



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование



НАНОСТРУКТУРЫ

математическая физика и моделирование

Nanostructures.
Mathematical Physics & Modelling

2024, volume 24(1)

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Редколлегия:

**В.А. Аветисов, А.А. Белолипецкий И.В. Волович,
В.В. Гусаров, Н.А. Дюжев, П.Н. Дьячков,
Р.Г. Ефремов, Ю.Ф. Крупянский, Ю.Е. Лозовик, М.А. Мазо,
А.В. Махиборода (ответственный секретарь), А.Ю. Морозов,
С.А. Никитов, Г.Э. Норман, Р.А. Сурис, В.А. Тулин, Ю.А. Флёров,
А.С. Холево, А.Р. Хохлов, А.В. Чаплик,
Л.А. Чернозатонский, К.В. Шайтан**

Электронная версия журнала размещается на сайте
<http://nano-journal.ru>

Адрес редакции:

123458, Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 429
+7 (495) 916-88-76
nanostructures@hse.ru

Контакты для представления статей и деловой переписки

Ответственный секретарь Махиборода А.В.
+7 (916) 578-95-27
makhiboroda@yandex.ru

Москва

© 2024, ООО Сенсор Микрон

Содержание

В.Ф. Дегтярев О перестройке резонансных туннельных уровней в процессе образования квантово-размерной цепочки	5
Фомичёв М.Ю., Иванин П.С., Беспалов В.А., Махиборода М.А., Гусев Е.Э., Дюжев Н.А. Основные технологические операции изготовления TSV	21
Б.В. Лобанов, Г.Д. Демин, И.Д. Евсиков, Н.Н. Патюков, Н.А. Дюжев Первопринципный подход к моделированию металлических автоэмиссионных структур с наноразмерным вакуумным зазором	51
Информация и правила для авторов	71

Contents

V.F. Degtiarev On the reconstruction of resonant tunnel levels in the process of formation of a quantum-size chain	5
Fomichev M.Y., Ivanin P.S., Bespalov V.A., Makhaboroda M.A., Gusev E.E., Djuzhev N.A. The main technological operations of TSV manufacturing	21
B.V. Lobanov, G.D. Demin, I.D. Evsikov, N.N. Patyukov, N.A. Djuzhev A first-principles approach to the simulation of metallic field-emission structures with a nanoscale vacuum gap	51
The information and rules for authors	71

О ПЕРЕСТРОЙКЕ РЕЗОНАНСНЫХ ТУННЕЛЬНЫХ УРОВНЕЙ В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ КВАНТОВО-РАЗМЕРНОЙ ЦЕПОЧКИ

В.Ф. Дегтярев

*Московский технический университет связи и информатики,
Москва, Авиамоторная ул., 8а;
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Поступила 07.10.2024

Исследован механизм перестройки резонансных туннельных уровней в процессе образования слоистой квантово-размерной структуры с базисом из двух барьеров различной высоты. Установлено, что с увеличением числа звеньев происходит расщепление этих уровней на близкие подуровни и изменение волновой функции. Рассмотрен механизм перестройки уровней в цепочке, основанный на представлениях о смене фаз колебаний осцилляторов. Рассмотрен подробно случай, когда энергия частицы превышает высоту малого барьера.

Ключевые слова: квантовая механика, квантовый барьер, волновая функция, прозрачность, наноэлектроника, резонансное туннелирование.

DOI: 10/31145/2224-8412-2024-24-1-5-20

Введение

Резонансное туннелирование в квантово-размерных структурах представляет собой новое быстро развивающееся направление исследований в наноэлектронике. Описанию свойств подобных структур посвящен ряд обзоров, например [1-3]. В этих работах достаточно подробно рассмотрена их энергетическая структура, оптические и электрические свойства.

В современных наноэлектронных приборах (резонансных туннельных диодах и транзисторах и др.) активная область имеет размеры порядка не-

скольких нанометров. Эта величина сравнима с длиной волны электрона и межатомным расстоянием типичных полупроводников, что приводит к существенному влиянию квантово-размерных эффектов на работу приборов. Размерное квантование приводит также к перестройке энергетического спектра наноструктур [4,5]. При этом в цепочке возникают новые резонансные уровни, приводящие к значительному изменению их электрических и оптических свойств.

В данной работе изучен процесс перестройки этих уровней при изменении параметров цепочки. Значительное внимание уделено случаю, когда энергия частицы (E) превосходит высоту малого барьера (U_1), т. е. выполнено условие $U_1 < E < U_2$. Случай малой энергии микрочастицы ($E < U_1$) достаточно подробно рассмотрен в работах [6,7].

Методика моделирования и структуры, исследованные в работе

В настоящей работе нахождение волновых функций и коэффициентов прозрачности системы барьеров проводилось путем решения уравнения Шредингера в системе компьютерной алгебры MAPLE. Подобные системы помимо численного решения поставленной задачи позволяют получить и аналитическое решение, что делает расчеты более наглядными, и позволяет не только построить теоретическую модель физического процесса, но и визуализировать полученные результаты. В основу расчета положены основные результаты работ [8,9] по распространению волн через многослойные среды. Используемые методы удобно применять к распространению одномерных (в том числе и электронных) волн в прямом и обратном направлении, но возможно их применение и к электромагнитным волнам. В работе рассмотрена цепочка со сложным базисом, состоящим из барьеров различной высоты. Результаты исследования резонансных

туннельных уровней (РТУ) в элементарной ячейке из двух барьеров приведены в [6,7]. В данной работе увеличение длины цепочки производится путем последовательного присоединения к элементарному звену дополнительных барьеров. Рассмотрены два варианта: 1) когда в начале цепочки стоит высокий (случай А) барьер; 2) когда в начале низкий (случай Б) барьер.

Последующие барьеры присоединяются к предыдущим регулярным образом путем чередования высоких и низких барьеров. Схемы образовавшихся цепочек показаны на рис. 1.

Параметры барьеров в цепочке принимались следующими: ширина барьеров (a) и ям (b) — 1 нм, что примерно соответствует межатомному расстоянию в кристаллах. Высота большого барьера (U_2) составляла 2, высота малого барьера (U_1) — 1. Амплитуда падающей волны принималась равной единице. В работе исследована зависимость волновых функций, прозрачности и положения резонансных туннельных уровней (РТУ) от характеристик цепочки.

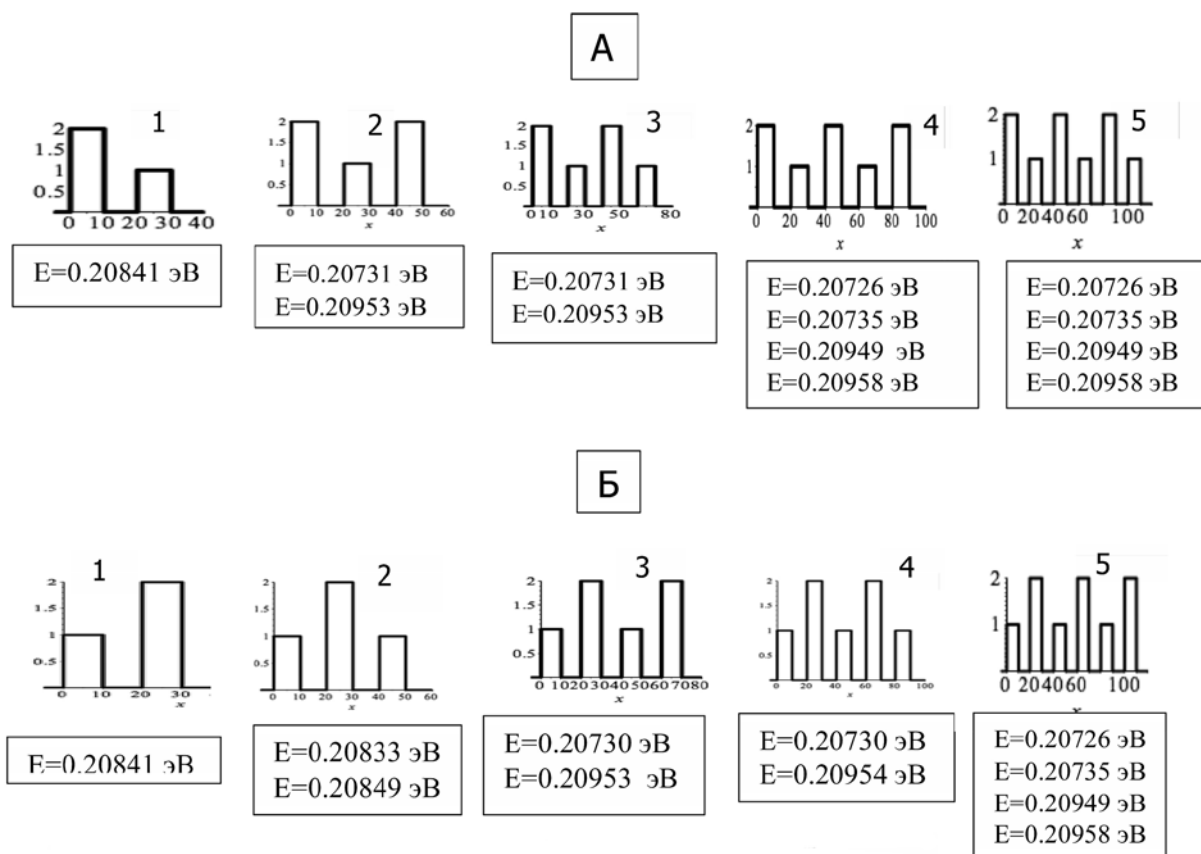


Рис.1 Схемы цепочек и энергии резонансных уровней в них.

Некоторые свойства резонансных туннельных уровней в звеньях из двух и трех барьеров

Результаты моделирования показывают, что в двухбарьерной структуре (рис.1-1А и рис.1-1Б) наблюдаются энергетические уровни $E_1=0.2084$ эВ и $E_2=0.78$ эВ. Их энергия меньше, чем в ячейке с барьерами одинаковой высоты (0.228 эВ и 0.88 эВ соответственно). Зависимость энергии уровней от соотношения высот барьеров приведена в [6]. Рассмотрим спектры прозрачности, соответствующие различным уровням в трехбарьерной структуре с конфигурацией типа А и Б. Здесь представляет интерес рассмотреть три варианта: 1) $E < U_1$ (подбарьерное движение), 2) $U_1 < E < U_2$ (промежуточный случай), 3) $E > U_2$ (надбарьерное движение). Спектры прозрачности структур показаны на рис. 2.

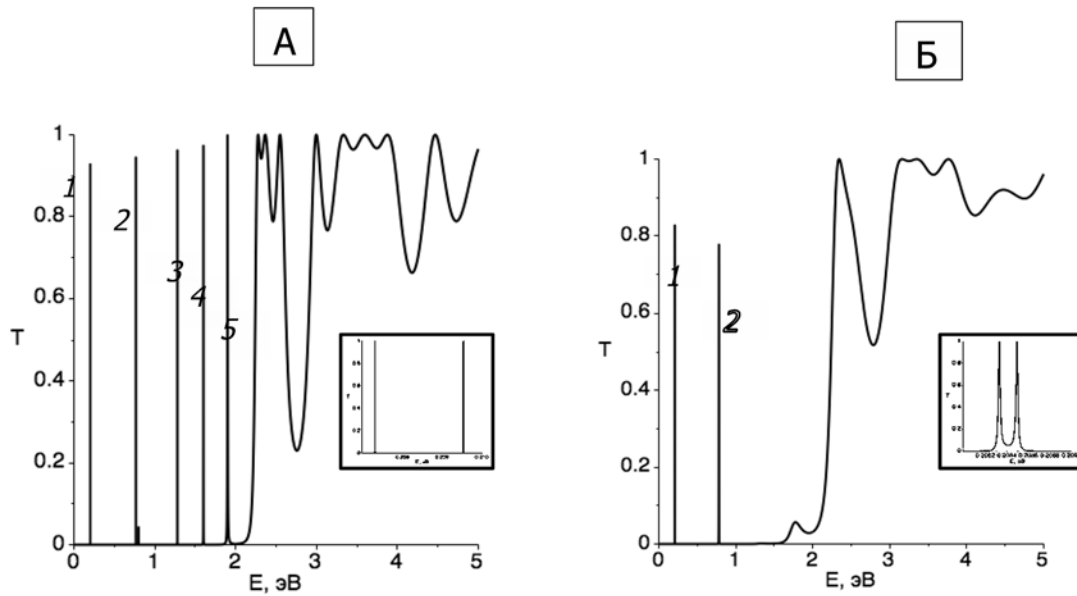


Рис. 2. Спектр прозрачности структур типа 2А (А) и 2Б(Б) (см. рис. 1).

Энергии РТУ: 1-0.208 эВ; 2-0.78 эВ; 3-1.28 эВ; 4-1.60 эВ ; 5-1.90 эВ.

На вставках показана схема расщепления уровня $E_1(0.208 \text{ эВ})$

в структурах типа А и Б.

В случае 1 наблюдаются РТУ, обусловленные резонансом при отражении волны от высокого и низкого барьеров. Это пики 1 и 2 на рис. 2А и 2Б (0.208 эВ и 0.78 эВ). Величина расщепления при этом определяется конфигурацией системы и коэффициентом связи между элементарными ячейками. В структуре, показанной на рис. 2-А, связь достаточно велика и величина расщепления составляет 0.002 эВ. Энергия основного состояния составляет 0.2073 эВ. Этому состоянию соответствует четная конфигурация волновой функции, при которой волны в соседних звеньях складываются в одной фазе. При этом волновая функция не обращается в ноль ни в одной точке рассматриваемого интервала (см. рис. 3А- вставка). Для системы рис. 2-Б расщепление мало и равно 0.00015 эВ, что обусловлено тем обстоятельством, что между ячейками располагается высокий барьер, препятствующий эффективному взаимодействию звеньев. Первому возбужденному состоянию в этом случае соответствует нечетная конфигурация. Волны в соседних ямах при этом складываются в противоположных фазах и наблюдается одна точка смены фаз колебаний и волновая функция обращается в ноль один раз (рис. 3-Б).

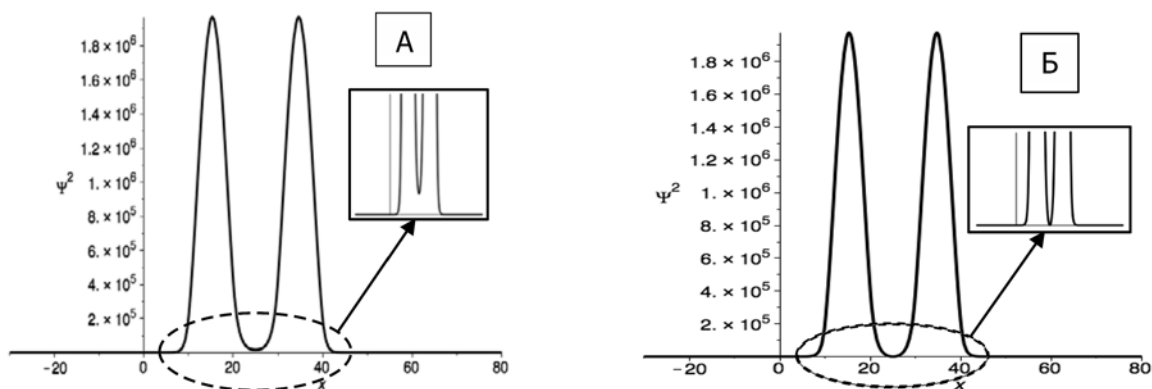


Рис.3. Волновые функции основного (А) и возбужденного (Б) состояний уровня $E=0.2084$ эВ в цепочке из трех барьеров (рис. 2А).

А-четное (основное) состояние, $E=0.2073$ эВ.

Точек смены фаз колебаний нет;

Б-1-ое возбужденное состояние, $E=0.2095$ эВ.

Одна точка смены фаз колебаний;

Точками смены фаз колебаний являются точки, в которых волновая функция обращается в ноль.

Во втором случае, когда $U_1 < E < U_2$, в системе, показанной на рис.1 -2А наблюдаются уровни $E_3=1.28$ эВ, $E_4=1.60$ эВ и $E_5=1.90$ эВ, отсутствующие в системе 2Б. Энергия этих уровней превышает высоту низкого барьера. Их образование происходит при взаимодействии с высокими барьерами. Влиянием низкого барьера при этом можно пренебречь. В ячейках типа рис.1- 2Б на концах располагаются низкие барьеры. Уровни с энергией $E > U_1$ вследствие слабой связи не возникают.

При надбарьерном движении энергия частицы $E > U_2$. Кривая прозрачности для этого случая показана на рис. 2 (область $E > 2$ эВ). Здесь вместо отдельных пиков наблюдаются более широкие полосы, что обусловлено более слабым взаимодействием электрона с барьером. Расчеты прозрачности для симметричной двухбарьерной структуры для случая $E > U_2$ приведены, например, в [4]. Уровень с энергией 2.37 эВ наблюдается как в двух-, так и в трехбарьерной структуре. Он является наиболее близким к барьеру и взаимодействует с ним более сильно. Из рис. 2 следует, что этот пик представляет собой суперпозицию двух уровней с энергиями 2.371 эВ и 2.376 эВ. В случае уровня $E=2.371$ эВ, как следует из [4,6], между соседними высокими барьерами образуется стоячая волна, что говорит о взаимодействии барьеров между собой. Когда $E=2.376$ эВ, между барьерами стоячая волна не образуется, и в промежутке частица движется свободно. Такое движение можно рассматривать как движение над системой невзаимодействующих изолированных барьеров. Это подтверждается также сходством волновых

функций и равенством энергии прозрачности этого уровня и одиночного барьера.

Перестройка резонансных уровней в многобарьерной цепочке

Рассмотрим процесс перестройки РТУ при образовании многозвенной цепочки. Пусть $E < U_2$. Этому условию удовлетворяют уровни с энергией 0.208 эВ, 0.78 эВ, 1.28 эВ, 1.60 эВ и 1.88 эВ. Рассмотрим сначала уровень 0.208 эВ. Расщепление остальных уровней происходит аналогично. Схемы расщепления уровня 0.208 эВ в цепочках типа А и Б приведены на рисунках 4-6. Отметим основные моменты.

1. Увеличение длины цепочки приводит к существенному изменению их энергетического спектра. Прежде всего для расщепления РТУ необходимо, чтобы сформировались соответствующие резонансные звенья. В рассматриваемом случае это звено представляет собой два барьера (высокий и низкий), разделенные потенциальной ямой. Перестройка уровней наблюдается, если связь между ячейками достаточно велика. Для этого необходимо, чтобы эти элементарные ячейки были разделены барьером малой высоты (рис. 1- 2А). В этих структурах происходит расщепление уровней $E=0.2084$ эВ, наблюдающихся в двухбарьерных звеньях (рис. 4 и 5). Два малых барьера, разделенные высоким, взаимодействуют между собой слабо, и расщепление уровня 0.2084 эВ не наблюдается (рис.1-2Б). Поскольку в формировании подобных ячеек участвуют два элементарных звена, расщепление уровня 0.2084 эВ происходит в два раза реже.

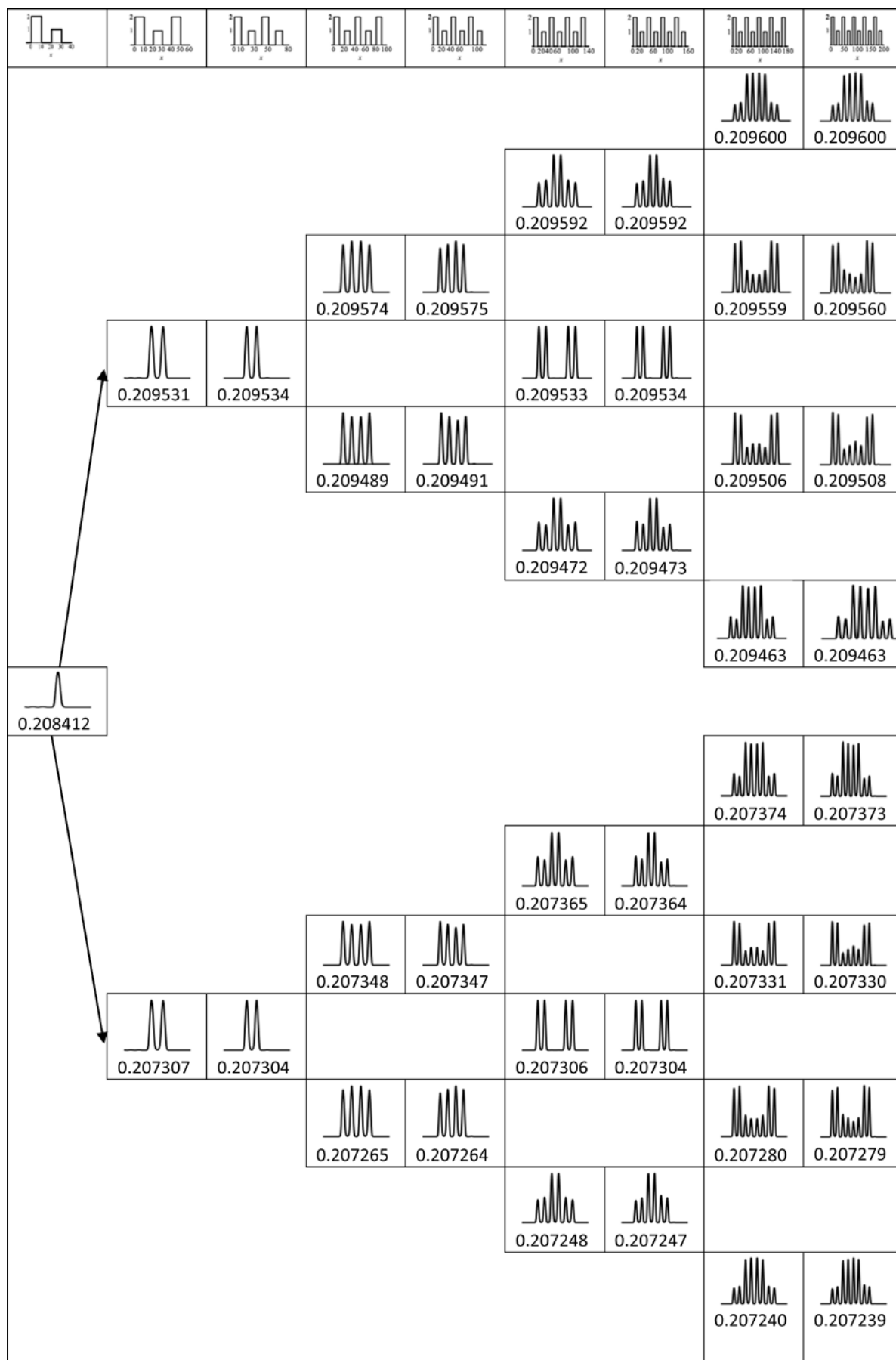


Рис.4. Схема перестройки уровня $E=0.208$ эВ в цепочке в базисом (тип А)

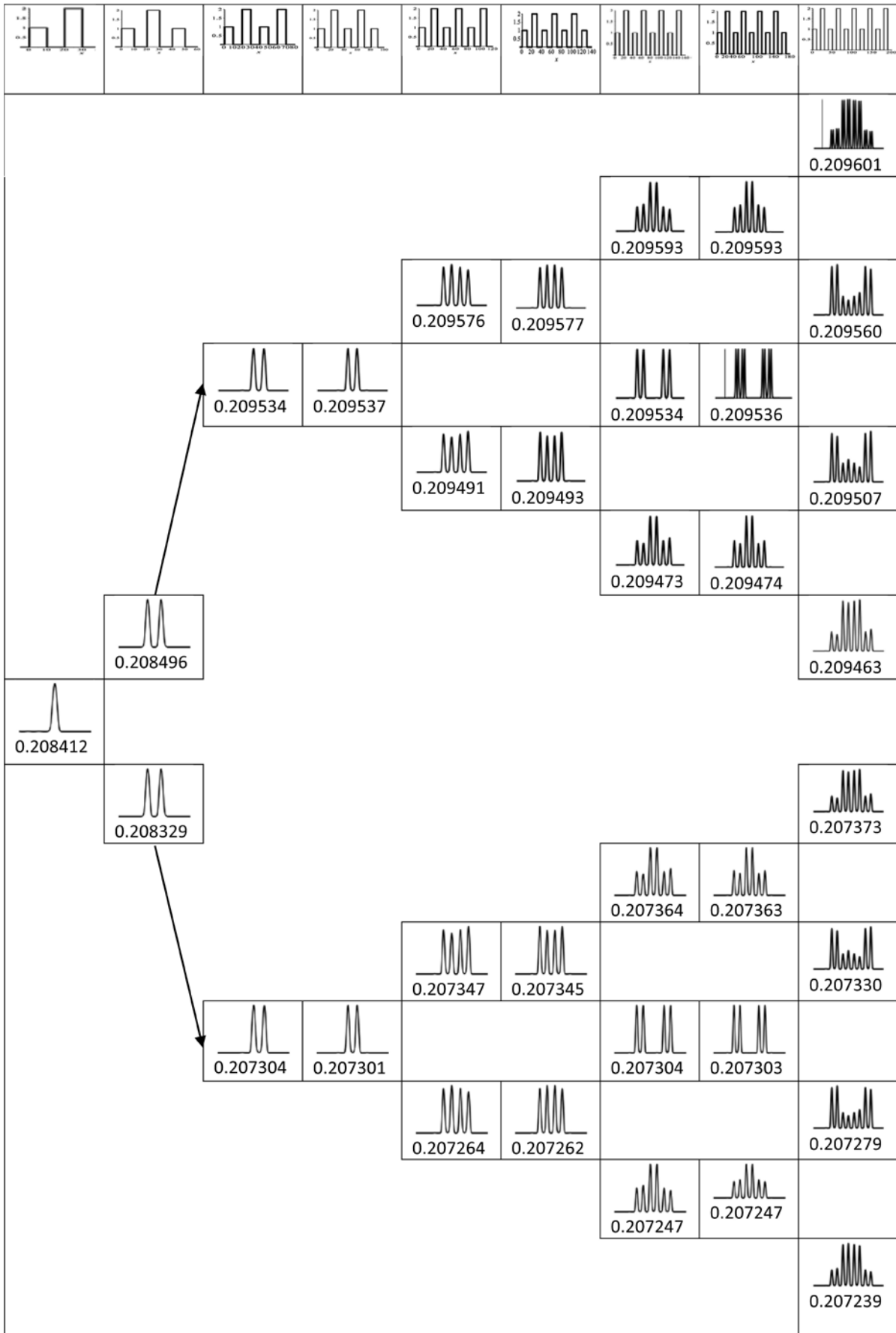


Рис. 5. Схема перестройки уровня $E=0.208$ эВ в цепочке в базисом (тип Б)

2. Низкие потенциальные барьеры при перестройке РТУ играют второстепенную роль. Так низкий барьер, стоящий в конце или в начале цепочки, не влияет на расщепление РТУ (рис. 2.). Перестройка происходит только, когда в конце или в начале цепочки появляется высокий барьер. Поскольку при увеличении длины цепочки происходит чередование высоких и низких барьеров в конце, то и расщепление уровней происходит через один шаг (рис. 4, 5).

