

УДК 681.518: 666.1/28

РАЗРАБОТКА И ИССЛЕДОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И АЛГОРИТМОВ ОПТИМИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ ПОДЛОЖЕК ДЛЯ МЕМРИСТОРОВ

¹Малюков С.П., ¹Клунникова Ю.В., ¹Ковалев А.В., ²Лашков А.В.

¹ФГАОУ ВПО «Южный федеральный университет», Ростов-на-Дону,
e-mail: jklunnikova@rambler.ru;

²Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина,
Саратов, e-mail: jklunnikova@rambler.ru

Освещены вопросы разработки математических моделей и алгоритмов оптимизации технологии изготовления подложек из сапфира для элементов электронной техники (мемристоров). Проведены исследования свойств кристаллов сапфира и разработаны режимы их выращивания, обеспечивающие получение материала с заданными структурными параметрами. Рассматривается численная трехмерная модель с вычислительным программным обеспечением для расчетов распределения температурного поля для кристаллов сапфира. С помощью разработанной численной модели проведен ряд расчетов для изучения влияния теплофизических свойств материалов на процесс кристаллизации монокристаллов сапфира. Рассматриваются алгоритмы интеллектуальной поддержки при принятии решения в процессе роста и обработки сапфира. Приводятся результаты исследований по формированию структуры монокристаллов сапфира при обработке. На основании полученных результатов оптимизирована технологическая методика изготовления подложек из монокристаллов сапфира для электронной техники.

Ключевые слова: мемристор, оптимизация производства, монокристаллы сапфира, алгоритм принятия решения

DEVELOPMENT AND EXPLORATION OF MATHEMATICAL MODELS AND OPTIMIZATION ALGORITHMS FOR MEMRISTOR'S SUBSTRATES PRODUCTION TECHNOLOGY

¹Malyukov S.P., ¹Klunnikova Y.V., ¹Kovalev A.V., ²Lashkov A.V.

¹Southern Federal University, Rostov-on-Don, e-mail: jklunnikova@rambler.ru;

²Saratov State Technical University, Saratov, e-mail: jklunnikova@rambler.ru

The development of sapphire substrates production technology mathematical models and optimization algorithms for electronic equipment (memristors) is described. Sapphire crystal properties investigation was made. The sapphire production regime was developed. It allows to receive the material with required parameters. The numerical three-dimensional model with software was developed for calculating temperature distribution in sapphire crystals. This model allows to make the calculations for research of sapphire heat properties influence on crystallization process. The decision making algorithms for sapphire growth and treatment are described. The investigation of sapphire structure treatment is reported. The results allow to optimize the technological methodology of sapphire substrates production for electronic equipment.

Keywords: memrisor, production optimization, sapphire crystals, algorithm for decision making

Мемристор – это пассивный двухполюсный элемент, который может менять свое сопротивление под воздействием суммарного электрического тока, протекающего через него. Его вольт-амперная характеристика может динамически меняться с помощью воздействия импульсов электрического тока. Использование сапфировых подложек для элементов электронной техники (в частности, мемристоров) является весьма перспективным [10]. Подложки – одна из областей конструкционного применения сапфира. К достоинствам сапфировой подложки относят инертность, возможность работы при высоких температурах и механических нагрузках, возможность получения подложек больших размеров. Поэтому их применяют даже, когда параметры решетки не совсем совпадают с параметрами гетероэпитаксиальных структур. Они ис-

пользуются, в частности, для получения эпитаксиальных слоев кремния на сапфире (КНС), GaN, InN, AlN, GaP, для производства интегральных схем, высокоинтенсивных диодов и СВЧ-транзисторов.

С развитием технологии растут требования к качеству структуры этого материала [1, 2, 9]. Известно, что на качество выращиваемых монокристаллов влияет множество критериев, и в первую очередь – условия выращивания. Это емкое понятие и включает в себя множество других, таких, как распределение температуры в кристаллизационной камере, температурный градиент и его изменение, процессы, происходящие на межфазной границе кристалл-расплав и их влияние на итоговую структуру монокристаллов, процесс отжига кристалла при охлаждении после роста и их последующая термическая и механическая обработка [4].

Именно поэтому в данной работе основной целью является разработка математических моделей и алгоритмов оптимизации технологии изготовления подложек из монокристаллического сапфира для элементов электронной техники.

