

# ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИОНОВ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ НИЗКОЙ ЭНЕРГИИ С МЕТИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ НА ПОВЕРХНОСТИ LOW-K ДИЭЛЕКТРИКОВ

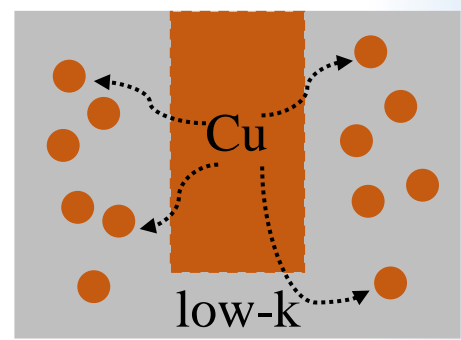
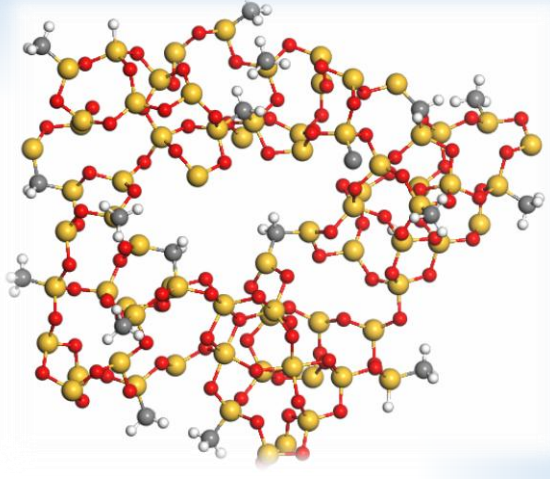


Сычева А.А.\*, Соловых А.А.†, Воронина Е.Н. \*,†

\*НИИ ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия  
†Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет, Москва, Россия



В настоящее время для изоляции медных проводящих элементов современных интегральных схем активно применяются нанопористые low-k диэлектрики на основе аморфных SiO<sub>x</sub> матриц, поверхность которых покрыта СН<sub>3</sub>-группами. Одним из способов предотвращения диффузии атомов меди вглубь диэлектрика является нанесение ультратонких барьерных слоев из тугоплавких металлов на поверхность low-k пленки, с которой предварительно удалены СН<sub>3</sub>-группы.