3. Понять механизм расщепления РТУ, можно исходя из представлений о смене фаз колебаний, развитых в [4,6,7]. Уровень $E_1=0.2084$ эВ, удовлетворяющий условию $E < U_1$, образуется в звене, состоящем из высокого и низкого барьеров. В этом случае между двумя соседними барьерами укладывается одна полуволна де Бройля. Если к этой структуре добавить третий высокий барьер (структура рис. 1-2А), то вследствие взаимодействия звеньев между собой этот уровень расщепится на два уровня с энергиями 0.207 эВ и 0.209 эВ. Причем нижнему уровню соответствует четное состояние [3,4], а верхнему — нечетное. При этом нижнему состоянию соответствуют колебания в одной фазе (точек смены фазы колебаний в этом случае нет), а в верхнем — в противоположных фазах (имеется одна точка смены фазы) (рис.3). Если к имеющимся ячейкам добавлять новые, результат будет зависеть от вида барьера, стоящего в конце цепочки. При добавлении низкого (рис. 4,5) барьера взаимодействие между ячейками будет слабым и расщепление уровня 0.208 эВ не произойдет. Следующий высокий барьер существенным образом изменяет энергетический спектр структуры и приводит к возникновению новых уровней. При этом уменьшение энергии первого подуровня компенсируется увеличением энергии второго, что обеспечивает выполнение закона сохранения энергии. Следует отметить, что аналогичным образом изменяется частота колебаний и в связанных электрических контурах [10,11].

Рассмотрим, например, систему, состоящую из четырех элементарных звеньев. В каждом из них между барьерами размещается одна полуволна. Соединяться между собой они могут различными способами, образуя комбинации с разным числом точек смены фаз (рис. 6). Это может быть четная (невозбужденная) конфигурация, когда $\Psi^2 > 0$, для всех X (рис. 6А) или возбужденная, когда в отдельных точках $\Psi^2 = 0$. Первому возбужденному состоянию соответствует одна точка смены фаз, второму — две и т.д. Возбужденные состояния в цепочке из четырех звеньев показаны на рис. 6 Б-Г. Здесь наблюдается аналогия с волновыми функциями в потенциальной яме.

В общем случае число точек смены фаз колебаний может изменяться от 0 до максимального значения $N-1$, где N -число звеньев в цепи. Число подуровней при этом будет равно числу элементарных звеньев в цепочке. Подуровень, который соответствует колебаниям, происходящим синфазно, об-

ладает наименьшей энергией. С ростом числа точек смены фаз колебаний энергия подуровней возрастает.

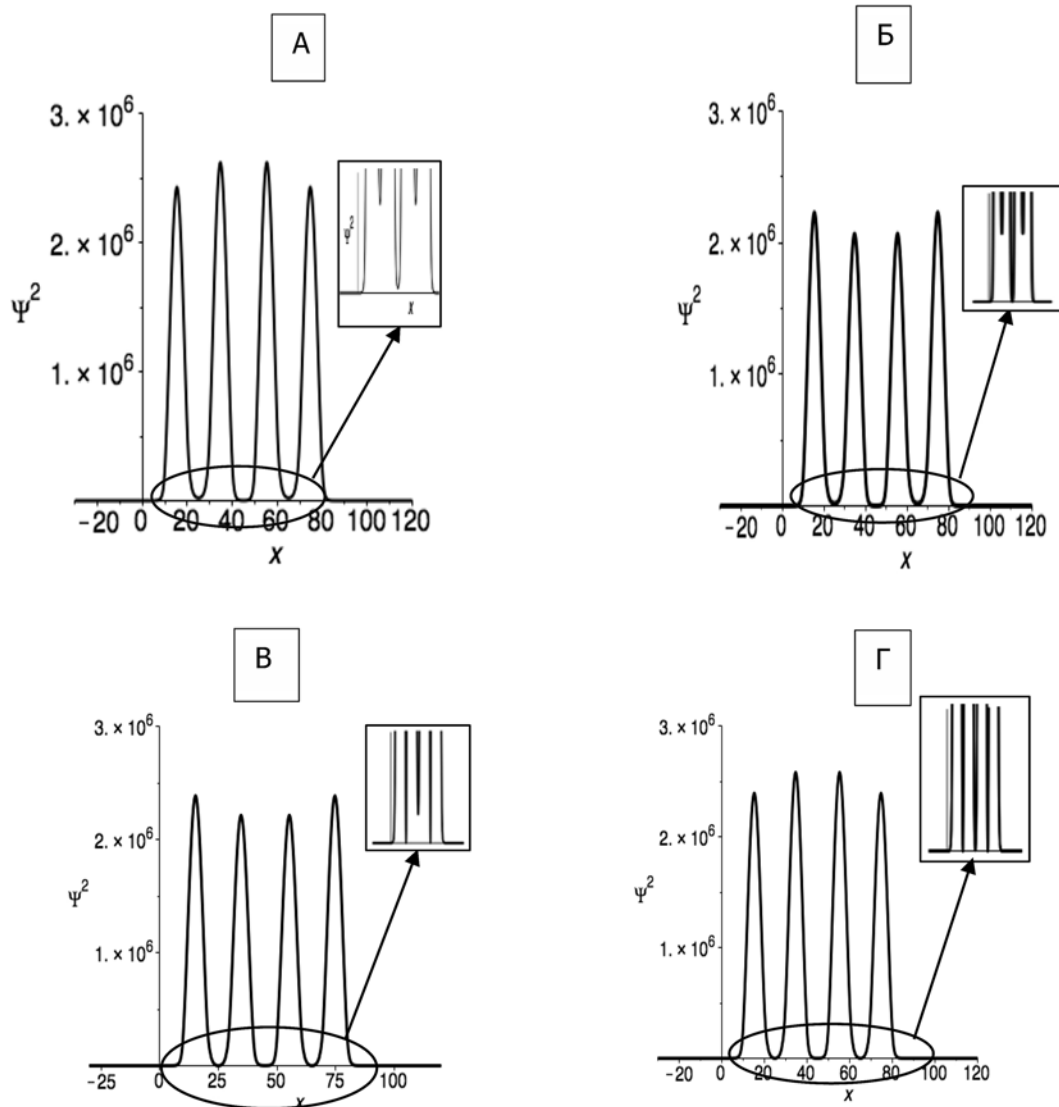


Рис.6. Волновые функции основного (А) и возбужденных (Б-Г) состояний уровня $E=0.208$ эВ в цепочке из четырех элементарных звеньев.

А-четное (основное) состояние, $E=0.207265$ эВ.

Точек смены фаз колебаний нет;

Б-1-ое возбужденное состояние, $E=0.207348$ эВ.

Одна точка смены фаз колебаний;

В- 2-ое возбужденное состояние, $E=0.209489$ эВ.

Две точки смены фаз колебаний;

Г-3-е возбужденное состояние, $E=0.209574$ эВ.

Три точки смены фаз колебаний.

Точками смены фаз колебаний являются точки, в которых волновая функция обращается в ноль.

4. В случае, когда $U_1 < E < U_2$, взаимодействием частицы с низкими барьерами можно пренебречь. Число резонансных ячеек в этом случае оказывается в два раза меньшим, хотя механизм расщепления уровней остается прежним. В силу этого уравнения, описывающие взаимодействие электронов с барьерами остаются неизменными. Схема расщепления уровней в этом случае показана на рис. 7,8.

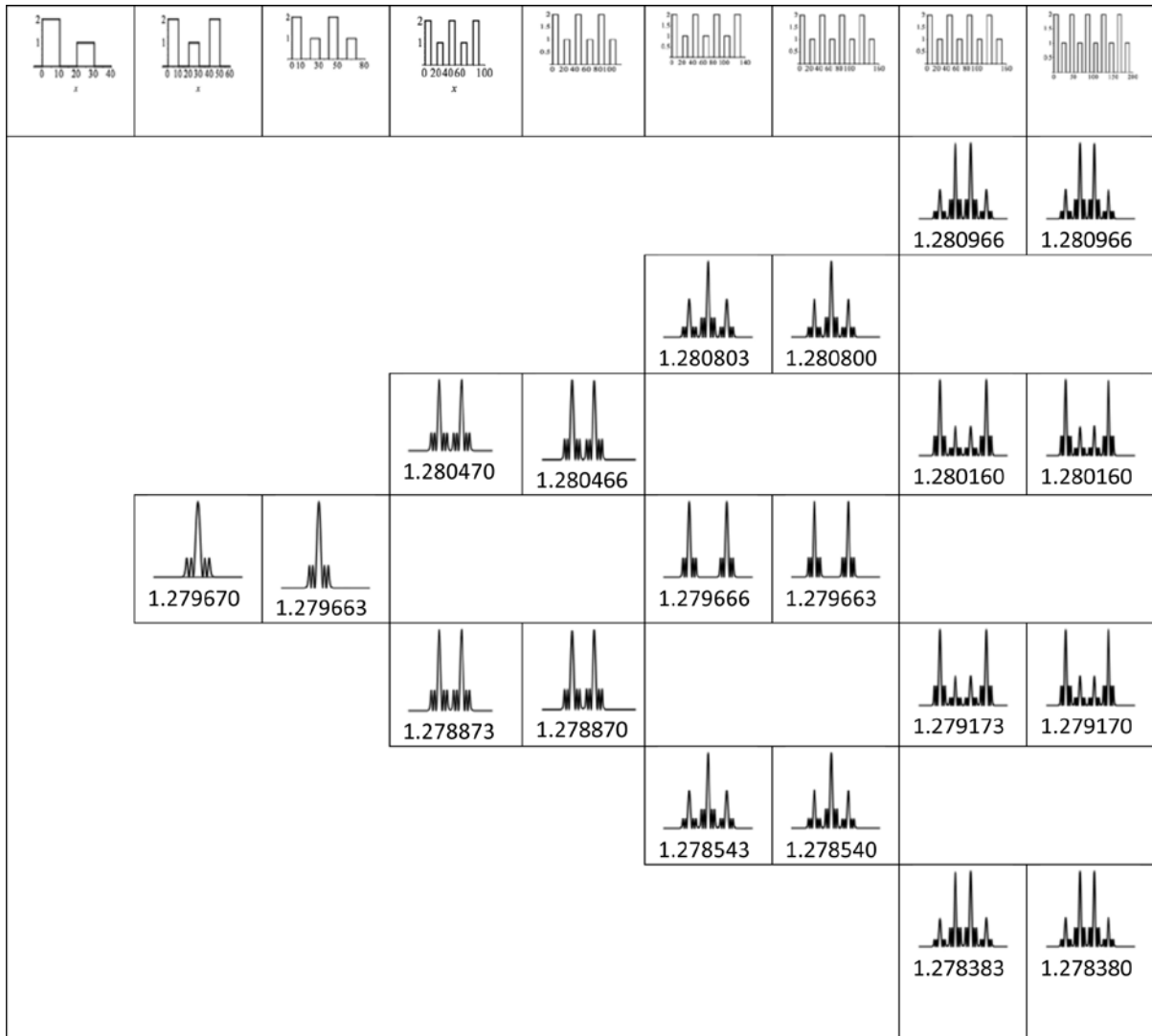


Рис.7. Схема перестройки уровня $E=1.28$ эВ в цепочке в базисом (тип А)

Для описания процесса расщепления уровней необходимо рассмотреть уравнение Шредингера

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dt} = \hat{H}\Psi, \text{ где } \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U \quad (1)$$

Здесь U — потенциальная энергия взаимодействия электрона с барьером. Так как цепочка состоит из N одинаковых звеньев, то потенциальная

энергия и волновая функция — периодические функции. В соответствии с принципом суперпозиции [12,13] $\Psi = \sum_n C_n \Psi_n$. Здесь C_n — амплитуда вероятности нахождения электрона у n-го атома. Коэффициенты C_n могут быть найдены из соотношения

$$C_n = \int \psi \psi_n^* dx .$$

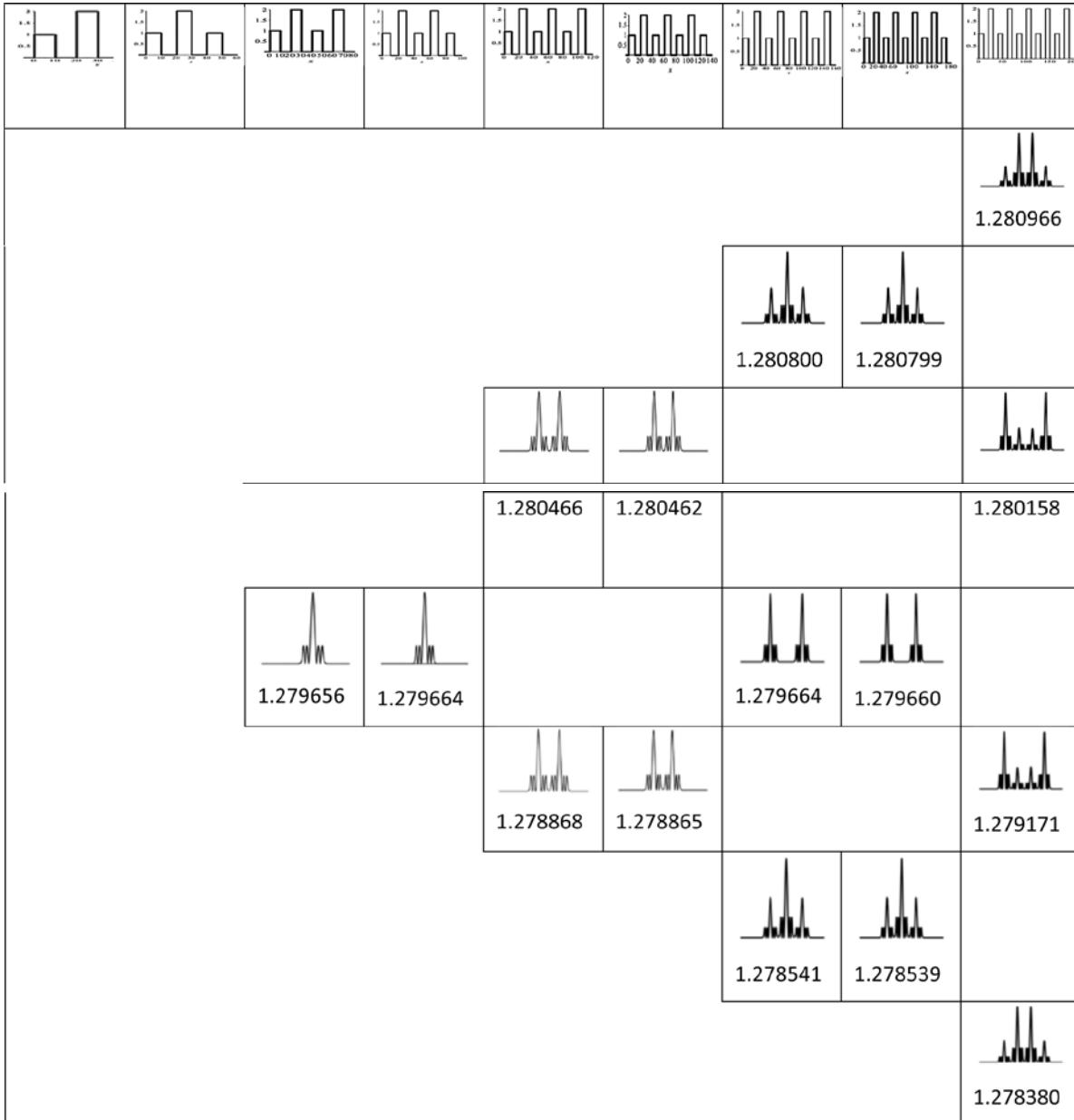


Рис. 8. Схема перестройки уровня $E=1.28$ эВ в цепочке в базисом (тип Б)

С учетом взаимной ортогональности волновых функций и условий нормировки приходим к уравнению

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = \sum_m H_{mn} C_m, \quad \text{где } H_{mn} = \int \psi_m \hat{H} \psi_n dx, \quad (2)$$

Здесь H_{mm} — энергия системы в состоянии ψ_m , а H_{mn} — матричный элемент, характеризующий вероятность перехода из состояния ψ_m в состояние ψ_n .

Учитывая взаимодействие электрона с ближайшими соседями, получим уравнение

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = H_{n,n-1} C_{n-1} + H_{nn} C_{n-1} + H_{n,n+1} C_{n+1} \quad (3)$$

Коэффициенты $H_{n,n-1}$ и $H_{n,n+1}$, характеризующие вероятность просачивания электрона сквозь барьер будем считать равными друг другу

$$H_{n,n-1} = H_{n,n+1} = -A \quad (4)$$

Допустим, цепочка начинается с высокого барьера (рис. 1-А). В этом случае уравнения Шредингера для низкого и высокого барьеров можно записать следующим образом [12]

$$\begin{cases} i\hbar \frac{dC_{2n}}{dt} = E_0 C_{2n} - A C_{2n+1} - A C_{2n-1} \\ i\hbar \frac{dC_{2n-1}}{dt} = E_0 C_{2n-1} - A C_{2n-2} - A C_{2n} \end{cases} \quad (5)$$

Учитывая подобие уравнений и сходство механизмов расщепления уровней, рассмотрим только одно уравнение. Поскольку размеры цепочки ограничены, то происходит отражение волн от передней и задней границы и образуется стоячая волна. Поэтому искать решение уравнения (5) следует в виде

$$C_n = \varphi_n \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) = u_n (a_n \exp(ikx_n) + b_n \exp(-ikx_n)) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right), \quad (6)$$

где a_n и b_n — амплитуды прямой и обратной волн. Комплексное число φ_n с дает не зависящую от времени часть амплитуды того, что электрон может быть обнаружен возле n -го барьера.

Если считать, что n -й барьер находится в точке с координатой x_n , а $(n+1)$ -й — в точке с координатой $x_{n+1} = x_n + d$, получим

$$(E - E_0)\varphi(x_n) = -A[\varphi(x_n + d) + \varphi(x_n - d)]. \quad (7)$$

Поскольку размеры цепочки ограничены, то необходимо учесть граничные условия, которые можно записать в виде

$$\Psi(0) = 0 \quad \text{и} \quad \Psi(x_{N+1}) = 0. \quad (8)$$

Учитывая первое граничное условие, после преобразований получим

$$\sin(x_n) \cdot [(E - E_0) + 2A \cdot \cos(kd)] = 0 \quad (9)$$

Уравнение (9) имеет нетривиальное решение, если $E = E_0 - 2A \cos(kd)$. Из второго граничного условия получим $\sin(k(N+1)d) = 0$. Отсюда

$$k(N + 1)d = \pi m, \quad \text{где } m = 1, 2, \dots, N. \quad (10)$$

$$\text{и } E = E_0 - 2A \cos\left(\frac{\pi m}{N+1}\right) \quad (11)$$

Здесь N - число резонансных ячеек в цепочке которое определяется строением цепочки и связано с энергией электрона. Рассмотрим, например, расщепление уровня $E = 0.2084$ эВ ($E < U_1$). В этом случае во взаимодействии участвуют и высокие и низкие барьеры, которые и необходимо учитывать. Если речь идет о расщеплении уровня $E = 1.28$ эВ, энергия которого превышает высоту низкого барьера, то в расчетах необходимо учитывать только число ячеек между высокими барьерами (их число в два раза меньше). Напомним еще раз, что низкие барьеры, стоящие в начале и в конце цепочки на расщепление уровней влияния не оказывают.

Заключение

В работе рассмотрен процесс перестройки резонансных уровней при образовании линейной цепочки, содержащий базис из барьеров различной высоты.

Показано, что при образовании квантово-размерной структуры элементарные ячейки, взаимодействуя между собой, образуют систему квантовых туннельных подуровней. В трехбарьерной структуре изучена роль коэффициента связи в образовании подуровней. Если связь между ячейками достаточно велика, происходит заметное расщепление уровней. При малой связи расщепление практически не наблюдается. Таким образом характер расщепления существенно зависит от структуры цепочки и энергии частиц. При этом основное влияние оказывают высокие барьеры. Низкие барьеры играют второстепенную роль. Находясь в начале или в конце цепочки они не приводят к образованию дополнительных подуровней.

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность проф. А.П. Жилинскому за постоянный интерес к работе и полезные замечания.