Комплексная технологическая схема изготовления пластин-подложек Al_2O_3 [7], включающая выращивание кристаллов и собственно изготовление подложек, представлена на рис. 1.

Основными отличиями применяемой в работе методики для усовершенствования технологии получения подложек из сапфира являются:

– использование методов экспертной оценки и планирования эксперимента в ходе проведения моделирования с целью построения моделей зависимости выходных параметров (уровни дефектов и т.п.) от исходных данных (скорость роста, мощность нагревателя и т.п.);

– разработка оптимизационной модели;

– использование специализированной базы данных, позволяющей более адекватно учитывать особенности технологии;

– комплексное рассмотрение трех основных этапов получения подложек из сапфира: рост, шлифование и полирование кристаллов.

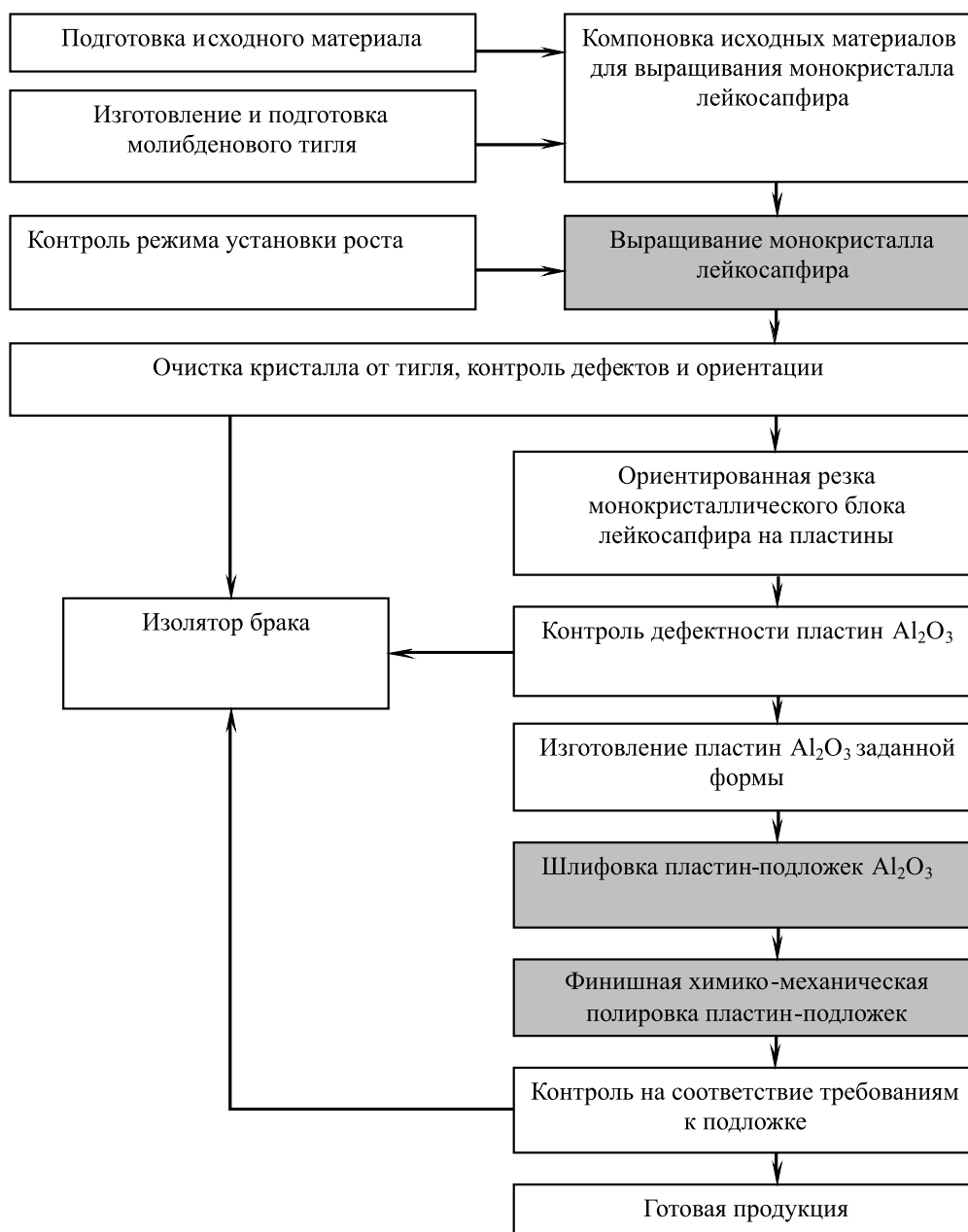


Рис. 1. Комплексная технологическая схема выращивания кристаллов сапфира и изготовления пластин-подложек для мемристоров