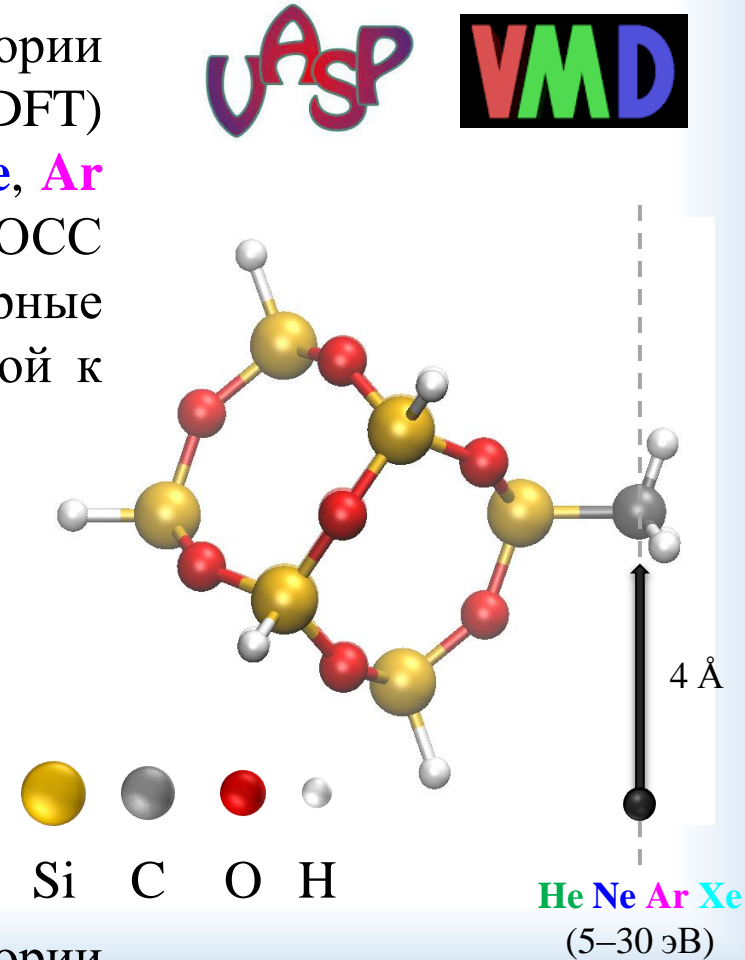


Использование плазмы для удаления метильных групп приводит к повреждению структуры low-k пленок в результате воздействия химически активных радикалов и вакуумного ультрафиолетового излучения.