Литература:

1. Демиховский В. Я, Вугальтер Г. А. Физика квантовых низкоразмерных структур. //М.: , Логос, 2000, 248 с.
2. Херман М. Полупроводниковые сверхрешетки.// М., Мир, 1989. , 240 с.
3. Силин А.П. Полупроводниковые сверхрешетки.// УФН, 47, (3), с. 485-516.
4. Драгунов В. П., Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Основы нанoeлектроники. // Новосибирск: НГТУ, 2000. 331 с.
5. Аладышкин А. Ю. Туннельные явления в нанofизике. //Нижегород. гос. ун-т. Н. Новгород, 2011. 32 с.
6. Дегтярев В.Ф. Перестройка резонансных туннельных уровней при образовании квантово-размерной цепочки с базисом // Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2023, 23, (1), 5-18.
7. Дегтярев В.Ф., Жилинский А.П. Перестройка резонансных уровней прозрачности при образовании квантово-размерной цепочки //Наноструктуры. Математическая физика и моделирование, 2023, 22, (1), 5-17.
8. Антонец И. В., Щеглов В. И. Распространение волн через многослойные структуры, ч.1. Монография. //Изд. СыктГУ, Сыктывкар, 2011, 134 с.
9. Антонец И. В., Щеглов В. И. Распространение волн через многослойные структуры, ч.5. Монография.// Изд. СыктГУ, Сыктывкар, 2014, 120 с.
10. Демирчян К.С., Нейман Л.Р., Коровкин Н.В., Чечурин В.Л. Теоретические основы электротехники, т.1. //СПб.: Питер, 2003, 463 с.
11. Стрелков С.П. Введение в теорию колебаний.// СПб: Лань, 2005. 440 с.
12. Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике, т. 9, Квантовая механика (II) //М., «Мир», 1967, 259 с.
13. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А. Курс теоретической физики, т. 2. //М.:, Наука, 1971, 936 с.

ON THE RECONSTRUCTION OF RESONANT TUNNEL LEVELS IN THE PROCESS OF FORMATION OF A QUANTUM-SIZE CHAIN

V.F. Degtiarev

*Moscow Technical University of Communications and Informatics,
Moscow, Aviamotornaya st., 8a;
E-mail: vfsteel2008@gmail.com*

Received 07.10.2024

The mechanism of reconstruction of resonant tunnel levels in the process of formation of a layered quantum-size structure with a basis of two barriers of different heights is investigated. It is established that with an increase in the number of links, these levels are split into close sublevels and the wave function changes. The mechanism of reconstruction of levels in the chain is considered, based on the concepts of phase change of oscillators. The case when the particle energy exceeds the height of the small barrier is considered in detail.

Keywords: quantum mechanics, quantum barrier, wave function, transparency, nanoelectronics, resonant tunneling.

ОСНОВНЫЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОПЕРАЦИИ ИЗГОТОВЛЕНИЯ TSV

Фомичёв М.Ю.¹, Иванов П.С.^{1,2}, Беспалов В.А.¹,
Махиборода М.А.¹, Гусев Е.Э.^{1,2}, Дюжев Н.А.¹

¹*Национальный исследовательский университет
«Московский институт электронной техники»*

²*Воронежский государственный лесотехнический университет
имени Г. Ф. Морозова*

Поступила 05.11.2024

Среди всех известных методов микросборок трёхмерная микросборка с созданием сквозных канавок в кремнии является наиболее перспективной технологией, поскольку она позволяет создавать конструкции самых малых размеров, при этом обеспечивая наиболее высокую плотность межсоединений и лучшую производительность. Изготовление TSV — это ключевая технология, служащая для обеспечения связи между разными слоями 3D-интегрированной системы. Работа посвящена обзору основных технологических операций изготовления TSV: плазмохимическое травление; формирование изоляционного, барьерного и зародышевого слоёв; заполнение TSV металлом. Представлены требования, предъявляемые к технологическим процессам, основные характеристики функциональных слоёв, перечислены возможные дефекты структур. *Ключевые слова: диэлектрический слой, барьерный слой, зародышевый слой, электрохимическое осаждение, сквозные канавки в кремнии.*

DOI: 10/31145/2224-8412-2024-24-1-21-50

Введение

Схемы интеграции по технологии создания трёхмерных интегральных схем и с использованием кремниевого интерпозера являются наиболее востребованными методами по интеграции элементов благодаря таким достоинствам, как малое энергопотребление, компактность и большая функциональная плотность [1–4]. Для построения микросборок необходимы такие технологии, как создание TSV, утонение, бондинг и дебондинг. Также в этот

перечень входит технология временного бондинга, которая в настоящее время продолжает активно развиваться [5, 6]. Технологическую операцию создания TSV можно рассматривать как ключевую в технологии трёхмерной интеграции элементов.

Технологический процесс изготовления интегральных схем можно условно разбить на три основных этапа: 1) начальные операции обработки полупроводниковых пластин (формирование транзисторной структуры, FEOL); 2) средние (промежуточные) этапы обработки, такие как формирование TSV, утонение, временный бондинг (для технологии двухмерной мульти интеграции и трёхмерной интеграции, MEOL); 3) завершающие операции обработки полупроводниковых пластин, включающие металлизацию (BEOL).

В зависимости от маршрута микросборки можно выделить три схемы интеграции по технологии TSV. В случае, когда TSV формируют перед процессами КМОП, такой подход называется *Via First*. В случае подхода *Via Middle* после формирования TSV-структур выполняются только процессы BEOL. Третья схема, в которой создание TSV происходит по завершении всех процессов КМОП, называется *Via Last*. К схеме *Via Last* также можно отнести сценарий под названием *via after bonding*, когда TSV формируются на последнем этапе, после бондинга двух пластин или кристаллов друг с другом сторонами с полностью сформированной электроникой.

Выбор схемы интеграции зависит от применения конечного изготавливаемого устройства. В настоящее время технология TSV уже была разработана и адаптирована для множества применений, таких как МЭМС, мобильные телефоны, КМОП-датчики изображений, биомедицинские системы и устройства памяти. Соответственно, был проведен ряд исследований по изготовлению TSV. Однако в настоящее время технология TSV в 3D-ИС и некоторых наиболее продвинутых схемах сборки ещё не окончательно реализована из-за сохранения относительно высокой стоимости изготовления [7, 8]. В обзоре рассматриваются наиболее важные аспекты изготовления TSV и связанные с ними возможные дефекты. К процессам изготовления TSV относится образование отверстий методом глубокого реактивно-ионного травления, нанесение диэлектрического, барьерного и зародышевого (затравочного) слоёв, заполнение отверстий, химико-механическая полировка и отжиг меди. Детальное описание каждого процесса будет представлено далее.

3.1. Формирование TSV

Широко используемое в микроэлектронике глубокое плазмохимическое травление кремния, или Bosch процесс является наиболее предпочтительным для изготовления TSV-структур. Bosch процесс имеет высокую ско-

рость травления в 5–10 мкм/мин, селективность по фоторезисту от 50 до 100 и по оксидной маске от 50 до 200. Процесс состоит из следующих шагов:

- (1) травление кремния с использованием в качестве травителя газа SF₆;
- (2) создание пассивирующей пленки с помощью газа C₄F₈ для предотвращения бокового подтравки кремния во время выполнения следующего этапа;
- (3) травление пассивации и слоя кремния в плазме SF₆ с использованием направленной ионной бомбардировки для обеспечения большой глубины. Затем пассивирующий слой удаляется плазмой O₂ и Ar.

На рис. 3.1 показаны структуры TSV диаметром 10 мкм, полученные с помощью Bosch процесса. Однако процесс травления неизбежно создает шероховатость боковых стенок. С увеличением шероховатости снижается равномерность плёнки при последующем осаждении. Это приводит к проблеме утечки тока. Уменьшение степени шероховатости боковых стенок при травлении TSV достигается за счёт подбора длительности процессов травления и пассивации газами во время операции Bosch процесса [11]. Зазубрины на боковых стенках отверстий влияют на качество их покрытия диэлектрическим, барьерным и затравочным слоями, увеличивают количество и размер пустот в TSV. В связи с этим, для проведения качественного Bosch процесса важно обеспечить уменьшение шероховатости поверхностей так, чтобы ребристость боковых стенок была сведена к минимуму; это требование становится ещё более жестким по мере уменьшения размеров TSV [12-15].

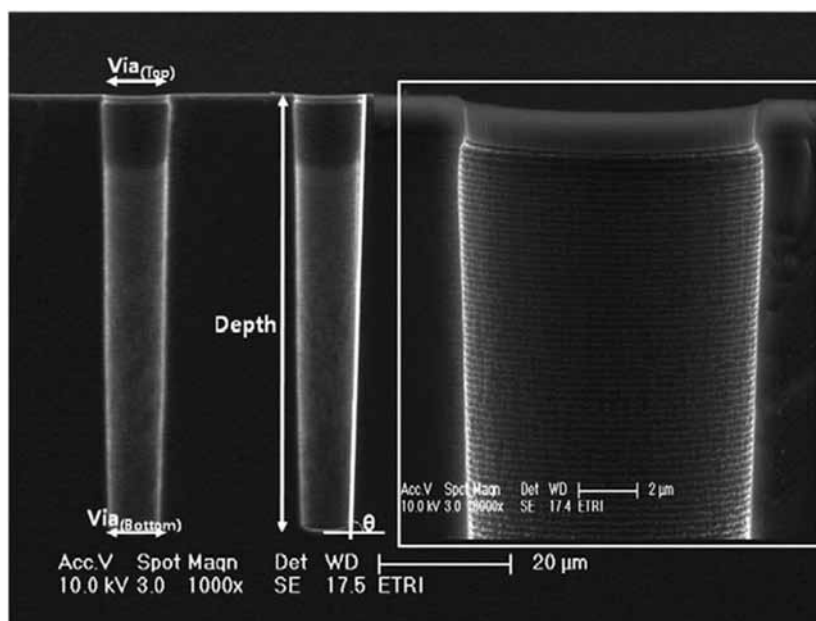


Рис. 3.1. Отверстия диаметром 10 мкм [9, 10].
полученные в результате проведения Bosch процесса в кремниевой пластине

Изготавливаемые TSV могут иметь различные размеры, обусловленные как функциональным назначением конечного устройства, так и предъявляемыми к нему техническими требованиями: мощность, температурный режим работы, массогабаритные показатели, плотность компоновки. На рис. 3.2 показаны результаты работ исследователей с различными параметрами глубины и диаметра TSV.

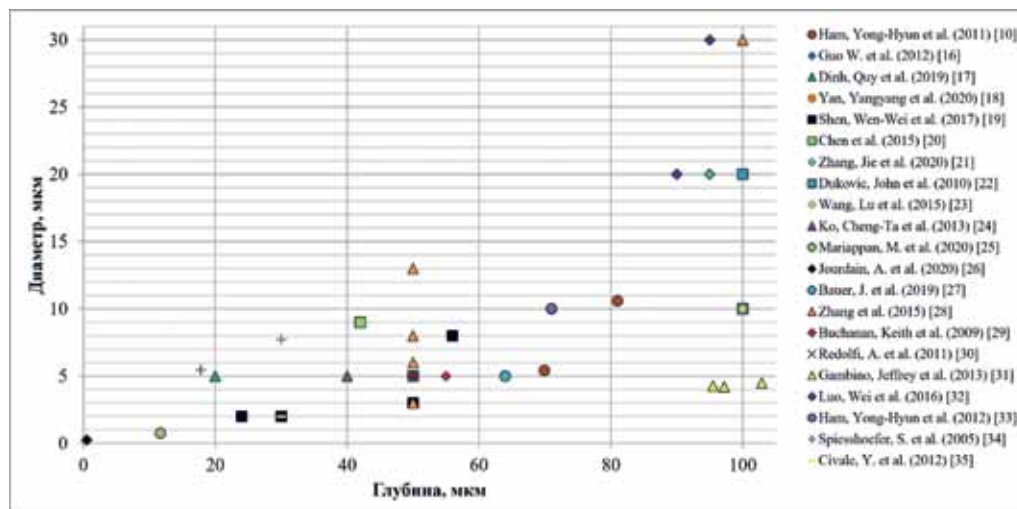


Рис. 3.2. Размеры TSV из различных работ.

3.2. Формирование диэлектрического слоя

Перед заполнением TSV металлом необходимо создать диэлектрический слой для достаточной электрической изоляции кремниевой пластины. К диэлектрическому слою предъявляются следующие технологические требования: хорошее качество покрытия и однородность, отсутствие токов утечки, низкие внутренние напряжения, высокое напряжение пробоя и ограничения максимальной температуры операции формирования диэлектрика для разных схем интеграции TSV [36]. В качестве диэлектрического слоя, как правило, используется SiO₂ или Si₃N₄ при химическом осаждении из паровой фазы с плазменным усилением (PECVD) или субатмосферном химическом осаждении из паровой фазы (SACVD) для TSV. Однако, когда диаметр TSV меньше 3 мкм, диэлектрический слой целесообразно наносить методом атомно-слоевого осаждения (ALD). По сравнению с другими существующими процессами осаждения технология ALD имеет ряд преимуществ: более низкая температура процесса, лучшая равномерность покрытия, хорошая масштабируемость, сокращение времени операции ХМП благодаря образованию более тонкого диэлектрического слоя, и при этом отсутствие требований к подготовке поверхности перед осаждением диэлектрика. На рис. 3.3 показано конформное покрытие диэлектрическим оксидным слоем TSV-отверстия с размерами 3 × 50 мкм методом ALD; толщина оксидного слоя

на боковой стенке и дне составляет приблизительно 95 нм [37]. Поскольку соотношение сторон, или Aspect Ratio (AR) равно 17, можно утверждать, что на данном рисунке продемонстрирован отличный результат осаждения диэлектрического слоя для применений TSV в микросистемной технике.

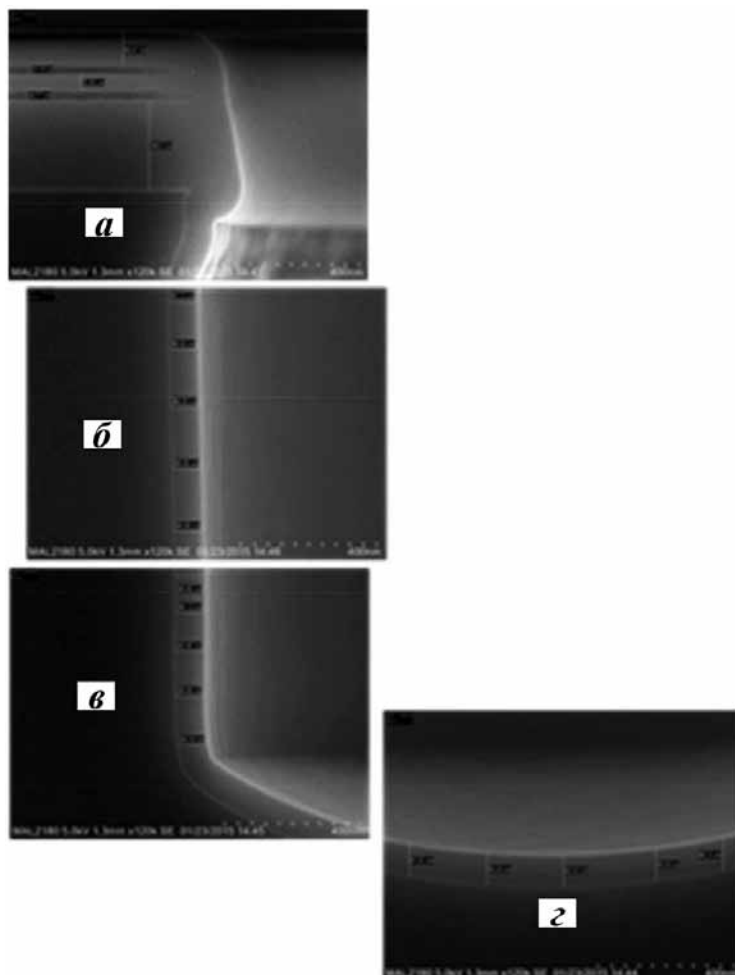


Рис. 3.3. РЭМ-изображения поперечного сечения TSV с размерами 3×50 мкм после осаждения диэлектрического оксидного слоя методом ALD: *а-г*: пленка толщиной 91-95 нм внутри TSV. [37]

В результате, критериями оценки [37] качества ближайшего к Si диэлектрического слоя являются конформность, однородность, отсутствие токов утечки, воспроизводимость процесса при низкой температуре осаждения [38–40].

3.3. Формирование барьерного и зародышевого слоёв

После осаждения диэлектрического слоя необходимо сформировать барьерный слой для предотвращения диффузии атомов Cu из заполненных медью TSV во время отжига, для которого требуется температура 400 °C.

Кроме того, барьерный слой действует как адгезив между слоем диэлектрика и слоем меди. Распространёнными барьерными материалами являются Ti, Ta, TiN и TaN. В качестве методов их нанесения применяется вакуумное напыление (PVD), химическое газофазное осаждение (CVD) или атомное слоевое осаждение (ALD) в зависимости от размеров изготавливаемых TSV. Металлические барьерные слои, такие как Ta и Ti, осаждаются методом PVD. Преимущество этого подхода заключается в низкой температуре, которая требуется для проведения процесса. Однако при высоких соотношениях сторон TSV ($>10:1$) можно получить плохое покрытие [41]. Поэтому, приходится осаждать более толстый металлический барьерный слой, что увеличивает стоимость производства. Барьерные слои из TiN или TaN могут быть нанесены методом CVD, который имеет преимущество в качестве однородности покрытия, но осуществляется, при помощи, как правило, высокотемпературных реакций.

В следующем процессе затравка из меди осаждается в TSV обычно с помощью метода PVD. В исследовании, проведённом центром IMEC [35], при использовании ALD TiN в качестве барьерного слоя была достигнута однородность металлизации TSV размерами 2×30 мкм приблизительно в 80 % (соотношение сторон равнялось 15). Затем было проведено осаждение непрерывного и высококонформного щелочного затравочного слоя на боковые стенки и дно TSV (рис. 3.4).

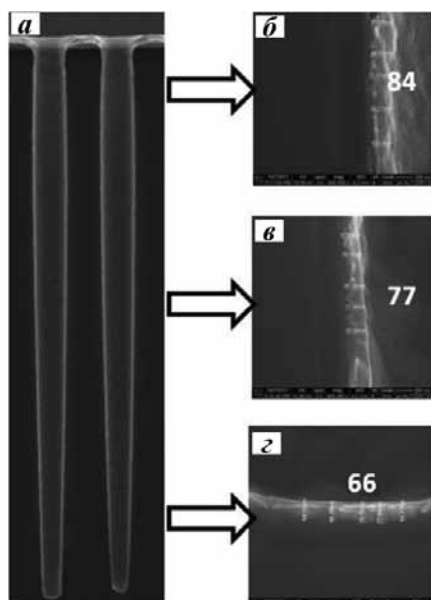


Рис. 3.4. РЭМ-снимки поперечного сечения TSV с размерами 2×30 мкм, сделанные после щелочного осаждения меди и перед электрохимическим осаждением (ЭХО или ECD):
a — общий вид, *б* — верх, *в* — середина, *г* — нижняя часть TSV [35].

В результате заполняют TSV медью без пустот по всей пластине. В этом маршруте щелочное нанесение зародышевого слоя меди может быть успешно заменено её осаждением методом PVD, выполняемым перед гальваническим заполнением TSV снизу вверх.

При формировании TSV после операций BEOL важно соблюдать ограничения максимальных температур, применяемых в соответствующих процессах. Поэтому для изготовления TSV с высокими аспектными соотношениями можно выполнять «полностью жидкостный» набор процессов низкотемпературного электрохимического осаждения как барьерного, так и медного зародышевого слоёв. Гальваническое осаждение Co-W-B и Cu в качестве барьерного/зародышевого слоёв достигается использованием наночастиц Au или Pd в качестве катализатора [42–44]. На рис. 3.5 показано изображение TSV после адсорбции наночастиц Pd при комнатной температуре в течение 3 ч. Наночастицы Pd равномерно осаждаются по всему TSV с размерами 2×24 мкм, и без образования их скоплений. Результаты процесса ЭХО Cu/Co-W-B (рис. 3.6) достигнуты за счёт применения наночастиц Pd в качестве катализатора по всему TSV.

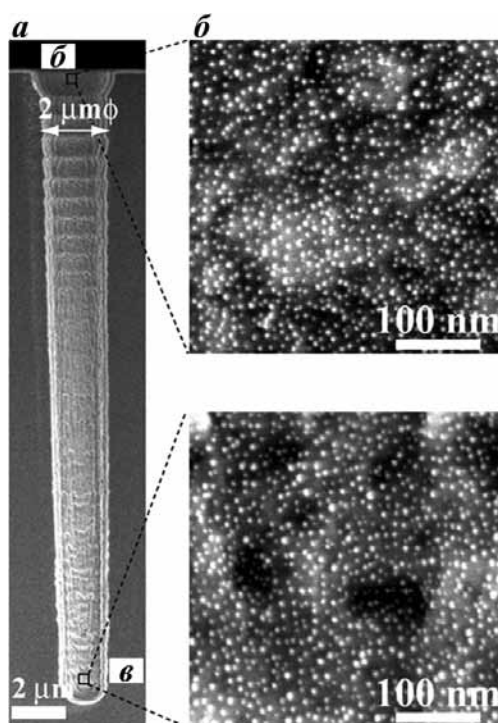


Рис. 3.5. РЭМ-снимки поперечного сечения TSV (2×24 мкм) после адсорбции наночастиц Pd на его стенках:
a — общий вид; *б* — верх; *в* — низ TSV [43].

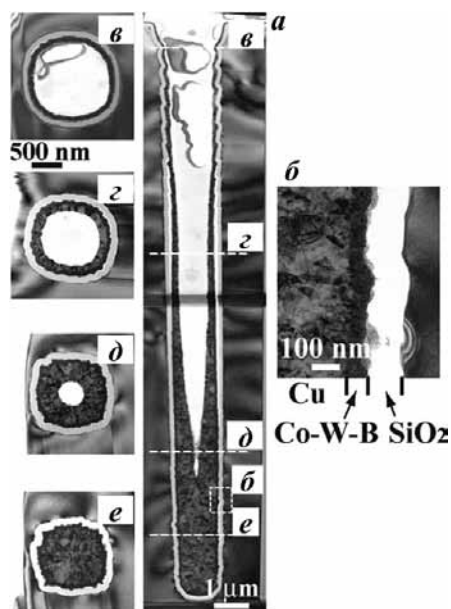


Рис. 3.6. РЭМ-снимки электрохимически осаждённого слоя Cu / Co-W-B: *а* — общий вид, *б* — вертикальное сечение боковой стенки *в-е*: горизонтальные сечения на различной глубине [43].

Даже несмотря на наличие зазубрин на стенках TSV, удалось успешно сформировать на них непрерывную и однородную пленку Co-W-B толщиной 60 нм при 60 °С. Затем при 70 °С гальваническая медь осаждается на слой Co-W-B. Диффузия ингибиторов в нижней части TSV меньше, чем в верхней; следовательно, затравочный слой меди, образующийся при электролитическом осаждении, толще в нижней части TSV, чем в верхней. Несмотря на то, что полностью жидкостные процессы нанесения барьерного и затравочного слоёв обеспечивают применение низких температур обработки, необходимы дополнительные эксперименты, чтобы доказать их надёжность.

Таким образом, критериями оценки качества барьерного и зародышевого слоёв являются конформность, однородность, а также воспроизводимость процесса при низкой температуре осаждения [29, 45–47].

3.4. Заполнение TSV

Существуют три метода заполнения TSV: конформное покрытие [48, 49], размещение шариков припоя (бампов) с заполнением снизу вверх [50, 51], и суперконформное покрытие [52–56]. Метод нанесения покрытия выбирается в зависимости от конкретного применения микросборки. Как правило, TSV имеют форму цилиндра с глубиной от 10 до 200 мкм. Глубина TSV зависит от толщины кристалла или пластины в сборке, аспектное отношение определяется в процессах изготовления диэлектрического/ба-

рьерного/зародышевого/заполняющего слоёв. Несмотря на то, что существует множество различных геометрий TSV для применения в 2,5D и 3D интеграции, их можно свести к трем общим типам (табл. 3.1) [57].