Для разработки и корректировки технологических режимов выращивания монокристаллов методом горизонтальной направленной кристаллизации (ГНК), а также для возможности усовершенствования конструкции теплового узла необходимо иметь представление

$$\frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial \tau} = \left(\frac{\partial}{\partial x} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} a_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial z} \right) - W \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)}{\partial x}, \quad (1)$$

$$0 < x < x_L, 0 < y < y_L, 0 < z < z_L,$$

где $i = 1, 2, 3$ – соответственно кристалл, расплав и шихта; a_i – коэффициенты теплопроводности ($a_i = \frac{\lambda_i}{\rho_i \cdot C_i}$, где λ_i – коэффициент теплопроводности; ρ_i – плотность материала; C_i – удельная теплоемкость); W – скорость движения контейнера.

Экспериментальные исследования показали, что градиент температур в ростовой установке составляет 25–50°C на сантиметр. Из этого можно сделать вывод о том, что процесс находится в квазистационарном состоянии, а распределение температуры можно найти по следующей формуле [3, 8, 9]:

$$\operatorname{div}(\lambda_i \operatorname{grad} T_i(x, y, z)) = 0. \quad (2)$$

Граничные условия для системы уравнений (2), отражающие неразрывность тепловых полей и тепловых потоков на границах раздела сред, записываются в виде следующих соотношений:

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_T, y, z)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(x_T, y, z)}{\partial x}; \quad (3)$$

$$\lambda_2 \frac{\partial T_2(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x} = \lambda_3 \frac{\partial T_3(x_T + \Delta x, y, z)}{\partial x}; \quad (4)$$

$$q_{s_1} = q_{s_2} = q_{s_3} = \sigma \beta (T^4 - T_{hot}^4), \quad (5)$$

где σ – постоянная Стефана-Больцмана; β – коэффициент излучения; T_{hot} – функция, задающая распределение температуры на кристаллизаторах.

Результаты расчета показали, что прозрачность монокристаллов сапфира в кристаллической фазе и непрозрачность в расплаве непосредственно влияет на радиационные потоки в системе, а учитывая их весомый вклад в общий теплообмен, данный фактор влияет и на температурное поле, и на положение фронта кристаллизации. Температурные поля влияют на интенсивность радиационного переноса теплоты. Для оценки степени этого влияния проведены расчеты при повышении уровня температуры в системе кристалл-расплав-шихта

о распределении температуры в кристаллизационной камере в процессе выращивания.

Задача о нахождении распределения температуры в системе кристалл-расплав-шихта сводится к решению уравнения теплопроводности [3, 8]:

на 300 К. Результаты показали, что ширина расплава увеличивается на 11 %.

В процессе реализации структуры мемристора необходимо рассматривать вопросы обработки сапфировых подложек: ориентированную резку монокристаллического блока на пластины, шлифовку подложек, финишную химико-механическую полировку пластин-подложек. На этапе механической обработки исследовалась технология двухсторонней шлифовки. При исследовании шлифования пластин свободным абразивом было выявлено [7], что такие пластины имеют ровную матовую поверхность, без следов направлений обработки. Шлифовка свободным абразивом обеспечивает лучшее качество поверхности пластин. Шероховатость обработанных поверхностей снижается, а фактура и чистота их улучшается по мере уменьшения зернистости алмазных порошков в инструменте или суспензии (деионизованная вода – 66,7%, глицерин – 11,11%); при переходе от твердых шлифовальных инструментов на операциях грубого и тонкого шлифования к эластичным и мягким полировальным инструментам из полиуретана и замши на заключительных этапах обработки.

Исследована возможность использования закономерностей микроразрушения монокристаллов единичным зерном абразива для прогнозирования показателей процессов массового воздействия абразивными частицами при обработке [6].

