

ПРИБОРЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЙ

Подходы к определению кривизны пластин
по рельефу их поверхности

А.А. Дедкова, И.В. Флоринский, Н.А. Дюжев

Рассмотрены особенности анализа кривизны пластин с учётом неоднородности их рельефа для количественной оценки и локализации неровностей или для последующих расчётов механических напряжений. Проанализированы три подхода к расчёту кривизны поверхности по цифровой модели рельефа. Первый подход основан на анализе профилей поверхности пластины с использованием полиномиальной аппроксимации, расчёте радиуса кривизны по кривизне кривой; механические напряжения определяются по методу Стоуни. Второй — на использовании для анализа вторых частных производных функции высоты в декартовой или цилиндрической системе координат. Третий — на рассмотрении рельефа пластины целиком как двумерной матрицы высот и использовании математического аппарата дифференциальной геометрии и опыта геоморфометрии. Показана реализация данных подходов при исследовании пластины, подобной сегменту сферы, и пластины сложной формы.

Ключевые слова: поверхность, рельеф, кривизна, радиус кривизны, прогиб, механические напряжения, деформация, формула Стоуни, кремниевая пластина, оптическая профилометрия, дефектность, геоморфометрия, цифровая модель рельефа, ЦМР

PACS number: 68.35.Gy

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.10.039076>

Содержание

1. Введение (754).
 2. Определение механических напряжений на основе радиуса кривизны поверхности (755).
 3. Оборудование и образцы (755).
 4. Определение кривизны по формуле для плоских кривых с использованием полиномиальной аппроксимации (758).
 5. Определение кривизны через расчёт вторых частных производных, в том числе в цилиндрических координатах (760).
 6. Определение кривизны поверхности через расчёт главных кривизн. Геоморфометрия (762).
 7. Заключение (769).
- Список литературы (769).

1. Введение

Анализ рельефа поверхности различных объектов является распространённой задачей. Могут исследоваться

объекты различного размера и происхождения: небольшие фрагменты структур, например, тонкие мембраны с характерными размерами в десятки микрометров [1], соизмеримые с размерами человеческого тела объекты типа кремниевых пластин диаметром до 450 мм [2], а также элементы географической оболочки: рельеф земной поверхности в широком диапазоне масштабов — от рельефа отдельного поля до регионального, континентального и глобального рельефа суши и дна океана [3].

Данная статья посвящена описанию подходов к расчёту кривизны поверхности по цифровой модели рельефа (ЦМР) на примере структур на базе кремниевых пластин. Однако рассматриваемые подходы применимы для любого типа объектов с учётом их специфики.

При контроле пластин часто основной целью является определение прогиба или радиуса кривизны поверхности. Прогибом называют перепад высот между наивысшей и наименьшей областями поверхности. Под кривизной и радиусом кривизны поверхности подразумеваются обратные друг другу величины, характеризующие пластину, форма которой подобна сегменту сферы соответствующего радиуса. Полученные сведения часто используются для количественной оценки уровня неровности поверхности и для расчёта механических напряжений.

Для определения радиуса кривизны сферической поверхности применяются сферометры, автоколлимационные микроскопы и др. [4, 5]. Анализ поверхности более сложной формы проводится с помощью различных методов, часто оптических. Данные могут быть получены

А.А. Дедкова^(1,а), И.В. Флоринский^(2,б), Н.А. Дюжев⁽¹⁾

⁽¹⁾ Национальный исследовательский университет "Московский институт электронной техники", пл. Шокина 1, 124498 Зеленоград, Москва, Российская Федерация

⁽²⁾ Институт математических проблем биологии РАН — филиал Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, ул. проф. Виткевича 1, 142290 Пущино, Московская обл., Российская Федерация

E-mail: ^(а) dedkova@ckp-miet.ru, ^(б) iflor@mail.ru

Статья поступила 29 марта 2021 г., после доработки 5 августа 2021 г.

посредством оптической профилометрии (интерферометрии) [6–10] с использованием сканирования пластины лазерным лучом [11, 12], методом Макио-топографии [13, 14], технологией "coherent gradient sensor" (CGS) [15–21] или другим способом.

Современное аналитическое оборудование позволяет строить не только карту 3D-рельефа поверхности, но и карты кривизны поверхности, в том числе в определённых направлениях [15–20]. Однако такие приборы не распространены на производстве и часто отличаются высокой стоимостью. Поскольку покупку нового дорогостоящего оборудования в дополнение к уже имеющемуся подобного типа может позволить себе не каждая организация, интерес представляет определение кривизны по рельефу поверхности, полученному на имеющемся оборудовании.

Цели настоящей работы следующие: 1) изучение основных подходов к анализу рельефа поверхности и расчёту радиуса кривизны и кривизн (см. далее табл. 1); 2) рассмотрение и адаптация соответствующих методик реализации этих подходов для исследования поверхности пластин диаметром до 200 мм; 3) анализ и оценка на типичных исследуемых объектах указанных основных подходов к определению кривизны поверхности, позволяющих сравнивать образцы друг с другом, строить и анализировать карты распределения кривизны по ЦМР пластин, а также использовать полученную информацию для определения механических напряжений.

2. Определение механических напряжений на основе радиуса кривизны поверхности

Поскольку во многих случаях определение кривизны поверхности пластин осуществляется с целью оценки механических напряжений, приведём краткое описание таких методик. Это позволит осознать важность глубокого анализа кривизны поверхности пластин.