Таблица 3.1. Основные типы TSV

Применение	Заполнение	Глубина	Диаметр	Аспектное соотношение
Фотоматрицы	Конформное	50 — 100	30 — 50	1 — 3
Интерпозеры	Полное	50 — 150	20 — 30	4 — 8
Устройства	Полное	20 — 60	2 — 10	5 — 15

3.5. Конформное заполнение

Конформное покрытие медью аналогично нанесению рисунка медью для слоев RDL или разводки на уровне пластины с применением резистивных масок; такое нанесение меди частично подходит для TSV с низким аспектным соотношением. Если взять в качестве примера фотоматрицу, основные технологические этапы процесса изготовления TSV можно увидеть на рис. 3.7; к ним относится фотолитография (ФЛГ) для транслирования позиции металлизации с передней стороны на заднюю, глубокое реактивно-ионное травление кремния для достижения контакта с металлическим слоем КМОП, формирование оксида для изоляции, осаждение барьерного и затравочного слоев методом PVD, и, наконец, нанесение конформного медного покрытия для металлизации [58].

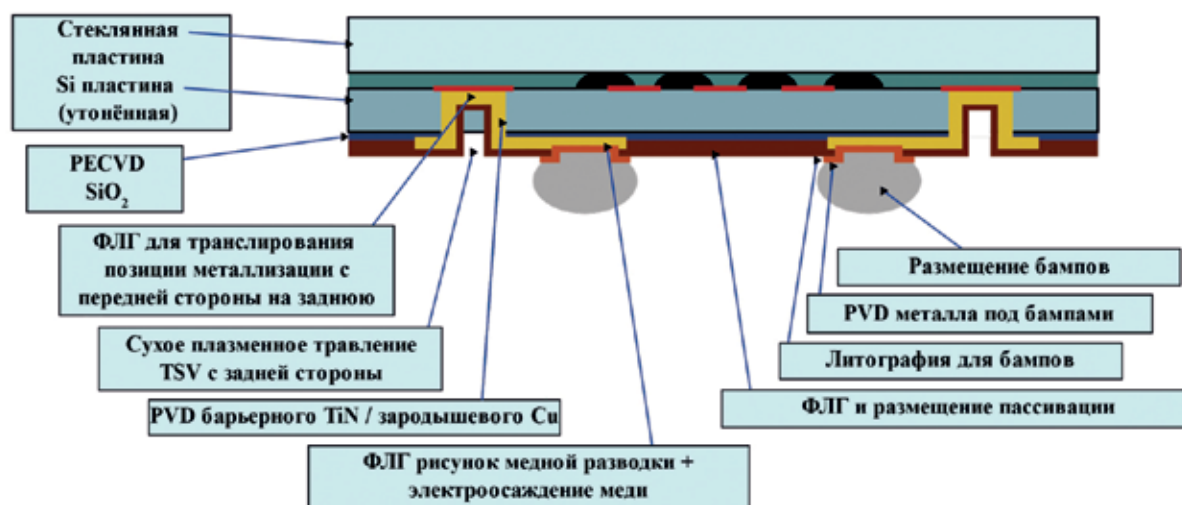


Рис.3.7. Поперечное сечение фотоматрицы с TSV [58].

Медь толщиной от 5 до 10 мкм выращивается в структуре резистивной маски, образуя топологию TSV и схемы разводки на поверхности кремния (рис. 3.8) [48].

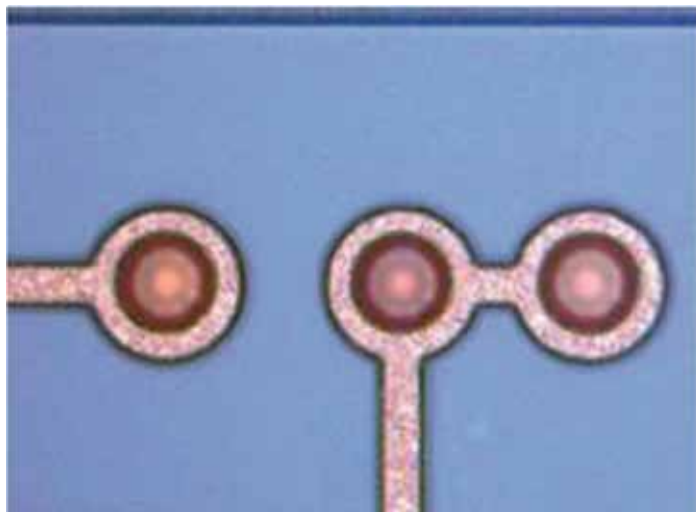


Рис.3.8. Оптическое изображение TSV после электрохимического осаждения Cu и травления зародышевого слоя [48].

На рис. 3.9 показаны снимки поперечных сечений отверстий с различными соотношениями сторон (AR от 1 до 5) после выполнения этапов формирования конформного медного покрытия. Однако, их применение ограничено AR, равным трём, из-за появляющегося прерывания затравочного слоя Cu [49].

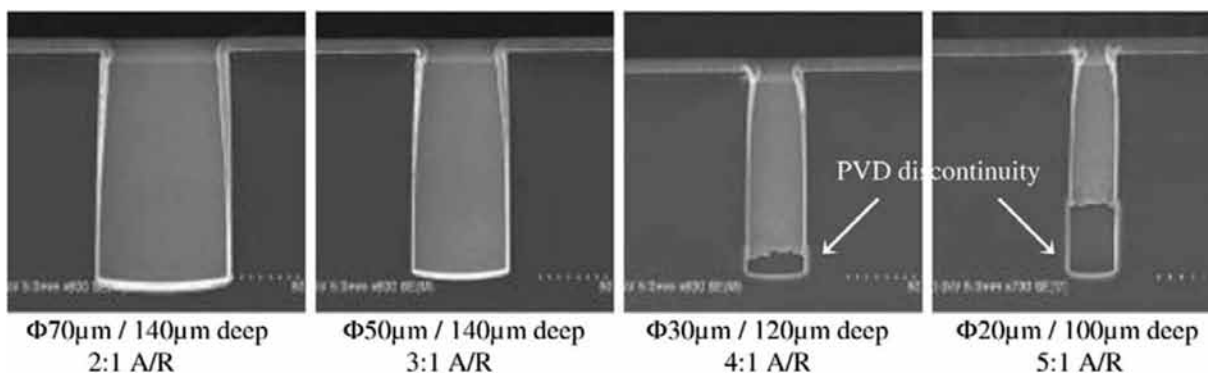


Рис. 3.9. Поперечные сечения TSV с различными соотношениями сторон после нанесения барьера/затравки и конформного покрытия Cu [49]

3.6. Герметизация микробампами и заполнение TSV снизу вверх

Одним из преимуществ подхода *via last* в виде формирования TSV после изготовления транзисторов и металлизации является возможность минимизировать пустоты или швы внутри TSV [59, 60]. Как правило, для выполнения такого процесса заполнения TSV с затравочным слоем меди требуется технология временного бондинга. Операция удаления пластины-носителя или прикреплённого металла может привести к дополнительным затратам и проблемам с надёжностью. Поэтому был предложен новый подход «снизу-вверх», заключающийся в предварительном размещении бампов перед электрохимическим процессом металлизации TSV, как показано на рис. 3.10 [51]. Контроль на оптическом микроскопе, РЭМ, а также рентгеновский анализ позволяет скорректировать параметры технологического процесса для минимизации дефектов после нанесения покрытия «снизу вверх» (рис. 3.11). При таком варианте изготовления TSV структур с микробампами заполнение отверстий металлом осуществляется всего за один этап, что упрощает производственный процесс и позволяет применять его для трехмерной интеграции по подходу *via last*.

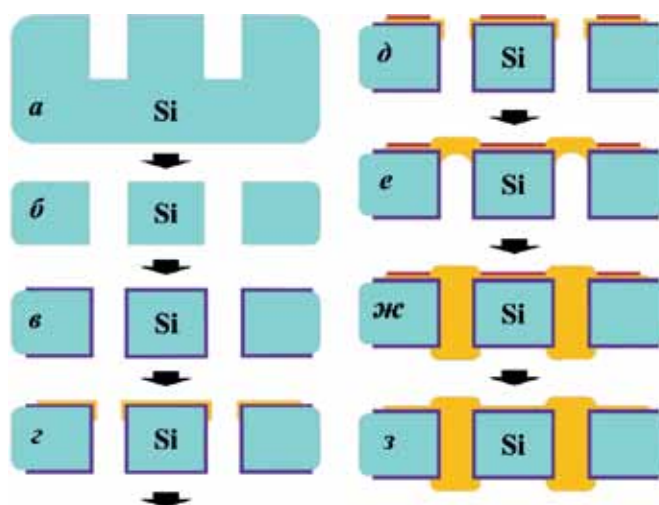


Рис.3.10. Технологический процесс заполнения отверстий медью снизу вверх с формированием бампов:
a — травление TSV; *б* — утонение;
в — формирование оксидной изоляции;
г — осаждение затравочного слоя; *д* — формирование фоторезистивной маски; *е* — закупоривание отверстий микробампами;
ж — заполнение TSV металлом, начиная с микробампов;
з — удаление фоторезиста

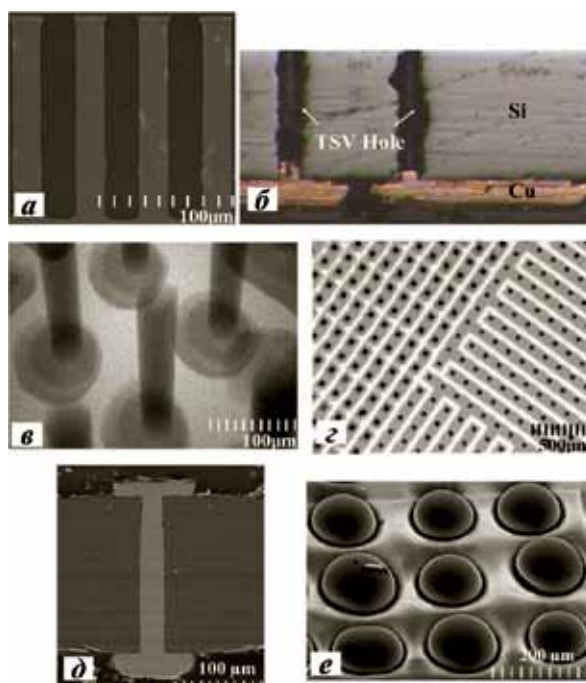


Рис.3.11. РЭМ-снимки TSV:

- a* — профиль сухого травления TSV глубиной 25 мкм;
- б* — герметизация TSV микробампами перед заполнением;
- в* — рентгенологический контроль TSV, заполненных без пустот;
- г* — область Cu в TSV в виде чёрных точек; белая область — оксид кремния; область серого цвета — металлические линии;
- д* — поперечное сечение TSV с медными выступами с обеих сторон;
- е* — готовые TSV с медными бампами [51]

3.7. Суперконформное заполнение

Суперконформное заполнение медью адаптировано для широкого круга применений — от некоторых технологий, близких к процессу damascene, до изготовления интерпозеров и целых устройств. Основным требованием, предъявляемым к такому заполнению, является отсутствие швов или пустот внутри TSV, обнаруживаемых с помощью рентгеновского анализа, который проводят после того, как медь с поверхности и барьерный слой будут удалены методом химико-механической полировки. На рис. 3.12 показан механизм заполнения TSV, включающий характеристики рецепта и свойства органических добавок [61]. При выполнении стандартного гальванического осаждения постоянным током часто возникает проблема, изображенная на рис. 3.12, *a*. В связи с этим, подбор параметров рецепта нанесения покрытия является важным фактором для обеспечения качественного заполнения TSV.

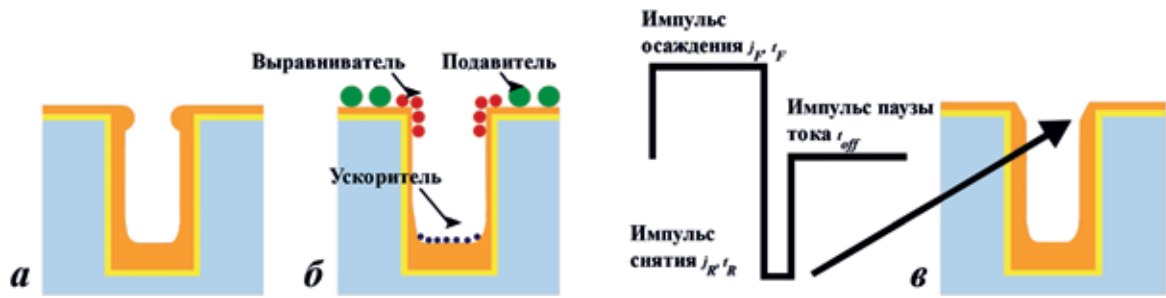


Рис.3.12. Принцип суперконформного покрытия TSV медью:
a — не оптимизированное покрытие постоянным током,
б — аддитивный подход,
в — форма волны импульсного реверсивного тока [61].

В химической ванне для заполнения TSV, как правило, используются три добавки, включающие подавитель (suppressor), ускоритель (accelerator) и выравниватель (leveler) [62–66]. Медленно диффундирующий и быстро адсорбирующийся подавитель, такой как полиэтиленгликоль (ПЭГ), адсорбируется преимущественно на плоской поверхности. Быстро распространяющийся ускоритель, такой как бис-(3-сульфопропил)-дисульфид (SPS), проникает в отверстия и увеличивает скорость осаждения. Медленно диффундирующий выравниватель, такой как Janus Green B (JGB), может деактивировать ускоритель и распределяться у краёв. Результаты осаждения с использованием различных добавок показаны на рис. 3.12, *б*. Для предотвращения преждевременного закрытия отверстий TSV при заполнении медью применяется импульсный реверсивный ток. Рецепт такого нанесения включает в себя четыре параметра: время обратного импульса (t_R), время паузы (t_{off}), время прямого импульса (t_F), и соответствующие плотности тока (j_F, j_R), как показано на рис. 3.12, *в* [67, 68].

Кроме того, была предложена трёхступенчатая форма волны тока для сокращения времени заполнения и уменьшения количества дефектов в заполненном TSV [69]. Результат процесса заполнения медью изображен на рис.3.13, где показаны массивы TSV размером 8×56 мкм после 5, 10, 15 и 20 минут заполнения Cu в полиэфирной супрессорной системе. Безпустотное заполнение наблюдается через 20 минут [70]. Однако заполнение TSV с высоким аспектным отношением (диаметра к ширине стенок) занимает довольно много времени из-за применения импульсного обратного тока, который оставляет ионы меди на боковых стенках отверстий. Таким образом, необходимо сокращать время заполнения TSV для трёхмерной интеграции. Известны четыре разновидности подходов оптимизации и повышения эффективности заполнения, которые включают в себя оптимизацию положения анода, заполнение TSV в несколько этапов, изменение концентрации до-

бавок и оптимизацию плотности тока осаждения [71]. На следующем шаге используется ХМП для удаления внешнего слоя меди, а также барьерного слоя с поверхности пластины. Как правило, эта технология требует выполнения двух шагов. Сначала происходит удаление толстого слоя Cu с углублениями или выступами после заполнения TSV, и оно останавливается на барьерном слое. На втором шаге удаляют барьерный слой, останавливаясь на слое диэлектрика. Для обеспечения хорошей изоляции, минимизации рельефа и избегания появления возможных дефектов используются различные суспензии, обладающие селективностью [72].

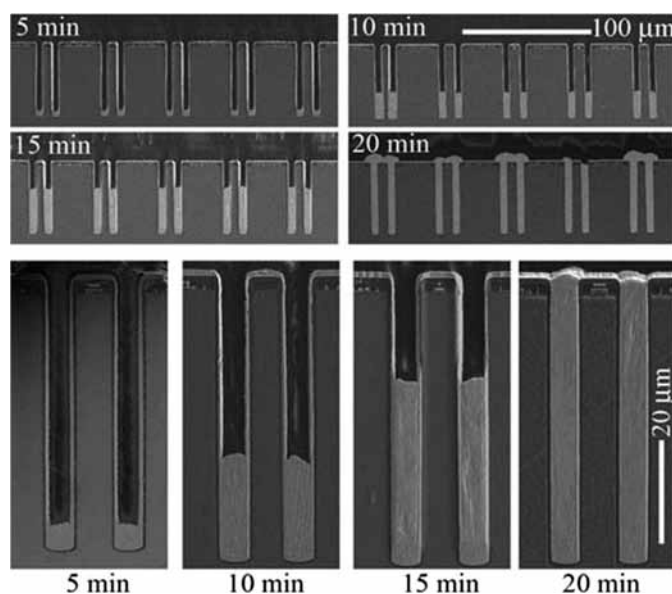


Рис.3.13. РЭМ-снимки поперечных сечений TSV в течение времени процесса [70].

Таким образом, для формирования качественной металлизации TSV необходимо обеспечить заполнение отверстий без пустот и прерываний [73–75].

3.8. Отжиг меди в TSV

Проблемы термомеханической надёжности являются очень важными, поскольку во время проведения последующих процессов формирования RDL, размещения бампов и многослойной сборки пластины подвержены повторяющимся термическим нагрузкам, которые могут стать причиной накопления термомеханических напряжений. Они, в свою очередь, могут стать результатом появления таких критических проблем, как расслоение и образование пустот, если напряжения не будут в достаточной степени уменьшены за счёт выполнения процесса отжига после заполнения TSV медью. Ещё одной проблемой является расширение металла в TSV из-за различий коэффициентов теплового расширения кремниевой пластины и материала

заполнения TSV, что может вызвать растрескивание диэлектрического слоя [76–79].

Таким образом, чтобы уменьшить количество внутренних напряжений в кремнии, после выполнения процесса гальванического осаждения необходимо проводить предварительный отжиг TSV. Коэффициент теплового расширения меди равен $17,6 \times 10^{-6} / ^\circ\text{C}$, что выше, чем у Si, КТР которого равен $2,6 \times 10^{-6} / ^\circ\text{C}$. Вследствие этого во время отжига может наблюдаться экструзия или выпячивание металла из TSV [80, 81].

На ряде образцов, подвергнутых процессам отжига при разных условиях, было исследовано влияние температуры отжига на конечный результат. На рис. 3.14 представлены РЭМ-снимки различных форм выступов из TSV размерами 5×50 мкм, обусловленных отжигом в течение 30 минут при разных температурах в диапазоне от 250 до 450 °С. При температуры отжига в 350 °С медь начинает выступать. При 450 °С медь вздувается. Этот процесс имеет два возможных механизма. Первый механизм — это пластическая деформация материала Си, который во время отжига расширяется в вертикальном направлении. Второй механизм связан с диффузионной ползучестью, когда распределение напряжений в TSV не является равномерным [82]. На степень выступания металла из TSV кроме температуры отжига также влияют выбор материалов и толщина слоёв барьера и изоляции.

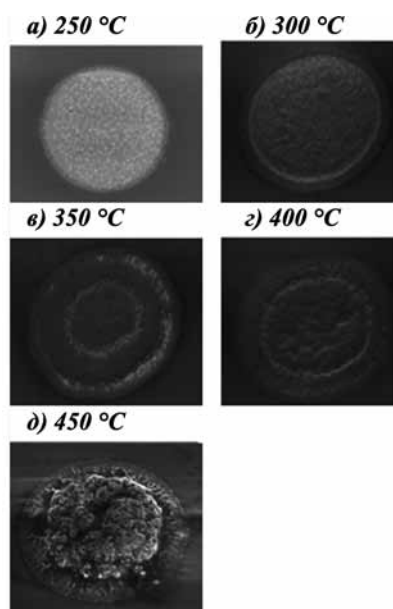


Рис.3.14. РЭМ-снимки TSV, показывающие степень выступания меди вследствие отжига при температурах от 250 до 450 °С (вид сверху) [82].

Температура отжига должна быть достаточной для устранения внутренних напряжений в TSV; в то же время подбор условий отжига ограничивается максимальными температурами, не влияющими губительно на сфор-

мированную электронику. В маршруте изготовления TSV, разработанном в центре IMEC, для отжига применяется температура в 420 °С в течение 20 мин [83].

После проведения процесса отжига применяется ХМП для удаления медных выступов и для открытия TSV с обратной стороны пластины.

3.9. Виды дефектов

Можно выделить три разновидности дефектов, появляющихся при изготовлении TSV: дефекты, связанные с травлением Si, дефекты, связанные с формированием затравочного слоя Cu, и, наконец, дефекты, связанные с гальваническим покрытием Cu [84].

Как уже упоминалось ранее, поскольку TSV формируют сухим способом травления с использованием Bosch процесса, существует несколько возможных дефектов, связанных с травлением Si; они могут приводить к таким видам недостатков затравочного слоя Cu, как локальное отсутствие покрытия, шероховатость поверхности или образование губчатых структур (рис. 3.15). Проблемы, возникающие при проведении операций изготовления TSV, проявляются в виде пустот после гальванического покрытия медью.

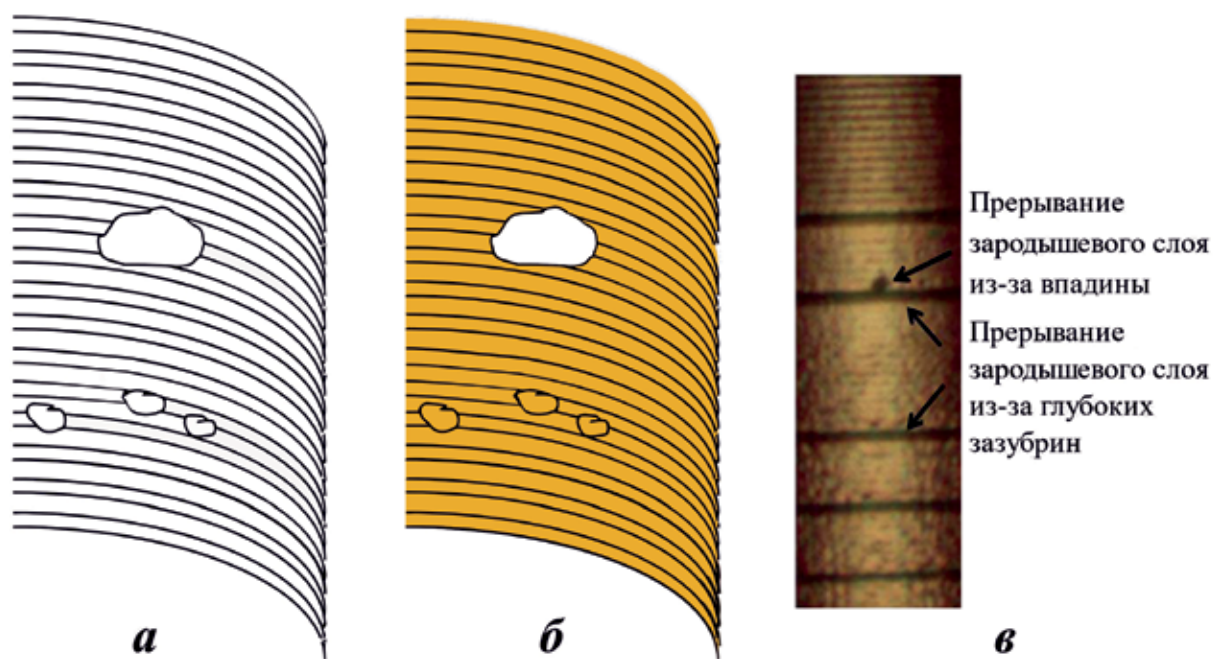


Рис.3.15. Механизм, вызывающий потерю затравочного слоя Cu из-за губчатых структур и глубоких шероховатостей:
а — после травления Si; *б* — после осаждения затравочного слоя Cu;
в — микроскопическое изображение затравочного слоя Cu, осаждённого на TSV, размером 60 × 250 мкм [45].