В реальных условиях определенной длительности шлифования, когда в каждый момент времени на кристалл одновременно действует большое количество зерен, конечная дислокационная структура приповерхностного слоя определяется динамическим равновесием между скоростью сошлифования кристалла и скоростью образования новых дислокаций. Исходя из связи между зоной пластичности и глубиной внедрения зерна в кристалл следует, что увеличение твердости абразива и шлифовальника будет приводить к увеличению слоя с повышенной плотностью дислокаций.

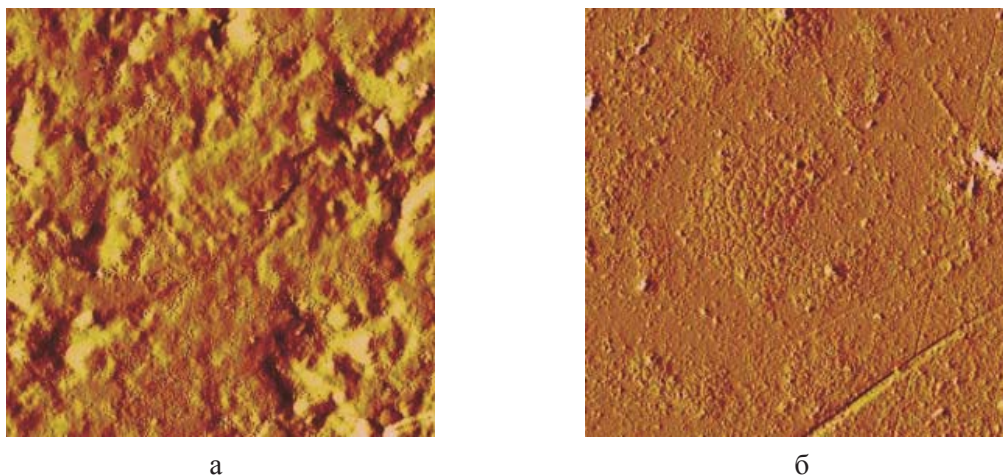


Рис. 2. Микрофотографии поверхности сапфира после обработки алмазным порошком ACM 28/20 (а) и ACM 1/0 (б)

На рис. 3 представлена зависимость влияния материала шлифовальника и радиуса абразива на глубину приповерхностного поврежденного слоя и глубину залегаемых боковых трещин.

На основе проведенных исследований, разработанных моделей и алгоритмов созданы программные модули, которые приведены на рис. 4.

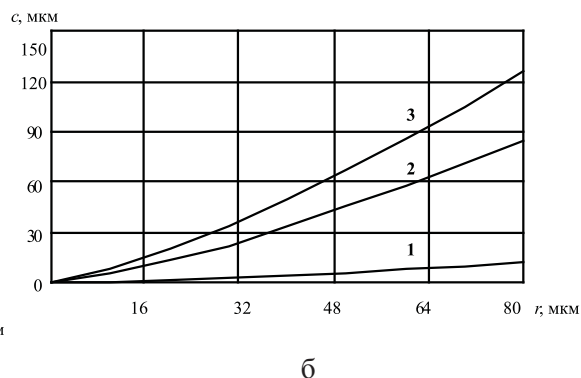
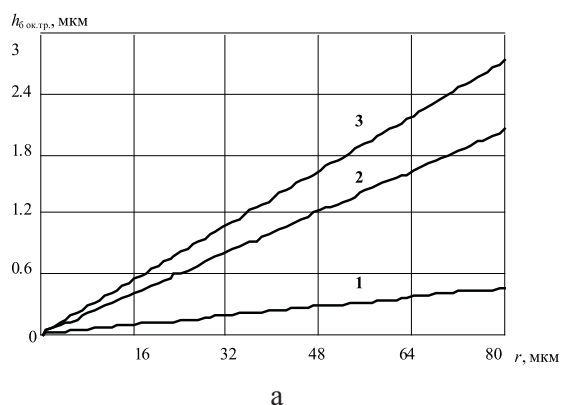


Рис. 3. Влияние материала шлифовальника (1 – латунь, 2 – чугун, 3 – стекло) и радиуса абразива на глубину приповерхностного поврежденного слоя (а) и глубину залегаемых боковых трещин в монокристаллах сапфира (б)