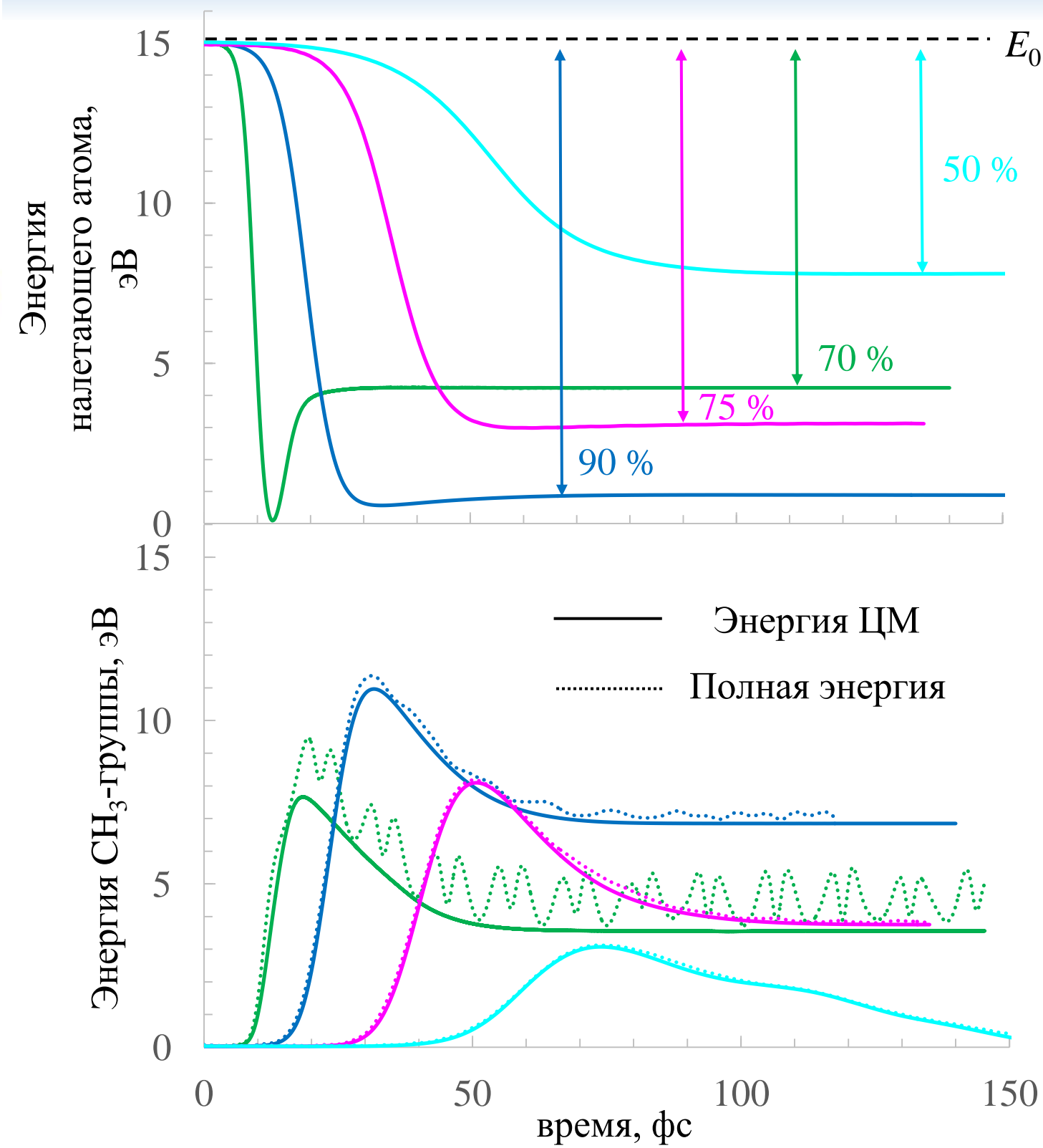
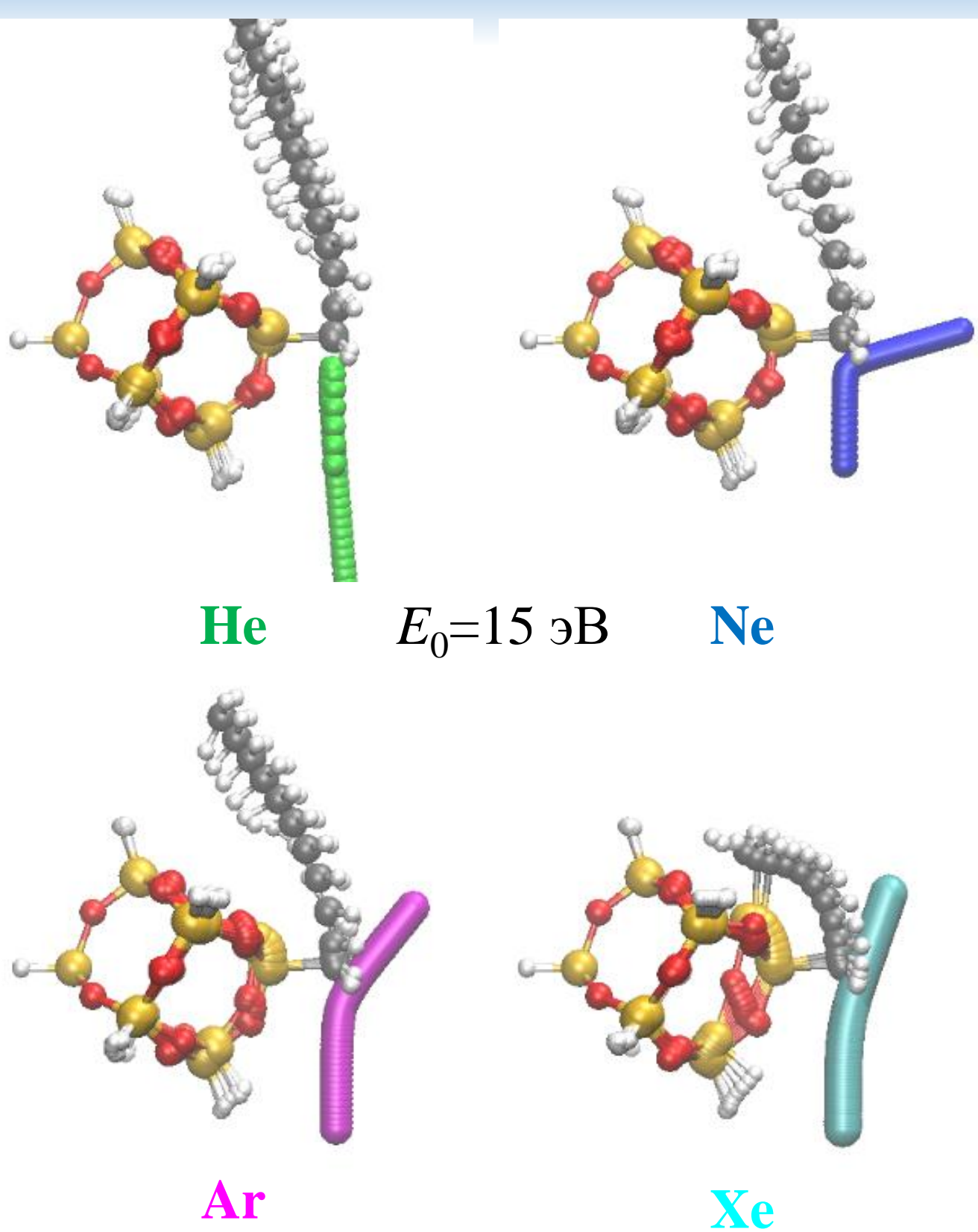
## Методика моделирования