Нарушения заполнения отверстий медью, вызванные губкообразными дефектами, также могут привести к отсутствию электрического контакта (рис. 3.16). Ещё одной причиной возникновения дефектов может быть окисление или плохое нанесение затравочного слоя Cu.

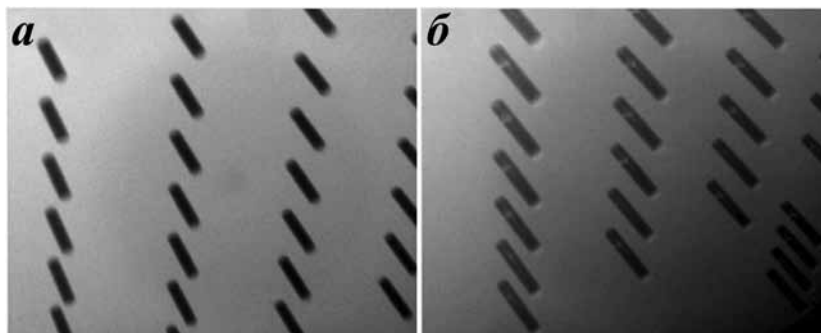


Рис.3.16. Рентгеновские снимки TSV после гальванического покрытия Cu: *a* — TSV без дефектов заполнения Cu; *б* –TSV с дефектами заполнения Cu, вызванными прерываниями затравочного слоя Cu из-за губкообразных дефектов в TSV размером 30×150 мкм [45].

Из-за окисления затравочного слоя меди через 10 дней после осаждения PVD-Cu может начаться образование пустот в верхней области TSV [45]. Этот эффект демонстрирует, что оксид меди уменьшает реальную площадь покрытия отверстий затравочным слоем Cu, что влияет на конечный результат (рис. 3.17).

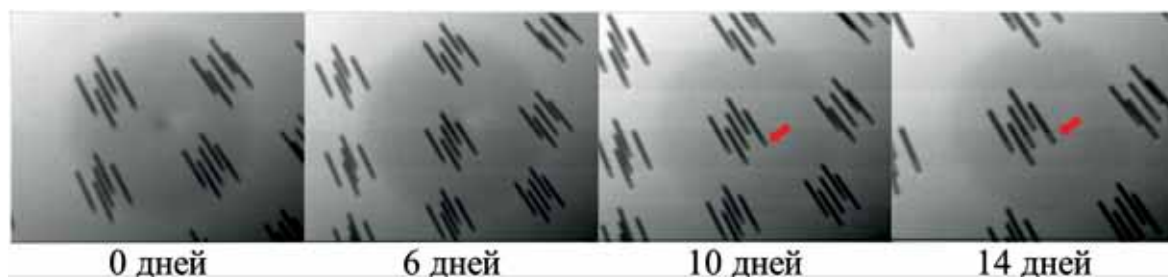


Рис.3.17. Рентгеновские снимки, показывающие состояние затравочного слоя меди в TSV размером 10×100 мкм, в течение 14 дней после осаждения [45]

Наконец, чтобы предотвратить дефекты гальванического заполнения Cu, важно оптимизировать как химическую концентрацию трёх добавок, так и плотность тока в процессе электрохимического осаждения. Таким образом, формирование TSV без пустот может быть достигнуто путем предотвращения образования известных видов дефектов на соответствующих этапах изготовления.

3.10. Различные методы дебондинга

Для формирования межсоединений ключевых элементов в интегральной схеме (в вертикальной плоскости) используют пластины-переходники-интерпозеры. Например, в СВЧ-технике интерпозер соединяет малошумящий усилитель и защитное устройство. Как правило, интерпозер представляет собой тонкую пластину толщиной около 100 мкм с массивом TSV. Для формирования интерпозера применяют технологию временного бондинга, чтобы временно повысить жёсткость тонкой пластины.

Технология временного бондинга позволяет производителям обрабатывать тонкие пластины так же, как если бы они были стандартными и полноразмерными. По завершении обработки пластина отделяется от носителя; далее ультратонкие чипы могут быть корпусированы.

К недостаткам технологии можно отнести прогиб и коробление ультратонких пластин из-за внутренних напряжений, возникающих в процессе временного бондинга. Склеивающие материалы должны выдерживать высокие температуры в процессах осаждения металлов, а также химические воздействия в операциях травления пластин. Но самая большая проблема состоит в разделении ультратонкой рабочей пластины и носителя по завершении операций обработки с сохранением механической целостности тонкой пластины. Эти проблемы решаются применением одного из подходов дебондинга. Во всех случаях рабочая пластина сначала прикрепляется к носителю, затем утоняется и обрабатывается. Основное различие между системами состоит в методе разделения пластин.

В подходе с химическим разделением используется перфорированный носитель, позволяющий специальной жидкости растворять связующий материал, высвобождая таким образом пластину (рис. 3.18) [85]. Стоимость жидкостного химического травителя достаточно низкая и позволяет малым компаниям использовать данный способ разделения пластин.

Известен способ временного бондинга с термическим разделением методом сдвига [86]. Пластина высвобождается от носителя благодаря изначальному нагреву пластин и затем сдвиганию пластин относительно друг друга (рис. 3.19). Применение этого процесса значительно увеличивает выход годных по сравнению с процессом химического разделения.

Существует способ временного бондинга в виде лазерного разделения [87]. В этом способе быстрое отделение пластины от носителя обеспечивается благодаря засветке специального разделительного слоя эксимерным лазером. Система лазерного разделения обеспечивает быстрое разделение пары пластин с малым количеством напряжений. Производственные мощности позволяют выпускать до 50 пластин в час.

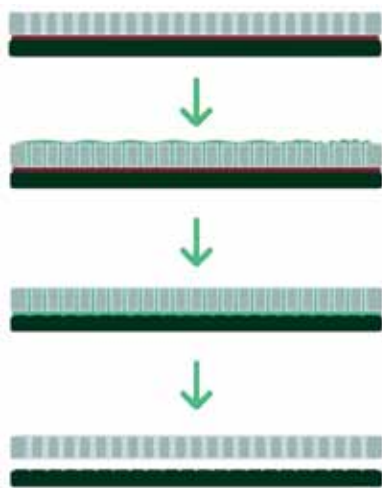


Рис.3.18. Метод химического дебондинга.

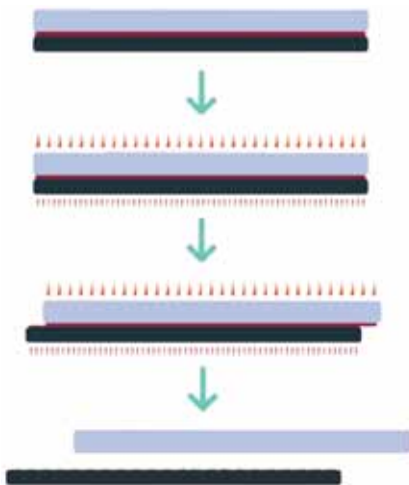


Рис. 3.19. Дебондинг по методу термосдвига.

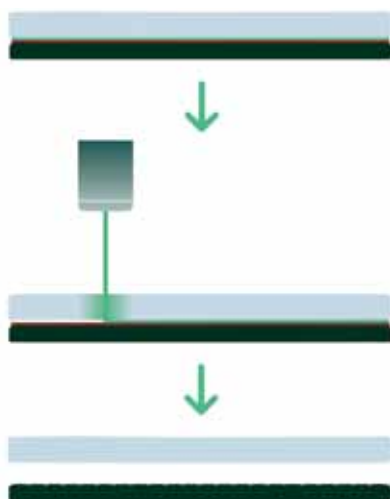


Рис. 3.20. Метод лазерного дебондинга.

Также известна система механического дебондинга для удовлетворения потребности в разделении пластин при комнатной температуре без использования лазеров и химических реактивов [88]. В этой системе используется подготовленный носитель, обеспечивающий необходимую адгезию для поддержки рабочей пластины, которая также может быть впоследствии механически легко отсоединена. Материалы для бондинга, используемые в этой системе, способны выдерживать высокие температуры, возникающие в процессах обработки пластин. К достоинствам метода механического дебондинга можно отнести следующие особенности: не требует применения химических реактивов или высоких температур для разделения, меньшая стоимость по сравнению с системой лазерного дебондинга, пластина-носитель может быть изготовлена из различных материалов. В настоящее время в Центре коллективного пользования «Микросистемная техника и электронная компонентная база» МИЭТ имеется полный технологический цикл временного бондинга с механическим разделением тонкой рабочей пластины и пластины-носителя.

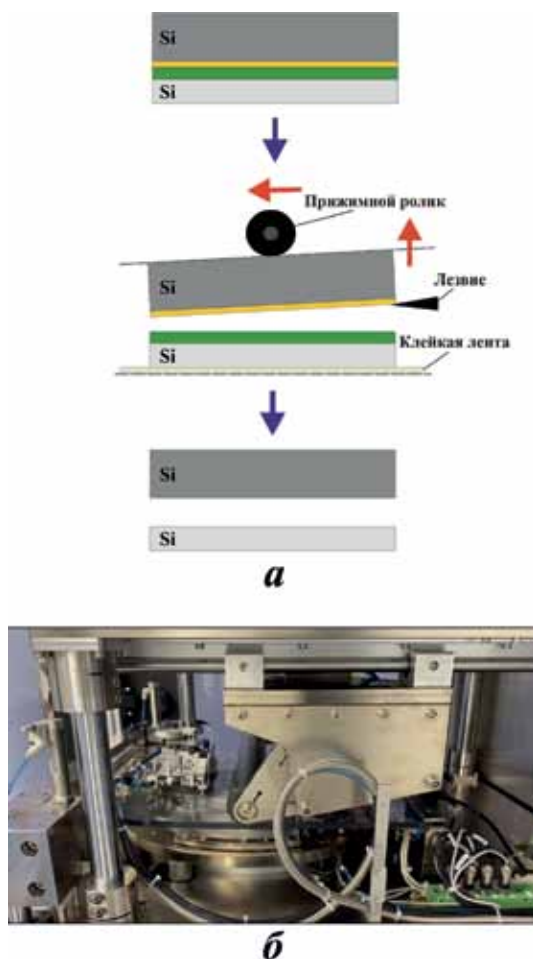


Рис.3.21. Метод механического дебондинга:
а — схема метода; б — установка дебондинга

В МИЭТ обрабатывают пластины диаметром 150 мм и толщиной не менее 50 мкм при сохранении механической целостности.

Выводы

В работе рассмотрены технологии, применяемые с целью изготовления TSV для задач трёхмерной микросборки. Описаны параметры основных процессов, особенности заполнения отверстий медью для различных применений и виды дефектов, которые могут при этом возникать. Разработаны методы формирования диэлектрического, барьерного и затравочного слоёв для уменьшения шероховатости боковых стенок отверстий и решения проблемы неравномерного нанесения затравочного слоя меди с целью обеспечения дальнейшего качественного электрохимического осаждения меди в TSV.

Сформированы требования, предъявляемые к ключевым технологическим операциям. Показана важность формирования отверстий с малой величиной шероховатости поверхности, возникающих в процессе плазмохимического травления кремния. Критериями оценки качества диэлектрического слоя, ближайшего к Si, является конформность и однородность, а также воспроизводимость процесса при низкой температуре осаждения. К барьерному, зародышевому и проводящему слоям предъявляются аналогичные требования. Таким образом, для изготовления текущего слоя с высокой равномерностью по толщине необходимо формировать поверхность предыдущего слоя с малой величиной шероховатости.

В настоящей главе описаны три разновидности процессов заполнения TSV медью: конформное нанесение, герметизация бампами для упрощения процесса металлизации и проведения беспустотного заполнения снизу вверх, и создание суперконформного покрытия, используемого для изготовления интерпозеров и устройств. Перечислены возможные причины возникновения пустот, которые могут привести к отсутствию электрических контактов и проблемам с надёжностью. Приведены технологические решения проблемы термического напряжения, вызванного разницей коэффициентов теплового линейного расширения материала металла и близлежащих слоёв.

Рассмотрены подходы к разделению пластин по технологии временного бондинга: жидкостный химический дебондинг, метод термосдвига, лазерный дебондинг и механический дебондинг. Наиболее перспективным методом является механический дебондинг, позволяющий проводить операции при комнатной температуре в отсутствие вредных химических реактивов и дорогостоящего лазерного оборудования и отсутствия жёстких требований к материалу пластины-носителя.

Поддержка. Данная работа выполнена при финансовой поддержке Российского Научного Фонда (грант № 24-22-00443).

Литература:

1. Koester S. J. et al. Wafer-level 3D integration technology //IBM Journal of Research and Development. — 2008. — Т. 52. — №. 6. — С. 583-597.
2. Chen K. N., Tan C. S. Integration schemes and enabling technologies for three-dimensional integrated circuits //IET Computers & Digital Techniques. — 2011. — Т. 5. — №. 3. — С. 160-168.
3. Lau J. H. Recent advances and new trends in nanotechnology and 3D integration for semiconductor industry //2011 IEEE International 3D Systems Integration Conference (3DIC), 2011 IEEE International. — IEEE, 2012. — С. 1-23.
4. Liu D., Park S. Three-dimensional and 2.5 dimensional interconnection technology: State of the art //Journal of Electronic Packaging. — 2014. — Т. 136. — №. 1. — С. 014001.
5. Fomichev M.Y., Makhaboroda M.A., Djuzhev N.A., Dedkova A.A., Gusev E.E., Development of adhesive wafer bonding technology //2021 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus). — IEEE, 2021. — С. 2558-2562.
6. Djuzhev N. A., Makhaboroda M. A., Gusev E. E., Fomichev M. U., Dedkova A. A., Ivanin P. S., Investigation of the influence of the parameters of the temporary bonding and thinning operations on the bending of silicon wafers //International Conference on Micro-and Nano-Electronics 2021. — SPIE, 2022. — Т. 12157. — С. 278-283.
7. Ranade A. P., Havens R., Srihari K. The application of through silicon vias (or TSVs) for high power and temperature devices //Fourteenth Intersociety Conference on Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic Systems (ITherm). — IEEE, 2014. — С. 1270-1278.
8. Stiebing M. et al. Challenges in the reliability of 3D integration using TSVs //2015 16th International Conference on Thermal, Mechanical and Multi-Physics Simulation and Experiments in Microelectronics and Microsystems. — IEEE, 2015. — С. 1-8.
9. Ayón A. A. et al. Characterization of a time multiplexed inductively coupled plasma etcher //Journal of the electrochemical Society. — 1999. — Т. 146. — №. 1. — С. 339.
10. Ham Y. H. et al. Dual etch processes of via and metal paste filling for through silicon via process //Thin Solid Films. — 2011. — Т. 519. — №. 20. — С. 6727-6731.
11. Blauw M. A. et al. Advanced time-multiplexed plasma etching of high aspect ratio silicon structures //Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. — 2002. — Т. 20. — №. 6. — С. 3106-3110.

12. Voss L. F. et al. Smooth Bosch etch for improved Si diodes //IEEE electron device letters. — 2013. — T. 34. — №. 10. — C. 1226-1228.

13. Craigie C. J. D. et al. Polymer thickness effects on Bosch etch profiles // Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena. — 2002. — T. 20. — №. 6. — C. 2229-2232.

14. Kenoyer L., Oxford R., Moll A. Optimization of Bosch etch process for through wafer interconnects //Proceedings of the 15th Biennial University/Government/Industry Microelectronics Symposium (Cat. No. 03CH37488). — IEEE, 2003. — C. 338-339.

15. Rudy A. S., Morozov O. V., Kurbatov S. V. A modernized Bosch etching process for the formation of tapered structures on a silicon surface //Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. — 2021. — T. 15. — №. 3. — C. 461-466.

16. Guo W. et al. Impact of through silicon via induced mechanical stress on fully depleted bulk FinFET technology //2012 International Electron Devices Meeting. — IEEE, 2012. — C. 18.4. 1-18.4. 4.

17. Dinh Q., Kondo K., Hirato T. Reduction of TSV Pumping //2019 International 3D Systems Integration Conference (3DIC). — IEEE, 2019. — C. 1-4.

18. Yan Y. et al. Multi-chip Stacking with Fine Pitch μ bumps and TSVs for Heterogeneous Integration //2020 21st International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT). — IEEE, 2020. — C. 1-4.

19. Shen, Wen-Wei & Chen, Kuan-Neng. (2017). Three-Dimensional Integrated Circuit (3D IC) Key Technology: Through-Silicon Via (TSV). Nanoscale Research Letters. 12. DOI: 10.1186/s11671-017-1831-4

20. Chen, Cool X.M. & Loh, Woon & Chui, K. & Mao, Ying & Wickramanayana, Sunil. (2015). CMP process optimization on temporary-bonded wafer for via-last through-silicon-via from backside. 1-4. DOI: 10.1109/EPTC.2015.7412401

21. Zhang, Jie & Ding, Ye & Wei, Wei & Li, Hangxu & Li, Zhenjie & Ji, Xiaolu & Jing, Xiaoping & He, Cong & Cao, LiQiang & Jiang, Xiaoshan & Zhu, Kejun & Liu, Peng & Chen, Yuanbo. (2020). The TSV process in the hybrid pixel detector for the High Energy Photon Source. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. 980. 164425. DOI: 10.1016/j.nima.2020.164425

22. Dukovic, John & Ramaswami, S. & Pamarthy, S. & Yalamanchili, R. & Rajagopalan, N. & Sapre, K. & Cao, Z. & Ritzdorf, Tom & Wang, Y. & Eaton, Brad & Ding, R. & Hernandez, M. & Naik, Mehul & Mao, D. & Tseng, J. & Cui, D. & Mori, Glen & Fulmer, P. & Sirajuddin, K. & Luo, L.. (2010). Through-silicon-via technology for 3D integration. 1-2. DOI: 10.1109/IMW.2010.5488399

23. Wang, Lu & Cai, Jian & Wang, Qian & Hu, Yang & Zhang, Wenqi. (2015). Electroplating Cu on ALD TiN for high aspect ratio TSV. 676-680. DOI: 10.1109/ICEPT.2015.7236676
24. Ko, Cheng-Ta & Chen, Kuan-Neng. (2013). Reliability of key technologies in 3D integration. *Microelectronics Reliability*. 53. 7-16. DOI: 10.1016/j.microrel.2012.08.011
25. Mariappan, Murugesan & Mori, K. & Kojima, T. & Hashimoto, H. & Bea, J.C. & Fukushima, Tak & Koyanagi, M.. (2020). Nano Ni/Cu-TSVs with an Improved Reliability for 3D-IC Integration Application. 1-5. DOI: 10.1109/ASMC49169.2020.9185397
26. Jourdain, A. & Schleicher, Filip & De Vos, Joeri & Stucchi, Michele & Chery, Emmanuel & Miller, Andy & Beyer, Gerald & Plas, Geert & Walsby, Edward & Roberts, Kerry & Ashraf, Huma & Thomas, Dave & Beyne, Eric. (2020). Extreme Wafer Thinning and nano-TSV processing for 3D Heterogeneous Integration. 42-48. DOI: 10.1109/ECTC32862.2020.00020
27. Bauer, J. & Fursenko, Oksana & Marschmeyer, S. & Heinrich, Friedhelm & Villasmunta, Francesco & Villringer, Claus & Zesch, Christoph & Schrader, Sigurd. (2019). Spectroscopic reflectometry for characterization of Through Silicon Via profile of Bosch etching process. *Journal of Vacuum Science & Technology B*. 37. 062205. DOI: 10.1116/1.5120617
28. Zhang, Junhong & Luo, Wei & Li, Yi & Gao, Liming & Li, Ming. (2015). Wetting process of copper filling in through silicon vias. *Applied Surface Science*. 359. DOI: 10.1016/j.apsusc.2015.10.214
29. Buchanan, Keith & Burgess, Stephen & Giles, Kathrine & Muggeridge, Matthew & Zhao, Hao. (2009). Etch, dielectrics and metal barrier-seed for low temperature through-silicon via processing. 1-4. DOI: 10.1109/3DIC.2009.5306552
30. Redolfi, A. & Velenis, Dimitrios & Thangaraju, Savithry & Nolmans, P. & Jaenen, P. & Kostermans, M. & Baier, U. & Van Besien, Els & Dekkers, Hendrik & Witters, T. & Jourdan, Nicolas & Ammel, A. & Vandersmissen, Kevin & Rodet, S. & Philipsen, Harold & Radisic, A. & Heylen, Nancy & Travaly, Y. & Swinnen, Bart & Beyne, Eric. (2011). Implementation of an Industry Compliant, $5 \times 50 \mu\text{m}$, Via-Middle TSV Technology on 300 mm Wafers. *Proceedings-Electronic Components and Technology Conference*. DOI: 10.1109/ECTC.2011.5898692
31. Gambino, Jeffrey & Doan, T. & Trapasso, J. & Musante, Charles & Dang, D. & Vanslette, D. & Grant, D. & Marx, D. & Dudley, R.. (2013). Through-silicon-via process control in manufacturing for SiGe power amplifiers. *Electronic Components and Technology Conference*. 221-226. DOI: 10.1109/ECTC.2013.6575575
32. Luo, Wei & Zhang, Junhong & Li, Yi & Gao, Liming & Li, Ming. (2016). Pretreatment to assure the copper filling in through-silicon vias. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 27. DOI: 10.1007/s10854-016-4723-y

33. Ham, Yong-Hyun & Kim, Dongpyo & Baek, Kyu-Ha & Park, Kunsik & Kim, Moonkeun & Kwon, Kwang-Ho & Lee, Kijun & Do, Lee-Mi. (2012). Metal/Dielectric Liner Formation by a Simple Solution Process for through Silicon via Interconnection. *Electrochemical and Solid-State Letters*. 15. H145. DOI: 10.1149/2.esl113678
34. Spiesshoefer, S. & Rahman, Ziaur & Vangara, G. & Polamreddy, S. & Burkett, Susan & Schaper, L.. (2005). Process integration for through-silicon vias. *Journal of Vacuum Science & Technology A — J VAC SCI TECHNOL A*. 23. 824-829. DOI: 10.1116/1.1864012
35. Civale, Y. & Armini, Silvia & Philipsen, Harold & Redolfi, Augusto & Velenis, Dimitrios & Croes, Kristof & Heylen, Nancy & El-Mekki, Zaid & Vandersmissen, Kevin & Beyer, Gerald. (2012). Enhanced Barrier Seed Metallization for Integration of High-Density High Aspect-Ratio Copper-Filled 3D Through-Silicon Via Interconnects. *Proceedings — Electronic Components and Technology Conference*. DOI: 10.1109/ECTC.2012.6248928
36. Garrou P, Bower C, Ramm P (2011) *Handbook of 3D integration: volume 1—technology and applications of 3D integrated circuits*, John Wiley & Sons
37. Zhang D, Smith D, Kumarapuram G, Giridharan R, Kakita S, Rabie MA, Feng P, Edmundson H, England L (2015) Process development and optimization for 3 μm high aspect ratio via-middle through-silicon vias at wafer level. *IEEE Trans Semicond Manuf* 28:454-460
38. Ranganathan, Nagarajan & Lee, Da & Youhe, Liu & Lo, Guo-Qiang & Prasad, Krishnamachar & Pey, Kin. (2011). Influence of Bosch Etch Process on Electrical Isolation of TSV Structures. *Components, Packaging and Manufacturing Technology*, IEEE Transactions on. 1. 10.1109/TCPMT.2011.2160395.
39. Okoro, C., & Obeng, Y. S. (2012). Effect of thermal cycling on the signal integrity and morphology of TSV isolation liner- SiO₂. 2012 IEEE International Interconnect Technology Conference. DOI: 10.1109/iitc.2012.6251582
40. Civale Y. et al. Spin-on dielectric liner TSV for 3D wafer level packaging applications //2010 IEEE International Interconnect Technology Conference. — IEEE, 2010. — C. 1-3.
41. Civale Y. et al. Highly-conformal plasma-enhanced atomic-layer deposition silicon dioxide liner for high aspect-ratio through-silicon via 3D interconnections //2012 4th Electronic System-Integration Technology Conference. — IEEE, 2012. — C. 1-4.
42. Inoue F. et al. Formation of electroless barrier and seed layers in a high aspect ratio through-Si vias using Au nanoparticle catalyst for all-wet Cu filling technology //Electrochimica Acta. — 2011. — T. 56. — №. 17. — C. 6245-6250.
43. Inoue F. et al. Highly adhesive electroless barrier/Cu-seed formation for high aspect ratio through-Si vias //Microelectronic engineering. — 2013. — T. 106. — C. 164-167.