Заключение

Таким образом, задача выбора оптимальных условий технологии изготовления подложек для мемристоров решалась на основе методов оптимизации, а также при сочетании методов аналитического моделирования с экспериментом и технологией экспертных систем. Были проведены исследования структуры поверхности подложек на различных этапах изготовления. Разработаны математические модели влияния параметров роста и обработки сапфира на качество получаемых подложек. На основании предложенных моделей и алгоритмов создан пакет компьютерных программ, предназначенный для интеллектуальной поддержки при принятии решения в про-

цессе роста и обработки кристаллов, позволяющий повысить производительность процесса изготовления подложек в среднем на 15%. Результаты экспериментальных исследований и программное обеспечение дают достаточно полную информацию об особенностях реальной структуры монокристаллических подложек из сапфира и могут быть эффективно использованы при оптимизации технологии подготовки подложек для мемристоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (гос. соглашение №14.А18.21.0107) в рамках ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009–2013 годы.

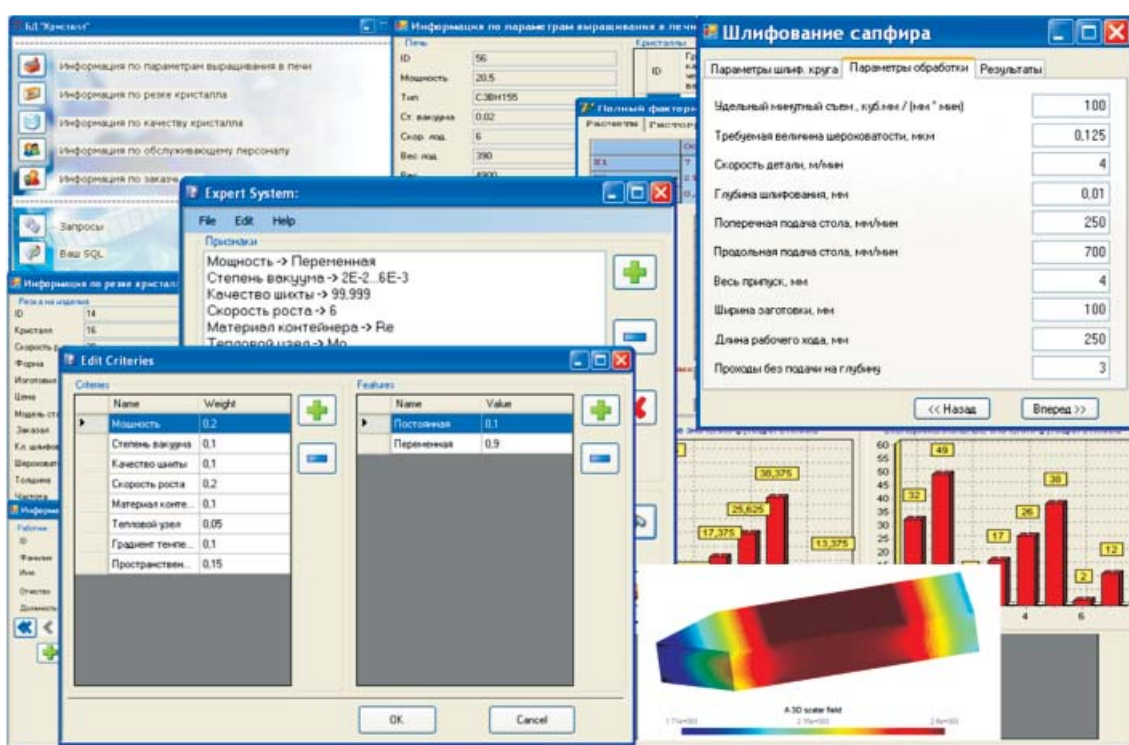


Рис. 4. Интерфейс программы интеллектуальной поддержки при принятии решения в процессе роста и обработки кристаллов сапфира

