**Замулко Сергій Олександрович. Формування силіцидних фаз при реакційній дифузії в системах "плівкові шари (5-30 нм) Ni Ti, - монокристалічний кремній" : дис... канд. техн. наук: 05.16.01 / Національний технічний ун-т України "Київський політехнічний ін- т". - К., 2006**

|  |  |
| --- | --- |
| |  | | --- | | ЗАМУЛКО С.О. ФОРМУВАННЯ СИЛІЦИДНИХ ФАЗ ПРИ РЕАКЦІЙНІЙ ДИФУЗІЇ В СИСТЕМАХ «ПЛІВКОВІ ШАРИ (5 - 30 нм) Ti, Ni - МОНОКРИСТАЛІЧНИЙ КРЕМНІЙ» – Рукопис.  Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 05.16.01 – металознавство та термічна обробка металів. – Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут", Київ, 2005.  Дисертація присвячена експериментальному дослідженню та теоретичному моделюванню процесів термостимульованої реакційної дифузії в системах «плівкові шари Ni (Ti, Ni-Ti) нанометрових товщин (5 – 30 нм) – монокристал Si(001)».  Запропоновано багатостадійну модель структурних та фазових перетворень в процесах реакційної дифузії в системах Ni-Si, Ti-Si при термічній обробці в інтервалі температур 773К-1273К.  Виявлено ефект „дифузійної перебудови” системи Ni-Ti-Si в систему Ti-Ni-Si при температурі відпалу 723 К на основі порівняльного аналізу концентраційних розподілень компонентів. Встановлено, що особливу роль в дифузійному масопереносі компонентів при термічній обробці досліджених систем, відіграє зовнішня поверхня: процеси, що розвиваються на зовнішній поверхні, термодинамічно обумовлюють масоперенос компонентів в об’ємі тонкоплівкової системи; зовнішня поверхня є стоковою для атомів титану, коли титан є проміжним шаром; коли на поверхні утворюється оксид титану, зовнішня поверхня відіграє роль дифузійного бар’єру для атомів речовини глибинних шарів.  В рамках задач масопереносу у новій постановці запропоновані моделі дифузійного росту нових фаз: модель дифузії з реакцією в системі ”підкладинка – шар скінченої товщини”; модель масопереносу у плоскошаровій системі «тверда фаза - рідка фаза - тверда фаза»; модель дифузійного росту включень нової фази різної геометричної форми в об’ємному середовищі, що є вичерпним джерелом дифузанту.  Показано можливість практичного використання отриманих числовими методами розв’язків для моделювання та прогнозування дифузійного росту нових фаз. Шляхом порівняння теоретичних та одержаних експериментальних даних розраховані параметри дифузії. | |
| |  | | --- | | Із застосуванням методів мас-спектрометрії вторинних іонів, електронної оже-спектроскопії, рентгенофазового аналізу, просвічуючої електронної мікроскопії поперечних зрізів, растрової електронної мікроскопії, резистометрії досліджено вплив термічної обробки на процеси реакційної дифузії в системах «плівкові шари Ni (Ti, Ni-Ti) нанометрових товщин (5 – 30 нм) – монокристал Si(001)» в інтервалі температур 723 - 1273К; проведене теоретичне моделювання процесів реакційної дифузії на основі математичних моделей ряду дифузійних задач в новій постановці.  Основні наукові і практичні результати, отримані в роботі, полягають у наступному:  1. Запропоновано і для досліджених систем експериментально підтверджено багатостадійну модель структурних та фазових перетворень в процесах реакційної дифузії в системах „плівкові шари Ni (Ti) нанометрових товщин (5 – 30 нм) – монокристал Si(001)” при термічній обробці в інтервалі температур 773К-1273К, яка включає в себе такі стадії:  утворення проміжних силіцидних фаз в області границі розділу металевої плівки та Si(001);  дифузія атомів металу з проміжних силіцидних фаз в монокристал Si(001) за об’ємним механізмом;  зародження на границі розділу „проміжний силіцид-Si(001)” включень кінцевої стабільної фази МеSi2 (де Me - Ni, Ti) різної геометричної форми;  ріст включень МеSi2 за рахунокдифузійного розчинення проміжної силіцидної фази;  взаємна дифузія атомів Ме та Si з формуванням включень МеSi2 в об’ємі монокристалу Si(001);  просторова самоорганізація включень МеSi2 в реакційній зоні;  геометрична форма, розмір, щільність та взаємне розташування включень силіцидних фаз визначається режимом термічної обробки; за характером морфологічних змін в реакційній зоні процес є подібним до розпаду пересичених твердих розчинів.  