44. Chen J. et al. Physicochemical effects of seed structure and composition on optimized TSV fill performance //2015 IEEE 65th Electronic Components and Technology Conference (ECTC). — IEEE, 2015. — С. 566-572.

45. Hara, Yukihiro & Webb, Eric & Sukamto, John & Mariappan, Murugesan & Fukushima, Tak & Kodera, Masako. (2019). Impact of Seed Layers on TSV Filling by Electrochemical Deposition. 10.7567/SSDM.2019.J-2-02.

46. Civale, Y. & Armini, Silvia & Philipsen, Harold & Redolfi, Augusto & Velenis, Dimitrios & Croes, Kristof & Heylen, Nancy & El-Mekki, Zaid & Vandersmissen, Kevin & Beyer, Gerald. (2012). Enhanced Barrier Seed Metallization for Integration of High-Density High Aspect-Ratio Copper-Filled 3D Through-Silicon Via Interconnects. Proceedings — Electronic Components and Technology Conference. 10.1109/ECTC.2012.6248928.

47. Wong, S. & Ryu, Changsup & Lee, Haebum & Loke, Alvin & Kwon, Kee-Won & Bhattacharya, Som & Eaton, Rory & Faust, Rick & Mikkola, Bob & Mucha, Jay & Orm, John. (1999). Barrier/Seed Layer Requirements for Copper Interconnects. Proceedings of the IEEE 1998 International Interconnect Technology Conference. 10.1109/IITC.1998.704764.

48. Henry D, Jacquet F, Neyret M, Baillin X, Enot T, Lapras V, Brunet-Manquat C, Charbonnier J, Aventurier B, Sillon N (2008) Through silicon vias technology for CMOS image sensors packaging. Electronic Components and Technology Conference (ECTC): 556-562

49. Gagnard X, Mourier T (2010) Through silicon via: from the CMOS imager sensor wafer level package to the 3D integration. Microelectron Eng 87:470-476

50. Saadaoui M, Wien W, Zeijl HV, Schellevis H, Laros M and Sarro PM (2007) Local sealing of high aspect ratio vias for single step bottom-up copper electroplating of through wafer interconnects. IEEE Sensors conference: 974-977

51. Chiang CH, Kuo LM, Hu YC, Huang WC, Ko CT, Chen KN (2013) Sealing bump with bottom-up Cu TSV plating fabrication in 3-D integration scheme. IEEE Electron Device Lett 34:671-673

52. Kobayashi K, Sano A, Akahoshi H, Itabashi T, Haba T, Fukada S, Miyazaki H (2000) Trench and via filling profile simulations for copper electroplating process. IEEE International Interconnect Technology Conference: 34-36

53. Chiu YD, Dow WP, Huang SM, Yau SL, Lee YL (2011) Sensitivity enhancement for quantitative electrochemical determination of a trace amount of accelerator in copper plating solutions. J Electrochem Soc 158:D290-D297

54. Huynh TMT, Hai NTM, Broekmann P (2013) Quasireversible interaction of MPS and chloride on Cu(1 0 0) studied by in situ STM. J Electrochem Soc 160:D3063-D3069

55. Zheng Z, Stephens RM, Braatz RD, Alkire RC, Petzold LR (2008) A hybrid multiscale kinetic Monte Carlo method for simulation of copper electrodeposition. J Comput Phys 227:5184-5199

56. Dow WP, Liu CW (2006) Evaluating the filling performance of a copper plating formula using a simple galvanostat method. *J Electrochem Soc* 153:C190-C194
57. Tan CS, Chen KN, Koester SJ (2012) 3D intergration for VLSI systems. 92
58. Tan CS, Chen KN, Koester SJ (2012) 3D intergration for VLSI systems. 241
59. Chang HH, Shih YC, Hsu CK, Hsiao ZC, Chiang CW, Chen YH, Chiang KN (2008) TSV process using bottom-up Cu electroplating and its reliability test. *Electron Systeminteg Technol Conf*:645-650
60. Aibin Y, Lau JH, Soon WH, Kumar A, Hnin WY, Lee WS, Jong MC, Sekhar VN, Kripesh V, Pinjala D, Chen S, Chan CF, Chao CC, Chiu CH, Hunag CM, Chen C (2011) Fabrication of high aspect ratio TSV and assembly with fine-pitch low-cost solder microbump for Si interposer technology with high-density interconnects. *IEEE Trans Compon Packag Manuf Technol* 1:1336-1344
61. Hofmann L. et al. Investigations regarding Through Silicon Via filling for 3D integration by Periodic Pulse Reverse plating with and without additives // *Microelectronic Engineering*. — 2011. — T. 88. — №. 5. — C. 705-708.
62. Dow W. P. et al. Influence of convection-dependent adsorption of additives on microvia filling by copper electroplating // *Journal of The Electrochemical Society*. — 2005. — T. 152. — №. 6. — C. 425.
63. Moffat T. P., Yang L. Y. O. Accelerator surface phase associated with superconformal Cu electrodeposition // *Journal of The Electrochemical Society*. — 2010. — T. 157. — №. 4. — C. D228.
64. Matsuoka T. et al. Inverse analysis of accelerator distribution in copper through silicon via filling // *Electrochimica Acta*. — 2012. — T. 82. — C. 356-362.
65. Kim M. J. et al. Cu bottom-up filling for through silicon vias with growing surface established by the modulation of leveler and suppressor // *Journal of the Electrochemical Society*. — 2013. — T. 160. — №. 12. — C. D3221.
66. Chiu Y. D., Dow W. P. Accelerator screening by cyclic voltammetry for microvia filling by copper electroplating // *Journal of The Electrochemical Society*. — 2013. — T. 160. — №. 12. — C. D3021.
67. Kondo K. et al. High-aspect-ratio copper-via-filling for three-dimensional chip stacking: II. Reduced electrodeposition process time // *Journal of the Electrochemical Society*. — 2005. — T. 152. — №. 11. — C. H173.
68. Hayashi T. et al. Correlation between filled via and produced cuprous ion concentration by reverse current waveform // *Journal of The Electrochemical Society*. — 2013. — T. 160. — №. 6. — C. D256.
69. Hong S. C. et al. Reduction of defects in TSV filled with Cu by high-speed 3-step PPR for 3D Si chip stacking // *Microelectronics Reliability*. — 2011. — T. 51. — №. 12. — C. 2228-2235.

70. Moffat T. P., Josell D. Extreme bottom-up superfilling of through-silicon vias by damascene processing: suppressor disruption, positive feedback and turing patterns //Journal of The Electrochemical Society. — 2012. — Т. 159. — №. 4. — С. D208.

71. Zhang Y. et al. Optimization of innovative approaches to the shortening of filling times in 3D integrated through-silicon vias (TSVs) //Journal of Micromechanics and Microengineering. — 2015. — Т. 25. — №. 4. — С. 045009.

72. Chen J. C. et al. Effects of slurry in Cu chemical mechanical polishing (CMP) of TSVs for 3-D IC integration //IEEE transactions on components, packaging and manufacturing technology. — 2012. — Т. 2. — №. 6. — С. 956-963.

73. Yuwen, Hui-Hui & Zhang, Xin-Ping. (2016). Numerical simulation of the TSV-Cu filling by electroplating process with the accelerator and suppressor. 721-726. 10.1109/ICEPT.2016.7583233.

74. Choi, Jae Woong & Guan, Ong & Yingjun, Mao & Jieli, Xie & Lan, Chow & Kim, Soon-Wook & Murthy, Ramana & Kiat, Eugene & Wickramanayaka, Sunil. (2013). Effect of Cu seed layer aging on Cu filling failure in through Si vias (TSVs). 420-423. 10.1109/EPTC.2013.6745755.

75. Choi, Eun-Hey & Lee, Youn Seoung & Rha, Sa-Kyun. (2012). Effects of Current Density and Organic Additives on via Copper Electroplating for 3D Packaging. Korean Journal of Materials Research. 22. 10.3740/MRSK.2012.22.7.374.

76. Gusev E. E. et al. Experimental Study Mechanical Stresses and Strength in Multilayer PECVD SiO₂ //2021 IEEE Conference of Russian Young Researchers in Electrical and Electronic Engineering (ElConRus). — IEEE, 2021. — С. 2437-2441.

77. Novak A. V. et al. Dependence of mechanical stresses in silicon nitride films on the mode of plasma-enhanced chemical vapor deposition //Semiconductors. — 2018. — Т. 52. — С. 1953-1957.

78. Dyuzhev, N.A., Gusev, E.E. et. al., Fabrication and Study of Parameters and Properties of Nanostructured Membranes for MEMS Devices //Nanotechnologies in Russia. — 2017. — Т. 12. — С. 426-437

79. Djuzhev, N.A., Gusev, E.E., Dedkova, A.A., Makhaboroda, M.A., Non-destructive method of surface mapping to improve accuracy of mechanical stresses measurements //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. — IOP Publishing, 2018. — Т. 289. — №. 1. — С. 012007.

80. Ji L, Jing X, Xue K, Xu C, He H, Zhang W (2014) Effect of annealing after copper plating on the pumping behavior of through silicon vias. In International Conference on Electronic Packaging Technology:101-104

81. Malta D. et al. Characterization of thermo-mechanical stress and reliability issues for Cu-filled TSVs //2011 IEEE 61st Electronic Components and Technology

Conference (ECTC). — IEEE, 2011. — С. 1815-1821.

82. Heryanto A, Putra WN, Trigg A, Gao S, Kwon WS, Che FX, Ang XF, Wei J, Made R, Gan CL, Pey KL (2012) Effect of copper TSV annealing on via protrusion for TSV wafer fabrication. *J Electron Mater* 41:2533-2542

83. Xiangmeng Jing, Hongwen He, Liang Ji, “Effect of Thermal Annealing on TSV Cu Protrusion and Local Stress”, *Electronic Components and Technology Conf*, May2013, pp. 461-466.

84. Choi JW, Guan OL, Yingjun M, Mohamad Yusoff HB, Jieli X, Lan CC, Loh WL, Lau BL, Hwee Hong LL, Kian LG, Murthy R, SweeKiat ET (2014) TSV Cu filling failure modes and mechanisms causing the failures. *IEEE Trans Compon Packag Manuf Technol* 4:581-587

85. Mo, Zihao & Wang, Fangcheng & Li, Jinhui & Liu, Qiang & Zhang, Guoping & Li, Weimin & Yang, Chunlei & Sun, Rong. (2023). Temporary Bonding and Debonding in Advanced Packaging: Recent Progress and Applications. *Electronics*. 12. 1666. 10.3390/electronics12071666.

86. S. Oldeide, R. Beckmann, L. Giai-Miniet and K. Reitingier, «Thermal Debonding and Warpage Adjust of FOWLP — A Crucial Step in the Evolution of Advanced Packaging?», 2018 International Wafer Level Packaging Conference (IWLPC), San Jose, CA, USA, 2018, pp. 1-6, doi: 10.23919/IWLPC.2018.8573267

87. Uhrmann, Thomas & Urban, Peter & Wimplinger, M. & Považay, Boris & Bravin, Julian & Thallner, Bernd. (2023). Novel IR Laser Debonding for Heterogeneous and 3D Integration. *IMAPSource Proceedings*. 2023. 10.4071/001c.90230.

88. Fomichev, Michael & Makhaboroda, Maksim & Djuzhev, Nikolay & Dedkova, A. & Gusev, E. (2021). Development of Adhesive Wafer Bonding Technology. 2558-2562. 10.1109/ElConRus51938.2021.9396080.

THE MAIN TECHNOLOGICAL OPERATIONS OF TSV MANUFACTURING

Fomichev M.Y.¹, Ivanin P.S.^{1,2}, Bepalov V.A.¹,
Makhiboroda M.A.¹, Gusev E.E.^{1,2}, Djuzhev N.A.¹

¹*National Research University of Electronic Technology*

²*Voronezh State University of Forestry and Technologies named after G. F. Morozov*

Received 05.11.2024

3D integration with through-silicon via (TSV) is a promising candidate to perform system-level integration with smaller package size, higher interconnection density, and better performance. TSV fabrication is the key technology to permit communications between various strata of the 3D integration system. TSV fabrication steps, such as etching, isolation, metallization processes, and related failure modes, as well as other characterizations are discussed in this paper.

Keywords: dielectric layer, barrier layer, nucleation layer, electrochemical deposition, through vias in silicon.

ПЕРВОПРИНЦИПНЫЙ ПОДХОД К МОДЕЛИРОВАНИЮ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ АВТОЭМИССИОННЫХ СТРУКТУР С НАНОРАЗМЕРНЫМ ВАКУУМНЫМ ЗАЗОРОМ

Б.В. Лобанов¹, Г.Д. Демин¹, И.Д. Евсиков¹, Н.Н. Патюков¹,
Н.А. Дюжев¹

¹*Национальный исследовательский университет «МИЭТ», Москва, Зеленоград
bogdan.02.lobanov@gmail.com*

Поступила 28.11.2024

В настоящее время большое внимание исследователей уделяется разработке вакуумных наноэлектронных приборов на основе автоэмиссионных наноструктур с вакуумным каналом проводимости (наноразмерным вакуумным зазором), обладающих высокой рабочей частотой (от десятков до сотен ГГц) и устойчивостью к воздействию радиации и температуры. По мере уменьшения ширины зазора в область ниже 10 нм при их проектировании важной задачей становится выбор корректной теоретической модели, достоверно описывающей баллистический транспорт электронов через зазор с учётом кристаллического строения материала электродов и особенностей протекания автоэлектронной эмиссии в наномасштабе. В работе описан первопринципный подход к моделированию металлических двухэлектродных систем с суб-10 нм вакуумным зазором, основанный на теории функционала плотности. На базе данного подхода проведена оценка работы выхода различных материалов эмиттера (W, Mo, Pt), и выполнено сравнение полученных теоретических значений с экспериментальными (расхождение не превышает 2 %). В рамках первопринципной модели рассчитаны вольт-амперные характеристики структуры Pt-вакуум-Pt с длиной вакуумного канала ниже 5 нм, и выявлены характерные отличия первопринципного подхода от классического формализма Фаулера-Нордгейма, не учитывающего атомарную структуру эмиссионной поверхности. Полученные результаты могут быть полезны для технологической реализации новой элементной базы вакуумных наноустройств, применимых в космической отрасли, сверхбыстрой радиоэлектронике и телекоммуникационных системах.

Ключевые слова: автоэлектронная эмиссия, первопринципный подход, теория функционала плотности, вакуумная наноэлектроника, наноразмерный вакуумный зазор, квантово-размерные эффекты, численное моделирование.

УДК 537.533.2

DOI: 10/31145/2224-8412-2024-24-1-51-70

Введение

Благодаря современному прогрессу вакуумной наноэлектроники, связанному с продвижением нанолитографии в область суб-100 нм размеров, за последние десять лет произошло стремительное развитие технологии твердотельных полевых транзисторов с вакуумным или квази-вакуумным (воздушным) каналом проводимости [1]. Данные транзисторы работают на эффекте автоэлектронной эмиссии, где перенос носителей заряда (электронов) с поверхности полевого катода (эмиттера) в вакуум осуществляется под действием вытягивающего электрического поля в межэлектродном пространстве. Преимуществом данного типа транзисторов перед классическими полупроводниковыми транзисторами на технологии КМОП (комплементарная структура металл — оксид — полупроводник) является практически полное отсутствие соударений с кристаллической решеткой или молекулами газа в процессе транспорта через вакуумный канал, когда его длина не превышает длину свободного пробега электронов в воздухе при атмосферном давлении (около 70 нм [2]). Это освобождает от необходимости вакуумного корпусирования подобных изделий и открывает перспективы использования вакуумных нанотранзисторов в качестве новой элементной базы СВЧ приборов (с рабочей частотой в диапазоне от сотен ГГц до нескольких ТГц [3]), применимой в условиях повышенной радиации и температуры, где становится невозможным использовать традиционную КМОП электронику на суб-10 нм проектных нормах [4].

Для их проектирования требуется учет квантово-механических явлений, возникающих в нанометровом зазоре в процессе полевых эмиссии свободных носителей заряда, что выходит за рамки классических представлений (формализм Фаулера-Нордгейма [5], Мёрфи-Гуда с аппроксимацией эллиптических функций в приближении Форбса-Дина [6], Стрэттона-Моргулиса [7] и их модификации [8-11]). В данной работе будет рассмотрен первопринципный (атомистический) подход к описанию эффекта автоэлектронной эмиссии в вакуумных наноструктурах, в котором в рамках теории функционала плотности (ТФП) учитывается влияние кристаллической и электронной структуры полевого эмиттера на транспорт электронов через наноразмерный вакуумный канал проводимости. Применение данного подхода к предсказанию работы вакуумных нанотранзисторов является важным этапом на пути проектирования и разработки новых радиационно-стойких и быстродействующих приборов на их основе. Исследование данной темы имеет актуальное значение в свете постоянного развития нанотехнологий и стремительного развития электронной индустрии. Полученные результаты могут быть применены в различных областях электронной промышленности, таких как разработка СВЧ схем для работы в экстремальных условиях, сенсоров, дисплеев и других устройств. Результаты работы также мо-

гут быть полезны для научного сообщества, инженеров и производителей электронных устройств, а также способствуют развитию новых технологий в области вакуумной наноэлектроники.

1. Описание первопринципного подхода к моделированию автоэлектронной эмиссии на основе теории функционала плотности

Первопринципный подход требует переоценки типичных параметров автоэлектронной эмиссии с наноразмерных структур, в частности, работы выхода и величины автоэмиссионного тока. Указанные параметры во многом определяются кристаллическим строением материала эмиттера и наличием у него дополнительных электронных состояний, связанных с поверхностными/кристаллическими дефектами на атомарном масштабе. Учет вышеперечисленных факторов, влияющих на характер протекания автоэлектронной эмиссии, не представляется возможным в рамках известных классических аналитических моделей расчёта автоэмиссионного тока, разработанных для металлов [5,6,12] и полупроводников [7], поскольку требует детальной информации о кристаллической и электронной структуре катода. Для наноразмерных полевых эмиттеров существенными становятся особенности структуры атомов и распределения электронов по энергетическим состояниям. Поскольку в процессе должны учитываться корреляции между электронами, необходимо применять представление об атомах как частицах с определенным функционалом электронной плотности. Идея вычислений в рамках ТФП заключается в переходе от решения уравнения Шрёдингера для волновой функции многоэлектронной системы к вычислению электронной плотности для системы невзаимодействующих между собой частиц (электронов) с заданным обменно–корреляционным потенциалом. Фундаментальные утверждения о возможности подобного перехода были впервые описаны Хоэнбергом и Коном в 1964 году, и через год Коном и Шэмом был найден практический способ применения ТФП для расчета параметров основного электронного состояния. В рамках системы N невзаимодействующих частиц с одночастичными орбиталями $\phi_i(\mathbf{r})$, решение уравнения Шрёдингера для орбиталей связано напрямую с электронной плотностью $n(\mathbf{r})$ в рамках этой орбитали как:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (1)$$

Поскольку энергетический спектр отдельных частиц является функционалом электронной плотности, то и полная кинетическая энергия системы T_s также является функционалом плотности:

$$T_S = T_S [n(\mathbf{r})] = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \int \phi_i^*(\mathbf{r}) \nabla^2 \phi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2)$$

Таким образом, положения ТФП могут быть использованы для расчёта электронного транспорта в автоэмиссионных структурах. Однако, кубическая зависимость времени вычисления от количества атомов является препятствием для применения данной методики в моделировании полноразмерных структур и накладывает существенные ограничения для промышленного использования. Для существенного сокращения вычислительных затрат при расчёте волновых функций электронов используется метод псевдопотенциала (ПП), который представляет собой эффективный потенциал, действующий на электроны проводимости в твердом теле со стороны атомов твердотельной структуры. В таком приближении не рассматриваются движения электронов вблизи атомов, тогда как атомы рассматриваются как неполяризуемые ионы, воздействующие на электроны проводимости.

При описании системы в рамках метода ПП можно получить более простой базис волновых функций за счет сокращения количества рассматриваемых электронов. ПП учитывает только валентные электроны и рассчитывается таким образом, что его волновая псевдофункция не имеет радиальных узлов возле атомов и согласуется с реальными волновыми функциями (ВФ) и потенциалом за пределами некоторого радиуса (r_{cut}). В приближении ПП должны сохраняться свойства атомов решетки, такие как фазовые сдвиги и рассеивание. Поскольку эти свойства зависят от углового момента, в целом, псевдопотенциал должен учитывать различные возможные состояния углового момента:

$$V_{ion} = \sum_{lm} |lm\rangle V_l \langle lm|, \quad (3)$$

где $|lm\rangle$ — сферические гармоники, V_l — ПП для углового момента l . Если в каждой \mathbf{k} -точке есть $N_{p\omega}$ плоских волн волновой функции электрона, и всего есть N_k плоских волн, то для оценки величины ПП потребуется вычислить $N_{p\omega} N_k (N_{p\omega} + 1) / 2$ проекций для каждого l . Потенциал кристалла V_{cr} может быть определен из системы, где в каждый узел решетки помещен псевдопотенциал V_{ps} :

$$V_{cr}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \sum_s S_s(\mathbf{G} - \mathbf{G}') V_{ps}(\mathbf{G} - \mathbf{G}'), \quad (4)$$

где суммирование идет по всем «ионам» (псевдоатомам) решетки, а S_s — структурный фактор, задаваемый выражением:

$$S_s(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \sum_i e^{i(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \mathbf{R}_i} \quad (5)$$

Суммарная энергия электронов в таком случае может быть записана в виде:

$$E_{e-i,lm} = \sum_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} \langle \psi | lm \rangle V_{cr}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') \langle lm | \psi \rangle \quad (6)$$

Двойная сумма дает квадратичную зависимость энергии от количества плоских волн, что сильно ограничивает возможности вычисления ПП. Существуют формы ПП, которые позволяют существенно ускорить вычисления для сложных систем. Например, ПП Клейнмана–Биландера [13] опирается на суммирование по гармоникам вместо суммирования по всем ионам, что дает линейную зависимость энергии от размера базиса:

$$V_{ion} = V_{loc} + \sum_{lm} \frac{|\psi_{lm} \delta V_l| \langle \delta V_l \psi_{lm} |}{\langle \psi_{lm} | \delta V_l | \psi_{lm} \rangle}, \quad (7)$$

где V_{loc} — локальный потенциал, ψ_{lm} — ВФ псевдоатомов и δV_l — разница между компонентой углового момента для распределенного потенциала и локальным потенциалом. Приближения ПП, в которых и реальные и псевдодолновые функции генерируют одинаковую плотность заряда вне ядра псевдоатома, называются приближениями, сохраняющими нормировку. Существует множество других ПП, сохраняющих нормировку, которые были предложены различными авторами: ПП Хаманна [14], ПП Вандербильта [15], ПП Труллера–Мартинса [16] и т.д. Существуют методики расчета псевдопотенциалов с уменьшенным порогом отсечки энергии и уменьшенным радиусом вблизи атома, в рамках которого не учитываются осцилляции волновой функции.