Выполнено моделирование квантово-механическим методом теории функционала плотности (DFT) воздействия атомов и ионов He, Ne, Ar и Xe ( $E_0=5-30$  эВ) на молекулу ПОСС (полиэдральные олигомерные силсесквиоксаны) с присоединенной к ней СН<sub>3</sub>-группой;

- Динамические DFT-расчеты с использованием алгоритмов молекулярной динамики;
- Базис плоских волн с псевдопотенциалами PAW;
- Временной шаг  $st=0.01-0.1$  фс;
- Длительность одной траектории 0.5–1.0 пс;



## УДАЛЕНИЕ МЕТИЛЬНЫХ ГРУПП С ПОВЕРХНОСТИ МАТЕРИАЛА НЕЙТРАЛЬНЫМИ АТОМАМИ



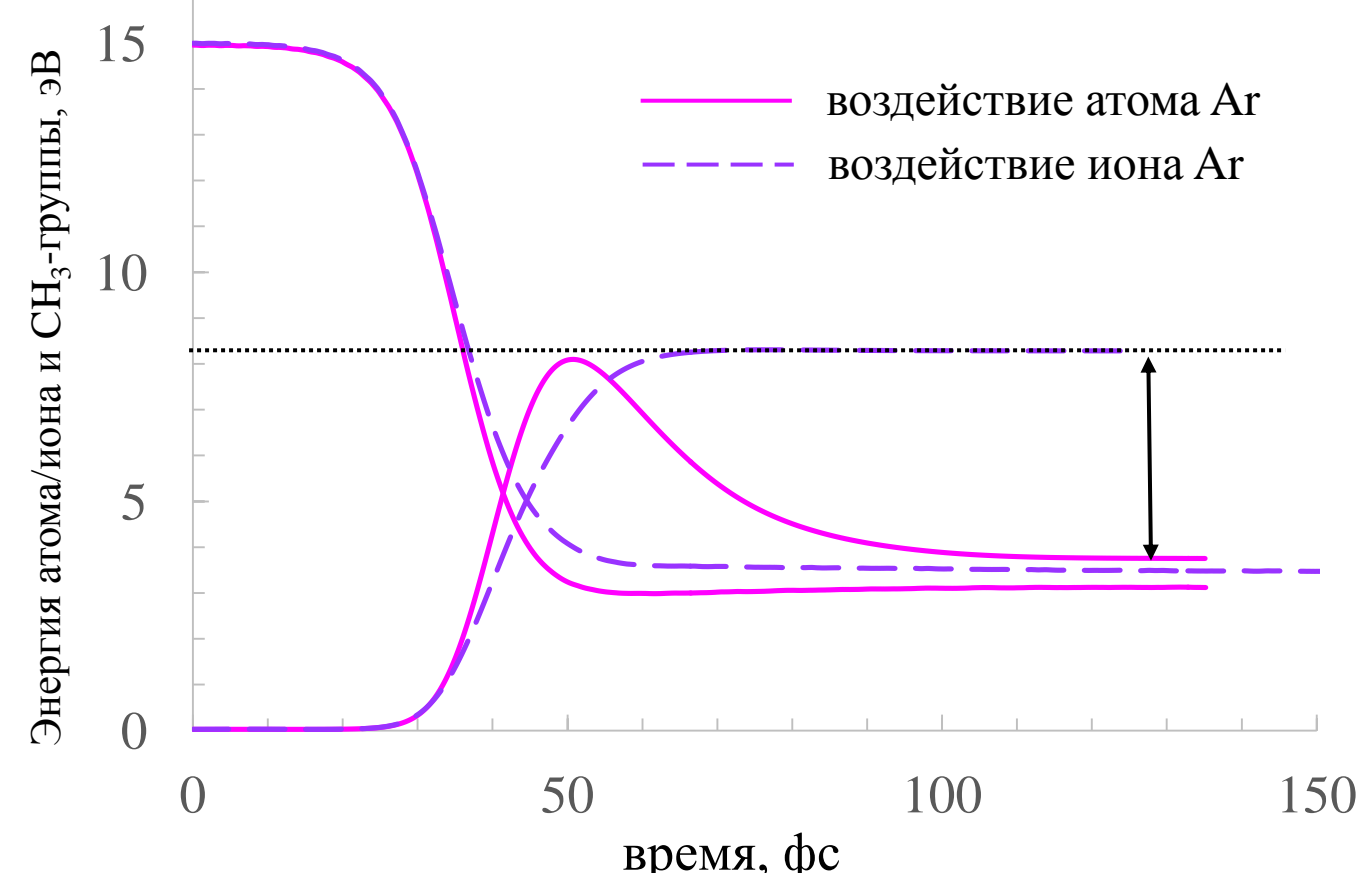
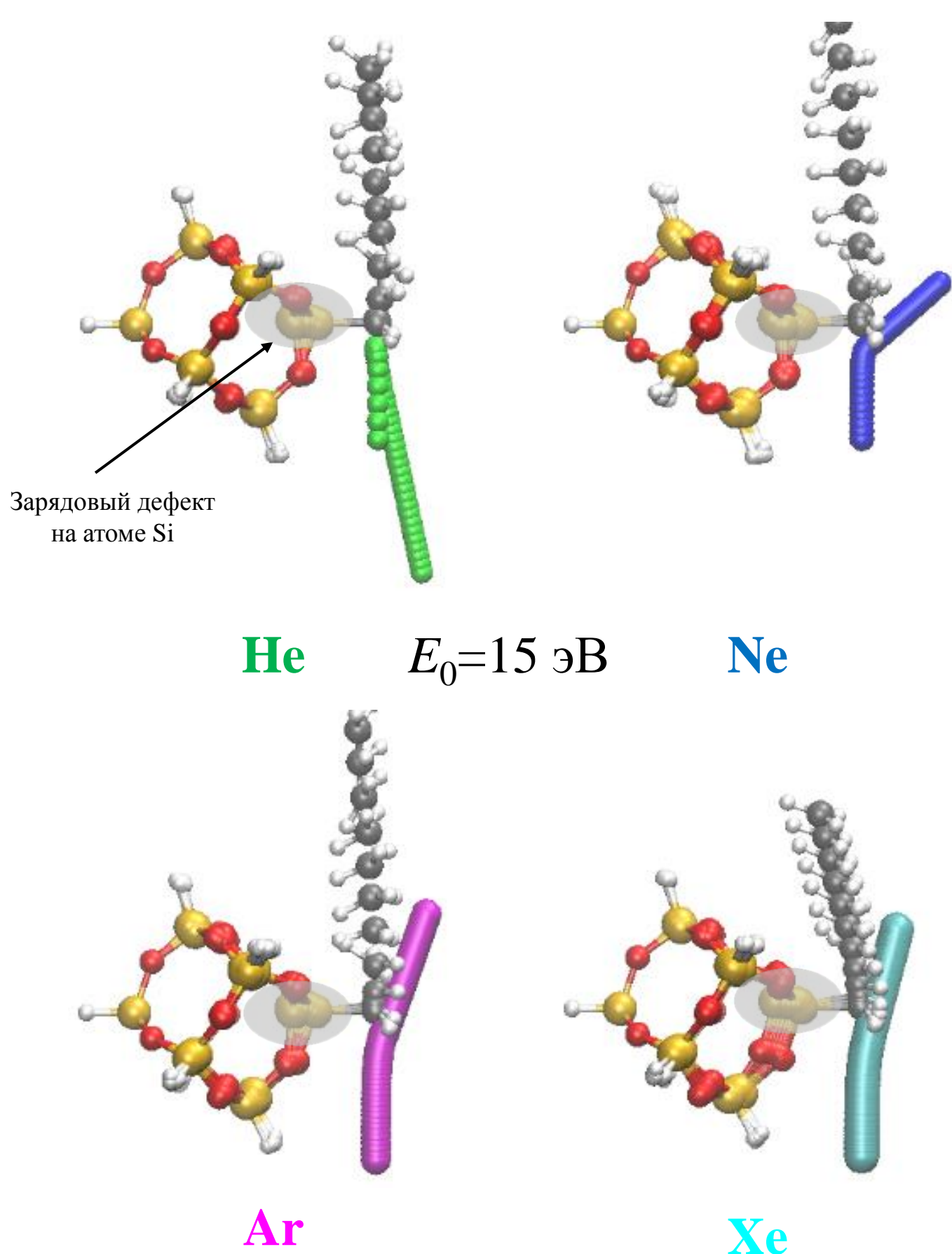
В случае воздействия атомов Ne, Ar и Xe процесс взаимодействия налетающей частицы с молекулой ПОСС носит преимущественно **столкновительный** характер. С увеличением массы и размеров налетающей частицы:

- уменьшается величина угла ее отклонения  $\theta$  от первоначальной траектории;
- возрастает количество атомов молекулы ПОСС, вовлеченных во взаимодействие;
- возрастает время ее взаимодействия с атомами материала и уменьшается доля передаваемой при этом энергии  $E_{dep}/E_0$ ;
- **возрастает пороговое значение исходной энергии налетающего атома, при котором происходит вылет СН<sub>3</sub>-группы  $E_{th}$ .**

	He	Ne	Ar	Xe
$E_{th}$ , эВ	11	7	11	25
$\theta$ , °	180	50	35	15
$E_{dep}/E_0$ , %	70	90	75	50

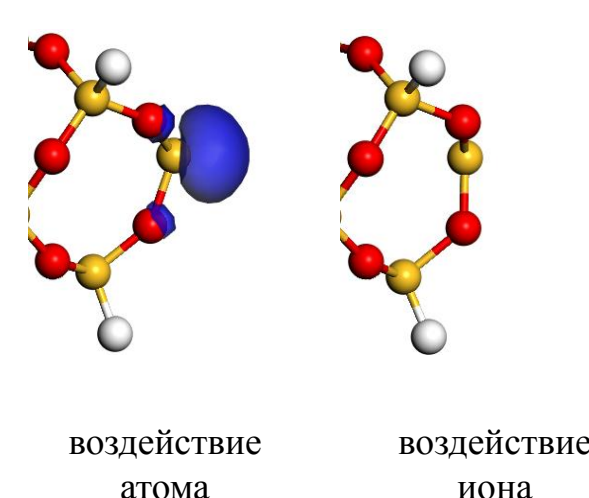
Воздействие легкого атома He приводит не только к разрыву Si–C связи и поступательному движению СН<sub>3</sub>-радикала, но и к возбуждению колебаний атомов H вдоль C–H связи в метильной группе.

## ОСОБЕННОСТИ ВОЗДЕЙСТВИЯ ИОНОВ НА ПОВЕРХНОСТЬ МАТЕРИАЛА



- Воздействие иона на метильную группу приводит к его нейтрализации и возникновению в молекуле ПОСС дефекта с локализованным на нем избыточным положительным зарядом.
- В результате взаимодействия с ионом происходит заметное изменение геометрии молекулы ПОСС: атом Si смещается по направлению к центру молекулы, что приводит к уменьшению длин связей Si–O и валентных углов O–Si–O.
- Энергия, переданная ионом СН<sub>3</sub>-группе, не уменьшается после вылета, т.е. она не испытывает притяжения со стороны молекулы.

Наличие положительного заряда у налетающей частицы приводит к существенному занижению пороговой энергии  $E_{th}$ : отрыв метильной группы наблюдается даже при энергии 5 эВ.



Распределение спиновой плотности на молекуле ПОСС после вылета СН<sub>3</sub>-радикала