Показано, що закономірності дифузійних процесів у плоскошарових вакуумних конденсатах металів, які представлені багатостадійною моделлю, є загальними для досліджуваних систем, але для кожної конкретної системи можуть спостерігатися деякі особливості, що зумовлені термодинамічними та кристалохімічними властивостями взаємодіючих компонентів.  2. Процеси термостимульованої реакційної дифузії в складній системі Ti(5нм)-Ni(24нм)-Si(001) в інтервалі температур 723 К - 1273 К також мають багатостадійний характер; послідовно відбуваються такі стадії:  дифузія атомів нікелю в монокристал кремнію за об’ємним механізмом з формуванням проміжних силіцидних фаз Ni2Si та NiSi; формування інтерметаліда Ni3Ti в області границі розділу шарів Ni та Ti;  вирівнювання концентрації нікелю за товщиною силіцидного шару з формуванням силіциду NiSi, накопичення атомів титану в області границі розділу з силіцидним шаром;  збільшення товщини силіцидного шару за рахунок дифузії атомів Ni в монокристал Si(001) та зародження фази NiSi2 в області границі розділу з Si(001); дифузія атомів титану в NiSi з формуванням потрійного силіциду Ni4Ti4Si7 між поверхневим шаром титану і шаром силіцидних фаз;  дифузійне розчинення фази NiSi та росту фази NiSi2; взаємної дифузії атомів титану та кремнію з формуванням фази TiSi2;  подальше зростання фаз TiSi2, NiSi2 та дифузійне розчинення фази Ni4Ti4Si7.  3. Експериментально виявлено ефект „дифузійної перебудови” системи Ni(24 нм)-Ti(5 нм)-Si(001) в систему Ti(5 нм)-Ni(24 нм)-Si(001) при температурі відпалу 723 К, зумовлений процесом масопереносу речовини з шару Ti до зовнішньої поверхні; концентраційні розподіли компонентів за товщиною в системах Ni(24 нм)-Ti(5 нм)-Si(001) та Ti(5 нм)-Ni(24 нм)-Si(001) при T723 К практично співпадають; термічна стабільність шару NiSi характеризується температурою 973К.  4. Встановлено, що особливу роль в дифузійному масопереносі компонентів при термічній обробці систем «плівкові шари Ni-Ti нанометрових товщин (5 – 30 нм) – монокристал Si(001)» відіграє зовнішня поверхня: процеси, що розвиваються на зовнішній поверхні, термодинамічно обумовлюють масоперенос компонентів в об’ємі тонкоплівкової системи; зовнішня поверхня є стоковою для атомів титану, коли титан є проміжним шаром; коли на поверхні утворюється оксид титану, зовнішня поверхня відіграє роль дифузійного бар’єру для атомів речовини глибинних шарів.  5. На основі встановлених в роботі закономірностей структурних та фазових перетворень в системах «плівкові шари Ni (Ti, Ni-Ti) нанометрових товщин (5 – 30 нм) – монокристал Si(001)», запропоновано ряд задач масопереносу у новій постановці та моделі дифузійного росту нових фаз: модель дифузії з реакцією в системі ”підкладинка – шар скінченої товщини”; модель масопереносу у плоскошаровій системі «тверда фаза - рідка фаза - тверда фаза»; модель дифузійного росту ансамблю частинок нової фази різної геометричної форми в об’ємному середовищі, що є вичерпним джерелом дифузанту.  6. Показано можливість практичного використання отриманих числовими методами розв’язків для моделювання та прогнозування дифузійного росту частинок нових фаз: визначення розміру частинок на етапах термічної обробки пересичених твердих розчинів, часу відпалу матеріалів при даній температурі для досягнення певного розміру частинок, зокрема, - максимального, прогнозування швидкості росту включень та концентрації дифузанту в області границі розділу фаз на різних стадіях відпалу. | |