2. Метод на основе неравновесных функций Грина для расчета автоэлектронной эмиссии в диодных структурах

При расчете транспорта электронов через вакуумный канал проводимости в качестве базиса можно использовать волновые функции для плоских волн, полученные из численного решения уравнений Кона–Шэма [17]. Наиболее эффективным и точным методом расчета представляется использование данного базиса, полученного в рамках ТФП, и неравновесных функций Грина (НФГ) для описания влияния электродов в области рассеяния. Основной целью расчетов по методу ТФП–НФГ является получение самосогласованного определения электронной плотности и эффективного гамильтониана Кона–Шэма для открытой квантовой системы, к которой подключено определенное количество электродов с различным электрохимическим по-

тенциалом. Без учета теории возмущений, области электродов должны быть достаточно большими для компенсации возмущений, вызванных присутствием движущегося заряда в области рассеяния. Иными словами, рассматривается равновесное состояние электродов. Если электроды не находятся в равновесии друг с другом, расчеты в области рассеяния потребуют знания неравновесной плотности заряда, для вычисления которой используется метод НФГ в совокупности с результатами расчёта электронной плотности из ТФП.

Рассмотрим квантово-механическую систему, состоящую из двух полубесконечных электродов и соединяющей их области рассеяния. Матричные элементы гамильтониана и интегралы перекрытия орбиталей электродов равны нулю, т.е., электроды находятся далеко друг от друга и связаны только областью рассеяния. На рис. 1 изображена типичная структура молекулярного перехода в качестве примера двухэлектродной системы для первопринципного моделирования транспортных свойств. В отличие от молекулярного перехода, в автоэмиссионной диодной структуре вместо области рассеяния с молекулой бензола между электродами будет располагаться вакуумный зазор.



Рисунок 1 — Молекула (бензольное кольцо), помещенная между полубесконечными электродами из золота [18].

Ток автоэлектронной эмиссии представляет собой ток электронов, вырывающихся с поверхности катода и пролетающих через зазор к аноду при заданной разнице напряжений между левым и правым электродом [19]. В рамках ТФП данный процесс может быть описан посредством выбора базисных ВФ и последующего решения задачи рассеяния электронов в межэлектродной области. В такой модели для нахождения коэффициента прохождения через вакуумный зазор базис ВФ должен существовать во всей области рассеяния с учётом отсечки базиса по энергии.

Локализованные базисы достаточно сложно адаптировать для расчётов автоэмиссии с поверхности катода в вакуум: экспоненциальное затухание ВФ в локализованных базисах дает неверное описание распространения по-

верхностного заряда в направлении тока и медленного затухания внутри области вакуума. Базисный набор плоских волн (ПВ) подходит для описания распространения заряда в вакуум, однако, для описания затухающей ВФ в терминах ПВ требуется расчет огромного количества ПВ, что делает данный базис непригодным для исследования структур больших размеров. Далее представлены способы решения задачи расчета автоэмиссионного спектра прохождения вакуумного зазора из первых принципов с выбором базисного набора ВФ в форме линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

С увеличением вакуумного зазора требуется более точное описание структуры электронов в области туннелирования. Показано, что увеличение числа ВФ для описания валентных орбиталей связи не влияет на спектр прохождения в случае наличия области вакуума. Компоненты базиса ЛКАО, формирующие короткие каналы проводимости, не участвуют в вычислении спектра прохождения. Для учета вклада таких каналов проводимости возможно использовать «призрачные» атомы (ПА, англ. ghost atoms), представляющие собой набор базисных ВФ с нулевым потенциалом, аналогичный набору реальных атомов структуры. Представление вакуума через ПА не нарушает электронную структуру автоэмиссионной системы и улучшает описание ВФ в месте расположения вакуумного зазора. Однако, при использовании ПА в моделировании реальных структур возникают проблемы, связанные с сохранением симметрии канала проводимости и расчётом устройств с асимметричной областью рассеяния. Также следует учитывать перекрытие базисных орбиталей между ПА и реальными атомами в области рассеяния. Перекрытие орбиталей приводит к возникновению поправки на перекрытие базисного набора (BSSE), которая, в свою очередь, приводит к завышенным результатам расчетов электронной проводимости и тока в устройстве. Размещение ПА в области рассеяния должно происходить в областях границы отсечки численных орбиталей реальных атомов.

3. Сравнение базисов волновых функций для расчета транспортных свойств наноструктур с вакуумным зазором

Для корректной оценки транспортных свойств автоэмиссионных структур в рамках ТФП важно выбрать подходящий набор базисных ВФ. Как правило, для этой цели базис выбирается либо из набора атомных орбиталей (или ЛКАО), либо из набора ПВ, описывающих движение носителей заряда в пространстве. Существуют фундаментальные проблемы в использовании ТФП для численного решения задач электронного транспорта в наноразмерных устройствах, связанные с правильным выбором базисных ВФ. Большинство вычислений в рамках ТФП нацелены на выявление причин расхождения теоретических величин с экспериментальными, в частности, величины тока при расчёте электронного транспорта, где выбор подходящих

базисных ВФ имеет первостепенное значение [20]. В случае периодических (например, идеальных кристаллических) структур, потенциал хорошо описывается базисным набором ПВ [21]:

$$\Psi_{ik}(\mathbf{r}) = u_{i,k}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (8)$$

где $u_{i,k}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{i,k}(\mathbf{r})$, $\mathbf{R} = l\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + n\mathbf{a}_3$ — вектор прямой решетки, а \mathbf{r} обозначает координаты электронов в пространстве.

В силу своей периодичности, потенциал можно применить на всю кристаллическую решетку в виде функций ПВ. Эти функции ортогональны, а их векторы могут быть описаны через вектор обратной решетки:

$$\mathbf{G} = l'\mathbf{b}_1 + m'\mathbf{b}_2 + n'\mathbf{b}_3, \quad \mathbf{b}_i = 2\pi \frac{\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k}{\mathbf{a}_i \cdot (\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)}, \quad (9)$$

где индексы $i = 1, 2, 3$, $j = 2, 3, 1$, $k = 3, 1, 2$ меняются в циклическом порядке, а связь между компонентами $(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ трансляционного вектора \mathbf{R} прямой решетки (в реальном пространстве) и компонентами $(\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3)$ трансляционного вектора \mathbf{G} обратной решетки (в обратном пространстве) определяется через соотношение $\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi\delta_{ij}$.

Для применения базиса ПВ к неперриодической структуре катод/вакуум требуется повторение структуры в направлении электронного транспорта в виде сверхрешетки, однако для этого требуется учитывать большое количество состояний ПВ.

В базисе ЛКАО ВФ для всей системы описывается в виде:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^{N_{at}} \sum_{k_i}^{n_i} \sum_{l_i=0}^{l_i^{\max}} \sum_{m_i=-l_i}^{l_i} c_{ik_i l_i m_i} \varphi_{k_i l_i m_i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (10)$$

где \mathbf{R}_i — позиция i -го атома, N_{am} — количество атомов в системе, n_i — количество орбиталей для i -го орбитального момента, l_i^{\max} — максимальный орбитальный момент для атома. Уравнения Кона–Шэма в приближении ЛКАО решаются в контексте вариационных коэффициентов и матрицы перекрытия:

$$Hc = ES c, \quad (11)$$

где E — полная энергия системы, коэффициенты обозначают собственные состояния, а H и S — гамильтониан системы и матрица перекрытия в матричном виде, элементы которых $(H_{ij}$ и $S_{ij})$ записываются как:

$$H_{ij} = \langle \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | H | \varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle, S_{ij} = \langle \varphi_i(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) | \varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \rangle, \quad (12)$$

$$\varphi_i = \varphi_{k,l,m_i}$$

Вычисление электронного транспорта на базе метода НФГ обычно проводится с применением базиса ЛКАО для молекулярных орбиталей. Использование метода ЛКАО позволяет рассчитывать системы с относительно большим количеством атомов за разумное время в рамках приближения сильной связи (англ. tight-binding approximation, ТВА). С другой стороны, локализованность ВФ вблизи атомных ядер в рамках ЛКАО накладывает ограничения на расчет электронного транспорта в туннельном или автоэмиссионном режиме. Например, ток через вакуумный зазор не может быть адекватно описан в рамках ЛКАО по причине отсутствия корректного описания соответствующих ВФ в области вакуума.

В свою очередь, базис ПВ является более гибким, нежели чем базис ЛКАО, в частности, при использовании ПП, описывающих эффективное действие атомов кристаллической решетки на электроны проводимости. Для хорошей сходимости решения в рамках ТФП необходим большой набор ВФ в базисе ПВ, что приводит к серьезному росту вычислительной стоимости построенных на их основе первопринципных моделей. В случае больших систем, базис ПВ может быть аппроксимирован локализованными функциями Ванье (MLWF) в расчетах с применением НФГ. Использование базиса ПВ позволяет очень точно описать ВФ в вакуумном зазоре, что делает данный базис применимым для вычислений автоэмиссионного тока. Согласно рис. 2, применение базиса ЛКАО (синяя и красная кривая) и базиса ПВ (черная кривая) для контактного режима проводимости дает схожие результаты, тогда как с увеличением длины вакуумного зазора за пределы 6 Å, после которого наступает переход к туннельному и автоэмиссионному режиму, коэффициент прохождения в расчетах на основе метода ЛКАО стремится к нулю.

Экспоненциальное затухание ВФ из базиса ЛКАО в области вакуума может быть промоделировано при помощи ПА или свободных орбиталей, имитирующих отсутствие в месте их расположения локализованных электронов и соответствующего ПП. Ранее было показано, что точный критерий выбора количества и расположения свободных орбиталей в вакуумном зазоре отсутствует. Тем не менее, результаты вычисления транспортных свойств автоэмиссионных структур сильно зависят от выбора свободных орбиталей и зачастую не дают сходимости в части собственных значений ВФ и плотности заряда.

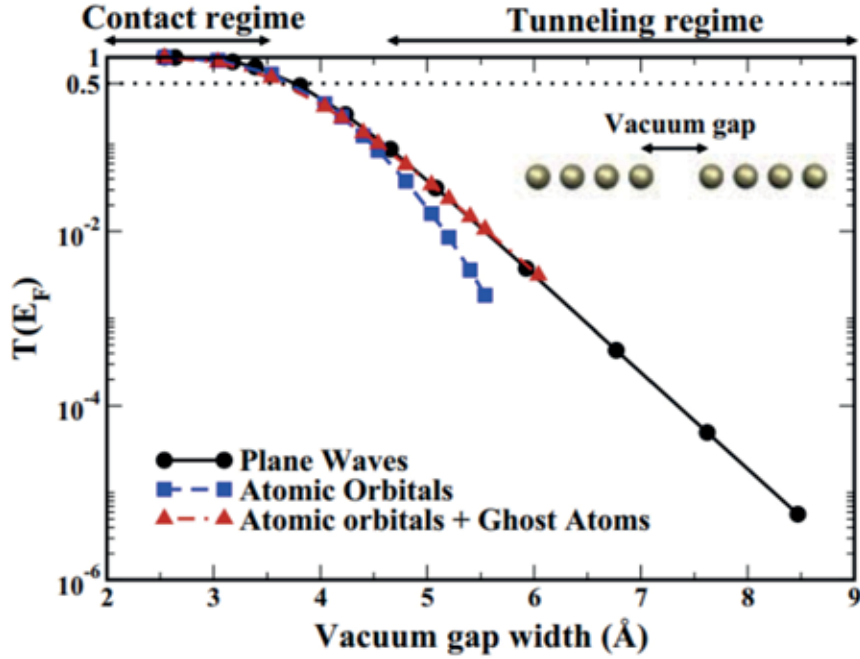


Рисунок 2 — Коэффициент прохождения на уровне Ферми для структуры Au-вакуум-Au в зависимости от толщины вакуумного зазора, рассчитанный на основе моделей с различным базисом ВФ: базис ПВ, базис ЛКАО, базис ЛКАО с ПА [22].

Расчет в рамках базиса ПВ предполагает распространение ВФ атомных орбиталей в вакуум. Для описания данного динамического процесса существует ТФП, в которой решается набор зависящих от времени уравнений Кона–Шэма:

$$i\hbar\psi_i' = H\psi_i, \quad (13)$$

где $H = H(t)$, $\psi_i' = \partial\psi_i / \partial t$, $\psi_i = \psi_i(t)$. Тогда можно записать $\psi_i(t) = U(t, t_0)\psi_i^0$, где $\psi_i^0 = \psi_i(t_0)$ — ВФ в нулевой момент времени, а оператор эволюции системы $U(t, t_0)$ принимает вид:

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(\tau) d\tau\right] \quad (14)$$

Положим далее, что $t_0 = 0$, $t = T$, где T — заданный временной период. При условии, что следующий гамильтониан коммутирует с предыдущим, решение может быть записано в упрощенном виде:

$$\psi_i(T) = \psi_i^0 \exp[-iTH] \quad (15)$$

В общем случае необходимо использование самосогласованного оператора Кона–Шэма, полученного из переменной электронной плотности. Для расчета такого оператора необходимо провести дискретизацию оператора эволюции системы по времени:

$$U(T, 0) = \prod_{i=0}^{N-1} U(t_i + \delta t, t_i), \quad (16)$$

где $t_0 = 0$, $t_{N-1} = t_N + \delta t$, $t_N = T$, $\delta t = T / N$. С точки зрения решения зависящих от времени уравнений Кона–Шэма, проблема раскладывается на нахождение коротких по времени распространения ВФ вида:

$$\psi_i(t + \delta t) = U(t + \delta t, t) \psi_i(t) = \psi_i(t) \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\delta t} H(\tau) d\tau \right], \quad (17)$$

где $U(t + \delta t, t)$ — дискретный оператор эволюции. В вычислениях необходима определенная аппроксимация данного оператора исходя из значений $H(\tau)$. Одним из методов аппроксимации является метод Кранка–Николсона, также называемый правилом внутренней середины [23]. Данный численный метод базируется на усреднении интегралов Эйлера:

$$i\hbar \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta t} = H(t_{n+1/2}) \frac{1}{2} (\psi_{n+1} + \psi_n), \quad (18)$$

где $t_{n+1/2} = (t_{n+1} + t_n) / 2$, $t_n = n\Delta t$. Отсюда можно записать прямую зависимость следующего состояния ВФ (ψ_{n+1}) от предыдущего (ψ_n):

$$\psi_{n+1} = \frac{1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar} H(t_{n+1/2})}{1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar} H(t_{n+1/2})} \psi_n \quad (19)$$

Данное приближение называется приближением Кэйли для второго порядка Δt . Таким образом, оценка оператора эволюции сводится к решению линейного матричного уравнения вида:

$$\left[\hat{I} + \frac{i\Delta t}{2\hbar} H(t_{n+1/2}) \right] \psi_{n+1} = \left[\hat{I} - \frac{i\Delta t}{2\hbar} H(t_{n+1/2}) \right] \psi_n \quad (20)$$

В свою очередь, ток, протекающий в автоэмиссионной структуре с двумя электродами через вакуумный зазор, может быть вычислен с использованием формулы Ландауэра:

$$I_{fn} = \frac{2e}{h} \int_{\mu_L}^{\mu_R} \sum_n T_n(E) dE, \quad (21)$$

где μ_L и μ_R — энергии Ферми правого и левого электродов соответственно, $T_n(E)$ — коэффициент прохождения для n -ой зоны с энергией E .

4. Описание первопринципной модели двухэлектродной автоэмиссионной структуры с наноразмерным вакуумным зазором

Моделирование процесса автоэлектронной эмиссии через вакуумный зазор на основе первопринципного подхода сопряжено с определенными трудностями. Итеративные алгоритмы расчета ВФ и электронной плотности зависят от большого количества факторов, таких как механические напряжения в атомарной структуре полевого эмиттера, наличие поверхностных электронных состояний, перекрытие орбиталей (базисных функций) соседних атомов и проч. Также при моделировании полупроводниковых электродов существует проблема, связанная со сходимостью расчетов в области рассеяния электронов на решетке из-за большой длины экранирования Дебая в полупроводниках. Для моделирования элементов расчётной сетки в области вакуумного зазора применяется базисный набор ВФ в форме ПА с нулевым потенциалом или свободных орбиталей. В общем (трехмерном) случае для сходимости расчетов расположение ПА должно учитывать симметрию кристаллической решетки, тогда как перекрытие базисов соседних ПА должно быть минимальным.

Одной из наиболее простых автоэмиссионных систем является двухэлектродная структура, состоящая из цепочки атомов катода и анода, разделенных наноразмерным вакуумным зазором (рис. 3). В случае выбора данной системы корректное расположение ПА в области вакуума тривиально, поскольку определяется только местом локализации базисных ВФ в рамках ЛКАО. Расчеты атомной цепочки проводятся исключительно быстро за счет малого количества атомов, что посредством вариации ширины вакуумного зазора позволяет установить границу перехода от контактного режима к режиму туннелирования и автоэмиссии, а также количественно оценить вольт-амперную характеристику (ВАХ) структуры с заданным материалом электродов. Для минимизации области перекрытия базисов ПА учитывается наименьшая область локализации орбиталей в приближении обобщенного градиента (англ. GGA, Generalized Gradient Approximation). Предельное расстояние между ПА в представленном на рис. 3 случае — 4.86 Å.



Рисунок 3 — Двухэлектродная система Pt-вакуум-Pt, представленная в виде цепочки атомов Pt, разделенных вакуумным зазором.

Ориентация кристаллической решетки $\langle 100 \rangle$, ПА, моделирующие область вакуумного зазора, показаны серым цветом.

В случае большого количества атомов и использовании конечного базиса ВФ в рамках приближения ЛКАО, существенную роль при изучении поверхностных процессов играет ошибка суперпозиции базисного набора (англ. BSSE, Basis Set Superposition Error). BSSE может быть скомпенсирована при помощи ПА, расположенного близко к поверхности с реальными атомами, что дает смешанный базис в области поверхности, скомпенсированный пустыми орбиталями ПА [24].

5. Расчет работы выхода материала эмиттера (катода)

Для качественной оценки автоэмиссионных характеристик двухэлектродной системы с металлическими электродами и вакуумным нанозазором изначально был произведен расчет работы выхода различных металлов (W, Mo, Pt). Результаты проведенного расчёта на основе пакета первопринципного моделирования Synopsys QATK показаны в табл. 1.

Материал (Me)	Кристаллографическое направление	Работа выхода ϕ Me теор. (эВ)	Работа выхода ϕ Me эксп. (эВ)	Расхождение (%)
W (вольфрам)	$\langle 100 \rangle$	4.44	4.52 [25]	1.8
Mo (молибден)	$\langle 100 \rangle$	4.27	4.25 [26]	0.5
Pt (платина)	$\langle 100 \rangle$	5.65	5.70 [27]	0.9

Таблица 1. Сравнение рассчитанных теоретических и экспериментальных значений работы выхода для различных металлов.

Из табл. 1 видно, что рассчитанные значения работы выхода имеют хорошую сходимость с экспериментом. Результаты были получены для структуры, представленной на рис. 4. Базисный набор ВФ был взят в рамках приближения ЛКАО, с псевдопотенциалом PseudoDojo (Medium) и обменно-корреляционным функционалом Пердю — Берк — Эрнцерхофа

(РВЕ). Для решения уравнения Пуассона с целью вычисления распределения потенциала на правой границе системы по оси OZ (в направлении C) было взято граничное условие Дирихле, задающее нулевой потенциал и имитирующее наличие вакуума вдали от поверхности. В свою очередь, на левой границе по оси OZ (в направлении C) применялось граничное условие Неймана, задающее нулевой градиент потенциала в левой части. В направлениях A и B , перпендикулярных оси OZ (направлению C) было взято периодическое граничное условие. На правом конце структуры использовались ПА для корректной имитации затухания ВФ при переходе в вакуум, что необходимо для получения адекватной оценки работы выхода.



Рисунок 4 — Первопринципная модель автоэмиссионной структуры «металл-вакуум», предназначенная для расчёта работы выхода.

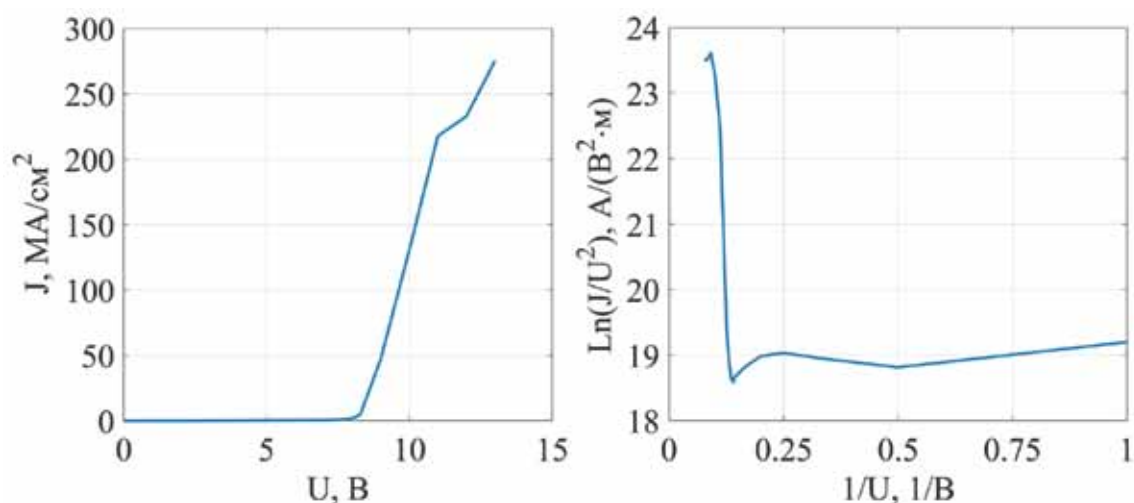
6. Расчет ВАХ структуры Pt-вакуум-Pt с вакуумным нанозазором

Для оценки ВАХ двухэлектродной структуры Pt-вакуум-Pt с вакуумным зазором (вакуумного диода) были исследованы цепочки атомов Pt, аналогичные рис. 3, с различным размером вакуумного зазора — в диапазоне от 1 до 3 нм. Напряжение U между электродами варьировалось от 1 до 16 В. На базе ТФП с использованием НФГ и ПА были рассчитаны электронная плотность и коэффициент прохождения через область рассеяния, на основе которых была произведена оценка плотности тока через вакуумный зазор. Изменение напряжения характеризовалось как изменение электрохимического потенциала электродов на соответствующую величину. Рассчитанные ВАХ структуры «Pt-вакуум-Pt» представлены на рис. 5, где в левой части рисунка зависимость плотности тока J от напряжения U представлена в обычных координатах, а в правой части — в координатах Фаулера-Нордгейма (Ф.-Н.), что необходимо для более наглядного представления различных режимов электронного транспорта при заданном напряжении. Так для случая наноразмерных вакуумных зазоров (1-3 нм) можно явным образом выделить 3 области переноса электрического заряда: линейную область автоэлектронной эмиссии, область

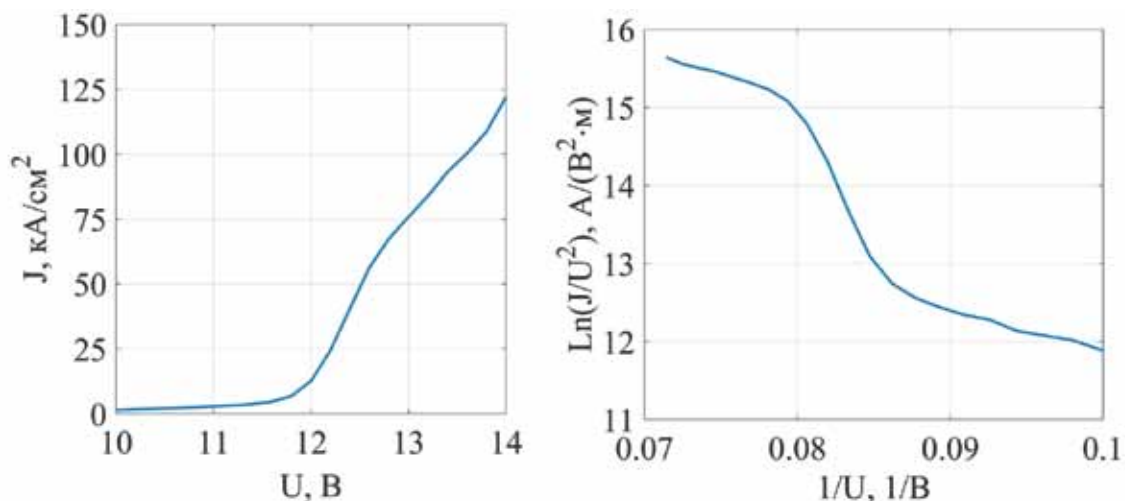
туннельного тока и область утечки, когда напряжения недостаточно для переноса электронов через зазор. Для получения ВАХ в структуре с большим вакуумным зазором (более 3 нм) требуется расчет с использованием ТФП и метода НФГ для напряжений выше 20 В, что сопряжено с определенными вычислительными сложностями.

