\varphi_{SiO_2}}{dI} = (2 \cdot 65,6I - 2,755\gamma - 31,094) \cdot 10^{-3} = 0 \end{cases}$$

Рішення системи рівнянь дає значення оптимальних керуючих впливів при вирощуванні діелектричної плівки  $SiO_2$ :  $P_{opt} = (2,818 + 0,2775\gamma) \cdot 10^{-3}$ ,  $I_{opt} = 0,196 + 0,037\gamma$ ,  $T_{opt} = 168,6 + 10\gamma$ .

Визначення оптимальних керуючих впливів при отриманні плівки  $Si_3N_4$  здійснюється рішенням наступної системи рівнянь:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi_{Si_3N_4}}{dP} = (2 \cdot 171 \cdot 300P - 965 - 95\gamma) \cdot 10^{-3} = 0 \\ \frac{d\varphi_{Si_3N_4}}{dI} = (2 \cdot 32,81 - 12,858 - 2,427\gamma) \cdot 10^{-3} = 0 \\ \frac{d\varphi_{Si_3N_4}}{dT} = (2 \cdot 0,00018T - 0,0607 - 0,0036\gamma) \cdot 10^{-3} = 0 \end{cases} \quad (5.1)$$

Рішення системи рівнянь (5.1) дає наступні значення оптимальних керуючих впливів при вирахуванні діелектричної плівки  $Si_3N_4$ :

$$P_{opt} = (2,818 + 0,2775\gamma) \cdot 10^{-3}, \quad I_{opt} = 0,196 + 0,037\gamma, \\ T_{opt} = 168,6 + 10\gamma.$$

Для діелектричної плівки  $Si_XO_YN_Z$  система рівнянь для визначення оптимальних керуючих впливів буде наступною:

$$\begin{cases} \frac{d\varphi_{Si_XO_YN_Z}}{d\tilde{P}} = -0,61056 - 0,63334\tilde{P} + 0,0027778\tilde{T} - 0,1568\tilde{\gamma} + 0,436\tilde{I} = 0 \\ \frac{d\varphi_{Si_XO_YN_Z}}{d\tilde{I}} = 0,23185 + 1,4488\tilde{I} + 0,0436\tilde{P} + 0,46389\tilde{T} - 0,0411\tilde{\gamma} = 0 \\ \frac{d\varphi_{Si_XO_YN_Z}}{d\tilde{T}} = -0,512 + 2,1944\tilde{T} + 0,027778\tilde{P} + 0,0055556\tilde{\gamma} + 0,46389\tilde{I} = 0 \end{cases} \quad (5.2)$$

Після перетворення системи рівнянь (5.2) і вирішення системі лінійних рівнянь з параметром  $\tilde{\gamma}$  у правій частині отримаємо:  $P_{opt} = 0,982 + 0,246\tilde{\gamma}$ ,  $I_{opt} = 0,283 + 0,0235\tilde{\gamma}$ ,  $\tilde{T}_{opt} = 0,2919 + 0,00780\tilde{\gamma}$ .

З урахуванням того, що:  $\tilde{P} = P \cdot 10^{-3} - 3$ ,  $\tilde{T} = T \cdot 10^{-2} - 1,8$ ,  $\tilde{I} = I \cdot 10 - 2,5$ ,  $\tilde{\gamma} = \gamma - 2$  отримаємо наступні оптимальні керуючі впливи:  $P_{opt} = (3,49 + 0,246\gamma) \cdot 10^{-3}$ ,  $I_{opt} = 0,00235 + 0,217\gamma$ ,  $T_{opt} = 210,75 - 0,7802\gamma$ .

При зміні  $\gamma$  від 1 до 3 умовних одиниць усі значення оптимальних керуючих впливів не виходять з області допустимих значень.

Дослідження ефективності використання оптимального управління проводилося для трьох варіантів:

- а) тільки по  $P$  (схема 2 рис. 5.2);
- б) тільки по  $T$  (схема 3 рис. 5.2);
- в) тільки по  $I$  (схема 4 рис. 5.2).

Методом визначення швидкості зміни  $\frac{dtg\delta}{dy}$  при коливанні в разі оптимізації

параметрів технологічного процесу і при середніх значеннях всіх управляючих впливів (схема 1 рис. 5.2). Встановлено, що найбільший ефект досягається при оптимізації технологічного процесу з усіх вхідних параметрів (схема 5). На рис. 5.3, 5.4, 5.5 наведені результати розрахунку для всіх трьох плівок 1 – без оптимізації, 2 – з оптимізацією.

Видно що ефект використання оптимальних режимів відчутний для всіх досліджуваних плівок, причому він зростає при збільшенні  $\gamma$  [6].