Список литературы

1. Багдасаров Х.С. Высокотемпературная кристаллизация из расплава. – М.: Физматлит, 2004. – 160 с.
2. Добровинская Е.Р., Литвинов Л.А., Пищик В.В. Энциклопедия сапфира. – Харьков: НТК «Институт монокристаллов», 2004. – 508 с.
3. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 600 с.
4. Малоюков С.П., Клунникова Ю.В. Оптимизация производства изделий из сапфира для электронной техники. – Lap Lambert Academic Publishing, 2012. – 151 с.
5. Малоюков С.П., Клунникова Ю.В. Моделирование распределения температуры в процессе роста монокристаллов сапфира методом горизонтальной направленной кристаллизации в трехмерных координатах // Известия ЮФУ. Технические науки. Тематический выпуск «Нанотехнологии». – 2011. – № 4. – С. 86–94.
6. Малоюков С.П., Клунникова Ю.В., Куликова И.В. Программа расчета основных параметров процесса получения изделий из кристаллов сапфира для электронной техники // Свидетельство о регистрации электронного ресурса № 17518 от 26.10.2011.
7. Малоюков С.П., Нелина С.Н., Стефанович В.А. Физико-технологические аспекты изготовления изделий из сапфира. – Lap Lambert Academic Publishing, 2012. – 164 с.
8. Першин И.М. Анализ и синтез систем с распределенными параметрами. – Пятигорск, 2007. – 244 с.
9. Dobrovinskaya E., Lytvynov L., Pishchik V. Sapphire & other corundum crystals. Institute for Single Crystals. – Kharkiv, 2002. – 294 p.
10. Driscoll T., Kim H.-T., Chae B.-G., Ventra M. Di, and Basov D. N. Phase-transition driven memristive system. Applied physics letters, 2009. URL: http://infrared.ucsd.edu/basov_pubs (дата обращения: 20.07.12).

References

1. Bagdasarov H.S. Vysokotemperaturnaya kristallizatsiya iz raspplava (High-temperature crystallization from the melt) Moscow, 2004. 160 p.
2. Dobrovinskaya E.R., Lytvynov L.A., Pishchik V.V. Encyclopedia sapphira (Encyclopedia of Sapphire) Institute for Single Crystals. Kharkiv, 2004. 508 p.
3. Lykov A.V. Teoriya teploprovodnosti (Theory of heat conduction). – Moscow, 1967. – 600 p.

4. Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Optimizatsiya proizvodstva izdeliy iz sapfira dlya elektronnoy tekhniki (Optimization of sapphire production for electronic technique). – Lap Lambert Academic Publishing, 2012. 151 p.
5. Malyukov S.P., Klunnikova Yu.V. Modelirovanie raspredeleniya temperatury v protsesse rosta monokristallov sapfira metodom gorizontally napravlennoy kristallizatsii v trekhmernykh koordinatakh (Simulation of the temperature distribution for sapphire crystals growth process by the method of horizontal directed crystallization in the three-dimensional coordinates // News of SFU. Technical science. 2011. no. 4. pp. 86–94.
6. Malyukov S.P., Klunnikova Yu. V., Kulikova I.V. Programma rascheta osnovnykh parametrov protsessa polucheniya izdeliy iz kristallov sapfira dlya elektronnoy tekhniki (Program for calculation of the main parameters of sapphire crystals production for electronic technique) // no. 17518 (26 November 2011).
7. Malyukov S.P., Nelinina S.N., Stefanovich V.A. Fiziko-tekhnologicheskie aspekty izgotovleniya izdeliy iz sapfira (Physico-technological aspects of sapphire products manufacturing). Lap Lambert Academic Publishing, 2012. 164 p.
8. Pershin I.M. Analiz i sintez sistem s raspredelennymi parametrami (Analysis and synthesis of systems with distributed parameters). Pyatigorsk, 2007. 244 p.
9. Dobrovinskaya E., Lytvynov L., Pishchik V. Sapphire & other corundum crystals. Institute for Single Crystals. Kharkiv, 2002. 294 p.
10. Driscoll T., Kim H.-T., Chae B.-G., Ventra M. Di, and Basov D. N. Phase-transition driven memristive system. Applied physics letters, 2009. URL: http://infrared.ucsd.edu/basov_pubs (accessed 20 July 2012).

Рецензенты:

Жорник А.И., д.ф.-м.н., профессор кафедры теоретической, общей физики и технологии физико-математического факультета Таганрогского государственного педагогического института имени А.П. Чехова, г. Таганрог;
 Агеев О.А., д.т.н., профессор, директор Научно-образовательного центра «Нанотехнологии» Южного федерального университета, г. Таганрог.

Работа поступила в редакцию 16.10.2012.