Для иллюстрации наглядной зависимости тока от толщины вакуумного зазора напряжение было пересчитано в электрическое поле на поверхности катода, после чего была построена зависимость, представленная на рис. 6. Было показано, что при одинаковом электрическом поле плотность тока для различных толщин вакуумного зазора различна, что отчасти свидетельствует о влиянии квантово-размерных эффектов на транспорт электронов через канал.

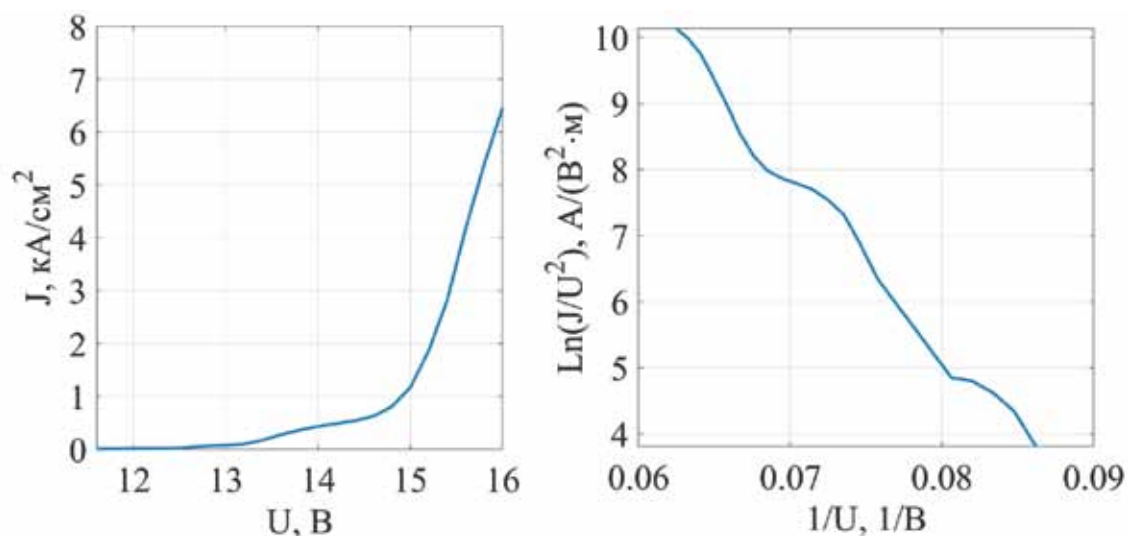
Также было проведено сравнение значений автоэмиссионного тока в структуре Pt-вакуум-Pt, рассчитанных на основе первопринципного подхода и полученных в рамках теоретического формализма Ф.-Н. с применением аналитического уравнения Мёрфи-Гуда, которое описывает плотность тока полевой эмиссии для металлов [6,12]. На рис. 6 можно увидеть, что зависимость тока от электрического поля из первопринципных расчётов во многом повторяет закономерность изменения ВАХ из классических представлений Ф.-Н. Однако обнаруживаются некоторые отличия первопринципного моделирования, которые более явно выражены в координатах Ф.-Н.: так на графиках для выбранных размеров вакуумного зазора имеются отличные от линейного участки насыщения тока и области утечки, а также ВАХ имеют в линейной области автоэмиссии имеют другой наклон, что свидетельствует о различии в работе выхода эмиссионного материала и более сложной форме эффективного потенциального барьера на границе «металл-вакуум».



(a)



(б)



(в)

Рисунок 5 — Плотность автоэмиссионного тока J в структуре Pt-вакуум-Pt как функция от приложенного напряжения U для различных размеров вакуумного зазора: а) $d=1$ нм, б) $d=2$ нм, в) $d=3$ нм.

В левой части представлены графики в обычных координатах, в правой — в координатах Ф.-Н.

Исходя из результатов исследования, можно сказать о необходимости использования первопринципного подхода для моделирования автоэмиссионных структур с наноразмерным вакуумным зазором. Это связано с тем, что формализм Ф. — Н. не учитывает влияния квантово-размерных эффектов вакуумного канала проводимости и атомарной структуры электродов, которые играют важную роль в формировании автоэмиссионного тока при масштабировании ширины зазора до уровня нескольких нм.

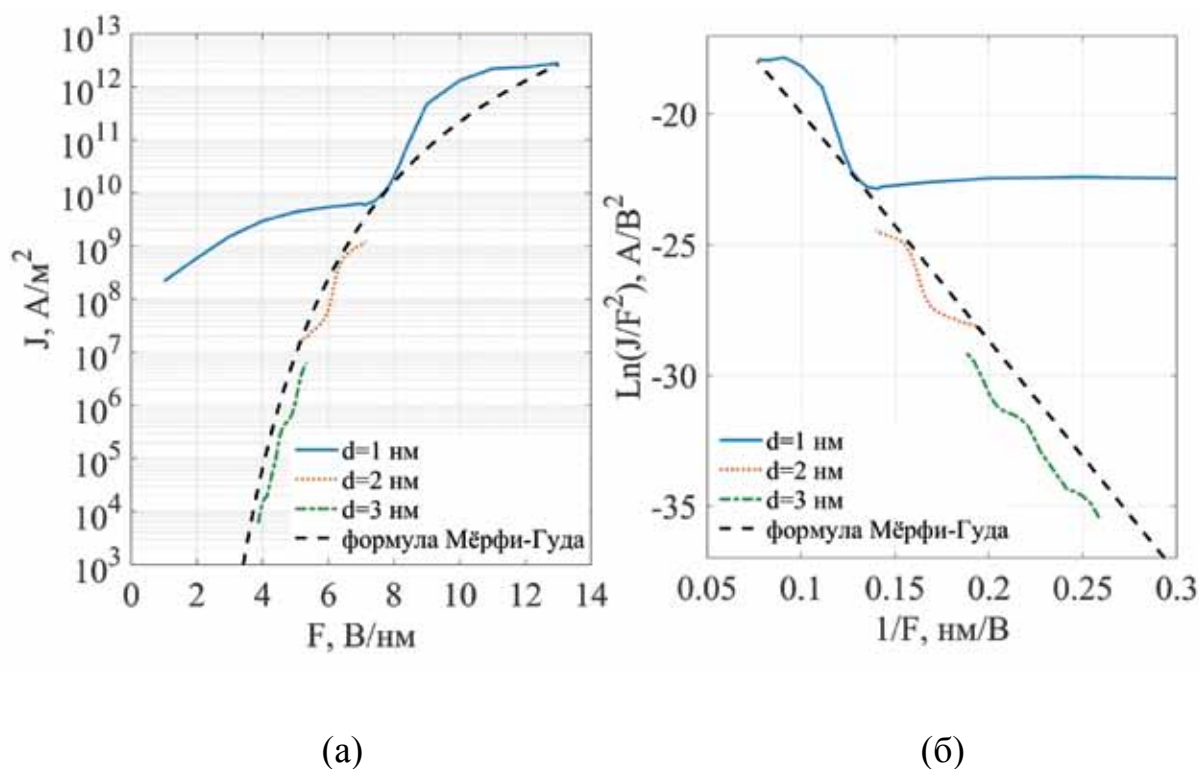


Рисунок 6 — Плотность автоэмиссионного тока как функция электрического поля: а) в обычных логарифмических координатах и б) в координатах Φ . -Н.

Заключение

Работа посвящена поиску новых теоретических подходов для моделирования твердотельных автоэмиссионных структур с наноразмерным вакуумным каналом, масштабируемым к размерам до 10 нм и ниже. В ходе работы был предложен первопринципный подход к расчету тока автоэмиссии в вакуумных наноструктурах, основанный на ТФП, учитывающей кристаллическую структуру эмиттера и влияние квантово-механических эффектов, сопутствующих электронному транспорту через вакуумный зазор. Был подробно описан процесс расчета автоэмиссионного тока в двухэлектродной системе с применением различных наборов базисных функций и приближений. Описан метод расчёта автоэмиссионных структур с использованием ПА с нулевым потенциалом (свободных орбиталей), характеризующих распространение ВФ в области вакуума в рамках ТФП с базисом ЛКАО.

По итогу моделирования на основе метода ТФП была рассчитана работа выхода для перечня наиболее перспективных материалов металлического эмиттера (Pt, W, Mo). Показано хорошее соответствие рассчитанных значений с экспериментальными данными из работ других научных групп (расхождение в значениях работы выхода между теорией и экспериментом для указанных материалов составило от 0.5 до 1.8 %). Выбранные на данном

этапе параметры решателя были использованы для проведения моделирования ВАХ двухэлектродной структуры Pt-вакуум-Pt с различной длиной вакуумного зазора — от 1 до 3 нм. Было выявлено характерное отличие результатов первопринципного подхода от классического формализма Ф.-Н. (в наклоне ВАХ и характере ее изменения с электрическим полем в межэлектродном пространстве), что свидетельствует о необходимости учёта квантово-размерных эффектов при оценке тока эмиссии через вакуумный канал шириной ниже 5 нм (влияние кристаллической структуры электродов и модификации эффективного потенциального барьера на границе «металл-вакуум»).

Литература:

1. Xu J. et al. High-Quality and Stable Electron Emission Device With Sub-30-nm Aligned Nanogap Arrays // *IEEE Trans. Electron Devices*. 2017. Vol. 64, № 5. P. 2364–2368.
2. Srisonphan S., Jung Y.S., Kim H.K. Metal–oxide–semiconductor field-effect transistor with a vacuum channel // *Nature Nanotech*. 2012. Vol. 7, № 8. P. 504–508.
3. Wei Y. et al. Ultra-High Frequency GaN Nanoscale Vacuum Electronic Devices // 2021 22nd International Vacuum Electronics Conference (IVEC). Rotterdam, Netherlands: IEEE, 2021. P. 1–2.
4. Fleetwood D.M. Radiation Effects in a Post-Moore World // *IEEE Trans. Nucl. Sci*. 2021. Vol. 68, № 5. P. 509–545.
5. Fowler R. H. The Analysis of Photoelectric Sensitivity Curves for Clean Metals at Various Temperatures // *Physical Review*. 1931. № 1 (38). C. 45–56.
6. Forbes R.G., Deane J.H.B. Comparison of approximations for the principal Schottky–Nordheim barrier function $v(f)$, and comments on Fowler–Nordheim plots // *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*. 2010. Vol. 28, № 2. P. C2A33-C2A42.
7. Stratton R. Theory of Field Emission from Semiconductors // *Phys. Rev*. 1962. Vol. 125, № 1. P. 67–82.
8. Baskin L.M., Lvov O.I., Fursey G.N. General features of field emission from semiconductors // *Physica Status Solidi (b)*. 1971. Vol. 47, № 1. P. 49–62.
9. Kiejna A., Niedermann Ph., Fischer. Field emission from a metal covered with a semiconducting layer: A model calculation // *Appl. Phys. A*. 1990. Vol. 50, № 3. P. 331–338.
10. Kyritsakis A., Xanthakis J.P. Derivation of a generalized Fowler–Nordheim equation for nanoscopic field-emitters // *Proc. R. Soc. A*. 2015. Vol. 471, № 2174. P. 20140811.
11. Forbes R.G. Renewing the Mainstream Theory of Field and Thermal Electron Emission // *Modern Developments in Vacuum Electron Sources* / ed.

Gaertner G., Knapp W., Forbes R.G. Cham: Springer International Publishing, 2020. Vol. 135. P. 387–447.

12. Murphy E.L., Good R.H. Thermionic Emission, Field Emission, and the Transition Region // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 102, № 6. P. 1464–1473.

13. Kleinman, L. Efficacious Form for Model Pseudopotentials / L. Kleinman, D.M. Bylander // *Physical Review Letters*. — 1982. — Vol. 48, No. 20. — P. 1425–1428

14. Hamann D.R. Generalized norm-conserving pseudopotentials // *Phys. Rev. B*. — 1989. — V. 40. — № 5. — P. 2980–2987

15. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in generalized eigenvalue formalism// *Ibid.* 1990. V. B41. P. 7892

16. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. II. Operators for fast iterative diagonalization // *Phys. Rev. B.* 1991. Vol. 43, № 11. P. 8861–8869.

17. Stefanucci G. и др. Time-Dependent Transport Through Single Molecules: Nonequilibrium Green's Functions // *Time-Dependent Density Functional Theory / под ред. M. A. L. Marques и др. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006. С. 479–492.*

18. Stokbro K. и др. TranSIESTA: A Spice for Molecular Electronics // *Annals of the New York Academy of Sciences.* 2003. T. 1006. № 1. С. 212–226.

19. García-Fernández C., Lorente N. Tunneling electronic currents simulated with localized basis sets // *Surface Science.* 2018. T. 678. С. 201–205.

20. Garcia-Lekue A. и др. Ab initio quantum transport calculations using plane waves // *Progress in Surface Science.* 2015. T. 90. № 3. С. 292–318.

21. Driscoll J. A. и др. Time-dependent density functional study of field emission from nanotubes composed of C, BN, SiC, Si, and GaN // *Nanotechnology.* 2011. T. 22. № 28. С. 285702.

22. Garcia-Lekue A., Wang L.W. Plane-wave-based electron tunneling through Au nanojunctions: Numerical calculations // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82, № 3. P. 035410.

23. Crank J., Nicolson P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type // *Math. Proc. Camb. Phil. Soc.* 1947. Vol. 43, № 1. P. 50–67.

24. Paizs B., Suhai S. Comparative study of BSSE correction methods at DFT and MP2 levels of theory // *J. Comput. Chem.* 1998. T. 19. № 6. С. 575–584.

25. Smith G.F. Thermionic and Surface Properties of Tungsten Crystals // *Phys. Rev.* 1954. Vol. 94, № 2. P. 295–308.

26. Błaszczyszyn M. Work function of adsorption systems potassium on tantalum and on molybdenum // *Surface Science.* 1976. Vol. 59, № 2. P. 533–540.

27. Bouwman R. Photoelectric determination of the work function of gold-platinum alloys // *Journal of Catalysis.* 1970. T. 19. № 2. С. 127–139.

A FIRST-PRINCIPLES APPROACH TO THE SIMULATION OF METALLIC FIELD-EMISSION STRUCTURES WITH A NANOSCALE VACUUM GAP

B.V. Lobanov¹, G.D. Demin¹, I.D. Evsikov¹,
N.N. Patyukov¹, N.A. Djuzhev¹

*1National Research University of Electronic Technology (MIET), Moscow, Zelenograd
bogdan.02.lobanov@gmail.com*

Received 28.11.2024

Nowadays, much attention is paid to the development of vacuum nanoelectronic devices based on field-emission nanostructures with a vacuum conduction channel (nanoscale vacuum gap), which have high operating frequency (from tens to hundreds of GHz) and resistance to radiation and temperature. As the gap width decreases below 10 nm, an important task in their design is to select a correct theoretical model that reliably describes the ballistic transport of electrons through the gap taking into account the crystalline structure of the electrode material and the features of the field-electron emission at the nanoscale. In this work, a first-principles approach for simulation of metallic two-electrode systems with a sub-10 nm vacuum gap based on the density functional theory is described. Using this approach, the work function of different emitter materials (W, Mo, Pt) was estimated, and the obtained theoretical values were compared with the experimental ones (the discrepancy does not exceed 2%). Within the framework of the first-principles model, the current-voltage characteristics of the Pt-vacuum-Pt structure with a vacuum gap width below 5 nm were calculated, and characteristic differences of the first-principles approach from the classical Fowler-Nordheim formalism, which does not take into account the atomic structure of the emission surface, are revealed. The obtained results can be useful for the technological implementation of a new element base of vacuum nanodevices applicable in the space industry, ultra-fast radio electronics and telecommunication systems.

Keywords: field-electron emission, first-principles approach, density functional theory, vacuum nanoelectronics, nanoscale vacuum gap, quantum-size effects, numerical simulation.

Информация и правила для авторов

Общие положения

Журнал «Наноструктуры. Математическая физика и моделирование» (сокращенно: НМФМ) публикуется с 2009 года и является периодическим научным изданием. Электронная версия журнала размещается на сайте <http://www.nano-journal.ru>. Основная цель издания: представление новых теоретических и вычислительных методов моделирования наноструктур и мягкой материи, общих подходов в исследовании мезосистем, а также ключевых экспериментальных результатов в данной области и связанных с этим проблем математической физики.

Журнал НМФМ имеет междисциплинарный характер и в силу этого несет определенную образовательную направленность, а не только узко научную. Работы, представляемые в журнал, должны содержать вводные сведения, которые обеспечат понимание постановок задач и восприятие результатов не только прямыми специалистами. Определения понятий, объяснение обозначений и терминов, оценки характерных параметров, теоретические предпосылки и идеи, используемые методы, и т.п., должны быть кратко объяснены в тексте статьи, имея в виду читателей, специализирующихся в иных направлениях. Должны быть описаны базовые математические модели и уравнения. Во Введении и в последующих разделах очерчивается стратегия и основные трудности, это увязывается с используемыми моделями. Структура статьи ориентируется на прояснение общей логики и методики исследования, содержит резюмирующие выводы. В тексте должны быть рассмотрены характерные примеры (хотя бы, методические), ясно иллюстрирующие предлагаемые алгоритмы.

Журнал публикует научные обзоры, исследовательские статьи и краткие научные сообщения, а также избранные аналитические и информационно-образовательные материалы, тексты докладов и циклов лекций, прочитанных в университетах, научных центрах, на школах-семинарах, конференциях, нигде ранее не публиковавшиеся и не принятые к публикации в других изданиях. Язык публикации в журнале НМФМ, как правило, русский. Работы, представляемые в журнал, не могут иметь научно-популярный или компилятивный характер. Все статьи рецензируются и могут быть отклонены редколлегией журнала. В случае принятия работы к печати ее авторы передают издательству журнала НМФМ право на разовую безвозмездную публикацию текста и его размещение в электронной версии на сайте журнала. Перевод опубликованных в журнале статей на другие языки может осуществляться только с разрешения и при участии авторов.

Порядок представления статей

- В редакцию изначально представляются:
 - файл статьи, файлы с иллюстрациями;
 - сопроводительное письмо, можно в электронной форме, содержащее сведения об объеме статьи и обо всех авторах (фамилии, имена, отчества, полные названия мест работы, почтовый адрес с индексом, номер контактного телефона с кодом города, электронный адрес автора, ответственного за переписку с редакцией); предпочтительно, чтобы это письмо было выполнено на бланке учреждения, в котором работает кто-то из авторов, было заверено печатью и содержало утверждение о возможности открытого опубликования статьи;
 - файл с переводом на английский язык названия статьи, фамилий и инициалов авторов, аннотации, ключевых слов.
- Авторские файлы могут быть присланы на электронный адрес: papers@nano-journal.ru; (резервный адрес в случаях затруднений с пересылкой: nano@miem.edu.ru) или переданы в редакцию на любом электронном носителе. Авторы получают из редакции подтверждение о получении их материалов.
- Телефон (факс) редакции: +7 (495) 916-8876. Адрес редакции: Москва 109028, Б. Трехсвятительский пер., 3/12, Московский институт электроники и математики (МИЭМ), комн. 449.

Общие требования к представляемым файлам

- Допускается использование текстовых редакторов WORD и LATEX. К рабочим файлам должна быть приложена их pdf-копия. В названии файлов используется латинский алфавит, пробелы заменяются знаком `_`. Шапка статьи содержит название, инициалы и фамилии авторов, место работы, электронный адрес, краткую аннотацию, ключевые слова. В аннотации не следует использовать формулы и ссылки на текст работы или список литературы; в конце она должна содержать индекс УДК (к английской версии аннотации можно добавить индексы зарубежных рубрикаторов).
- Объем кратких сообщений 4-8 страниц, исследовательских статей, как правило, до 20 страниц, а обзоров – более 20 страниц. Верхняя граница согласуется с редколлегией. При подсчете объема нужно ориентироваться на страницы формата А4, шрифт 12, знаков в строке 80, интервалов между строками 1.
- Авторы не должны злоупотреблять сокращениями, составленными из заглавных начальных букв терминов. Предпочтительней каждый раз использовать полное наименование объекта. Возможно использование только устоявшихся аббревиатур.

Требования к файлам Word

- Рекомендуемый шрифт – Times New Roman.
- Строки в пределах абзаца не должны разделяться символом возврата каретки (Enter).
- Нельзя использовать автоматическое создание сносок, автоматический перенос или автоматический запрет переносов, создание списков, автоматический отступ и т.п.
- Ссылки на список литературы даются цифрами в квадратных скобках: [1], [5,6,7], [1-9].
- Все без исключения формулы и обозначения размерности, даже состоящие из одной латинской буквы, и в тексте и вынесенные в отдельную строку, всегда набираются в формульном редакторе и никогда – в обычном текстовом редакторе.

- При создании таблицы рекомендуется использовать возможности Word или MS Excel. Таблицы, набранные вручную (с помощью большого числа пробелов), не принимаются.

Требования к иллюстрациям

- Иллюстрации представляются в отдельных файлах, черно-белыми. Они должны иметь разрешение не менее 600 dpi.
- Форматы файлов – TIFF, EPS, PSD, JPEG.

Требования к списку литературы

- Ф.И.О. авторов или редакторов выделяются курсивом.
- Для статей приводится название. Названия отделяются от выходных данных знаком //. Расположение выходных данных указано на образце ниже. Номер тома выделяется жирным шрифтом, номер выпуска дается в скобках. Указываются номера первой и последней страниц статьи, либо уникальный номер статьи и ее объем. Для книг желательно указывать их объем. Если известна ссылка на электронный архив или сайт, то ее желательно указать.

Фамилия И.О. Название статьи // Назв. журн., 2000, **1** (1), 1-6.

Family F.M. and Family F. Title of the paper // Name of the Journal, 2006, **73**, 165313, 9 pp.

Фамилия И.О., Фамилия И.О. Название книги // Наука, С.-П., 1999, 176 стр.

Family F.M. Title of the paper // In book: Family F.M. (et al. eds), Title of the collection, Publisher, Boston, 2005, 9-24.

Family F.M. (ed.), Title of the collection // Publisher, N.Y., 2005, 324 pp.

Фамилия И.О. Название доклада // Доклад на конференции «Название конференции (место и дата проведения)»; ссылка на электронный ресурс.

Наноструктуры. Математическая физика и моделирование

Журнал зарегистрирован

в Министерстве РФ по делам печати,
телерадиовещания и средств массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации

ПИ № ФС77-34934 от 29 декабря 2008 г.

Учредители

Московский институт электроники и математики (МИЭМ),

Европейский центр по качеству

Издатель

ООО Сенсор Микрон

Журнал входит в перечень ВАК РФ

Статьи рецензируются

Журнал индексируется в РИНЦ

Контакты для представления статей и деловой переписки

Ответственный секретарь Махиборода А.В.

+7 (916) 578-95-27

makhboroda@yandex.ru

ПОДПИСКА НА ЖУРНАЛ НМФМ

Подписной индекс журнала в каталоге агентства «Урал-Пресс» 70017.
Электронный подписной каталог и контакты всех представительств «Урал-Пресс»
на сайте www.ural-press.ru.