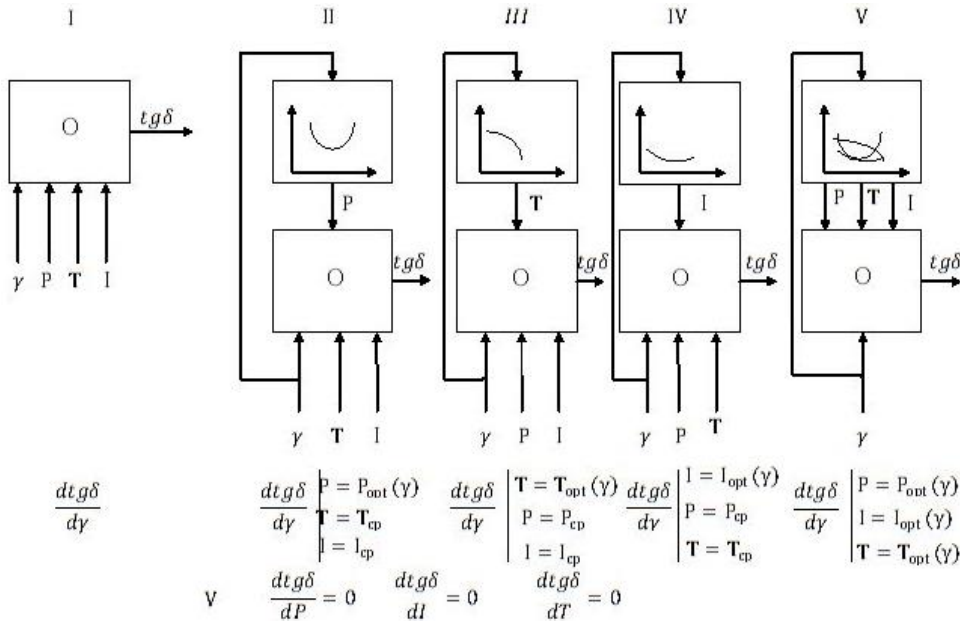


Рис. 5.2. Схема варіантів оптимального управління

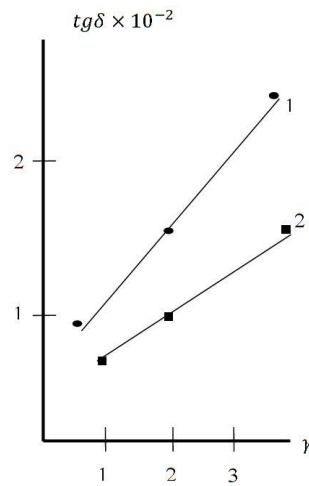


Рис. 5.3. Результат розрахунку оптимізації технологічного процесу одержання плівки  $SiO_2$

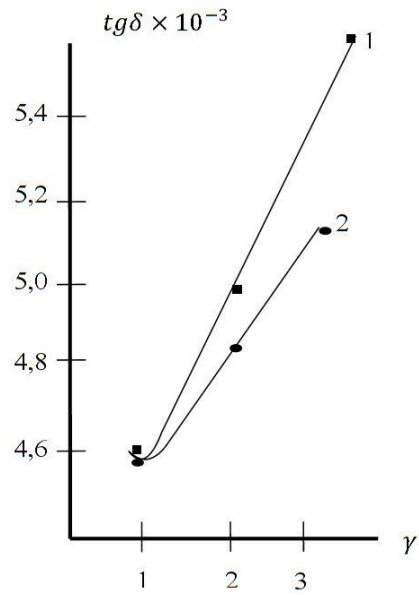


Рис. 5.4. Результат розрахунку оптимізації технологічного процесу одержання плівки  $\text{Si}_3\text{N}_4$

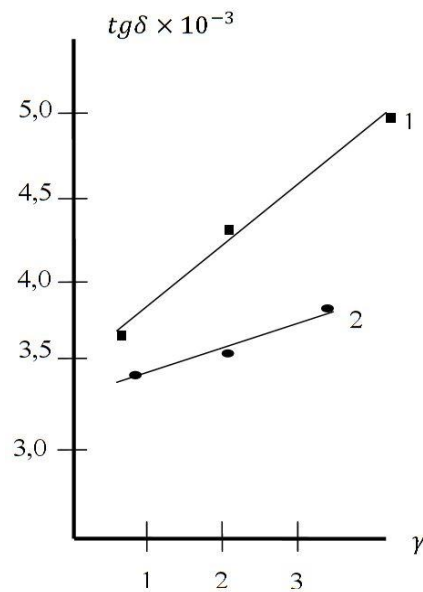


Рис. 5.5. Результат розрахунку оптимізації технологічного процесу одержання плівки  $\text{Si}_x\text{O}_y\text{N}_z$

## 6. Висновки

Таким чином, в результаті дослідження процесу осадження, обробки його результатів, побудована математична модель якості процесу осадження, що



дозволяє отримувати функціональні залежності для розрахунку оптимальних керуючих впливів в залежності від збурень. Аналіз математичної моделі процесу отримання структур  $SiO_2 - Si_xO_yN_z - Si$  дозволяє розробити узагальнений алгоритм управління для АСУТП.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. В.Н. Кеменов, С.Б. Нестеров, О.С. Зилова, Е.Н. Капустин. Исследование качества тонкоплёночных покрытий, полученных на установках магнетронного и вакуумноплазменно-дугового осаждения, с использованием метода СЗМ// Сборник докладов Международного научно-практического симпозиума “Функциональные покрытия на стёклах”. Харьковская Научная Ассамблея, 2003, с.113-117.
2. Гурин, В.Н. Математические модели технологического процесса напыления наноструктурированных диэлектрических плёнок, полученных методом ионно-плазменного распыления [Текст] / В.Н. Гурин, А.Г. Фирсов, Д.В. Гурин // В сб: Автоматизированные системы управления и приборы автоматики, вып.161, Харьков, 2012. – 136 с.
3. Жуков, В.В. Распыление мишени магнетронного диода в присутствии внешнего ионного пучка [Текст] / В.В. Жуков, В.П. Кривобоков, С.Н. Янин. – М: Радио и связь, 2006. – 140 с.
4. Мікросистемна техніка та нанотехнології: монографія / Невлюдов І.Ш., Палагін В.А. - Киев, НАУ 2017. – 528 с.
5. Автоматизоване управління технологічним процесом витягування мікроструктурованих оптичних волокон: монографія / Филипенко О.І., Невлюдов І.Ш., Пономарьова Г.В. - Харків: Бурун і К, 2015. – 132 с.
6. Гурін Д.В. Аналіз методів отримання наноструктурованих діелектричних плівок [Текст] / А.О. Андрусевич, Д.В. Гурін, І.Н. Малая // В сб: Технология приборостроения, вып 3, Харків 2016 – 7с.