Благодаря относительной простоте реализации широко применяются методики на основе формулы Стоуни [22]. Рассматривается структура, состоящая из тонкой плёнки (или набора тонких плёнок) на подложке. Базовая методика позволяет рассчитать величину и знак механических напряжений в плёнке и в подложке [23]. Для расчёта используются данные о кривизне поверхности круглой пластины с плёнкой. Стоит отметить, что часто при измерениях ограничиваются профилем поверхности (линией, пересекающей центр исследуемого образца [24, 25]), не проводя анализа полной карты рельефа по всей площади образца. Расчёт механических напряжений в плёнке σ производится по следующей формуле:

$$\sigma = \frac{E_s d_s^2}{6(1-\nu) d_f R}, \quad (1)$$

где d_f — толщина плёнки, d_s — толщина подложки, ν — коэффициент Пуассона подложки, E_s — модуль Юнга подложки, R — эффективный радиус кривизны подложки. $R = (R_1 R_2)/(R_1 - R_2)$, где R_1 и R_2 — соответственно радиусы кривизны подложки до и после нанесения на неё плёнки. В большинстве практических случаев $R_1 \gg R_2$ и $R = R_2$.

Поскольку, как правило, величина прогиба h существенно меньше, чем радиус основания круглой пластины r , путём элементарных преобразований можно получить, что $R \approx r^2/(2h)$. Для расчёта механических

напряжений можно использовать выражение [26, 27]

$$\sigma = \frac{h E_s d_s^2}{3(1-\nu) d_f r^2}. \quad (2)$$

Методику расчёта механических напряжений на основе формулы Стоуни активно критикуют [15, 28–32] в связи с существенными допущениями о соотношении размеров плёнки и подложки, отсутствием учёта неоднородности рельефа, анизотропии [12] и др. Однако благодаря простоте и наглядности использования она всё ещё применяется повсеместно [31, 33–40]. Также существует ряд исследований, посвящённых оптимизации этой методики или применению альтернативных подходов для расчёта механических напряжений на основе данных о рельефе поверхности [15, 31, 41–49]. Подавляющее большинство из них так или иначе используют для расчёта значения кривизны, радиуса кривизны поверхности, прогиба [15, 30, 41–54]. Таким образом, первичной становится задача определения кривизны поверхности по данным о её рельефе.

Выражения (1) и (2) позволяют рассчитать величину механических напряжений. В основном результатом оценки является численное значение средних механических напряжений в слое на пластине. Однако для корректного сравнения между собой различных структур необходима унифицированная методика определения радиуса кривизны по профилю поверхности. В случае использования средств программного обеспечения измерительного оборудования оператор вручную выбирает область профиля для определения прогиба и расчёта радиуса кривизны. Но такой подход сложно назвать оптимальным, поскольку при проведении измерений различных образцов разными операторами выбранные ими области профиля могут отличаться, как и полученные в итоге значения радиуса кривизны.

При этом во многих случаях форма поверхности пластины не соответствует идеальному представлению её как сегмента сферы (рис. 1). Также при анализе профиля поверхности не учитываются особенности рельефа, не попавшие в область измерений. Это показывает важность использования для анализа всей площади пластины, а для расчёта механических напряжений — выражений, учитывающих неоднородность рельефа. При таком подходе можно судить о распределении механических напряжений по пластине.

Данную информацию можно использовать для локализации областей с требуемыми значениями механических напряжений и областей, на которых значения механических напряжений выходят из технологического допуска. Это позволяет провести соответствие между характеристиками операций технологического маршрута и финальным распределением по пластине годных кристаллов [55], что в итоге даёт возможность корректировать технологические маршруты изготовления кристаллов с целью получения максимального выхода годных.

3. Оборудование и образцы

Реализация подходов показана на примере обработки экспериментальных данных, полученных с помощью оптического профилометра Veeco Wyko NT 9300, реализующего метод вертикальной сканирующей интерферометрии [56–59] для построения ЦМР поверхности.

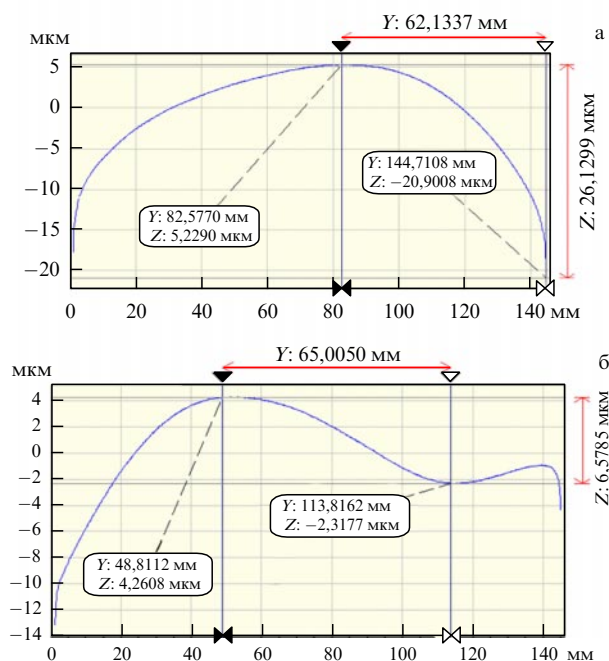


Рис. 1. Примеры различного вида экспериментальных профилей поверхности структуры SiO₂/Si, толщины плёнок SiO₂: 1000 нм (а) и 233 нм (б).

Принцип действия прибора основан на интерференции световых пучков, отражённых от опорного зеркала и поверхности измеряемого объекта, регистрации интерференционной картины с помощью ПЗС-камеры и последующего анализа интерференционной картины для получения количественных данных о рельефе поверхности. Используется белый свет и определяется положение полосы максимального контраста при перемещении измерительной головки по оси Z. Это оборудование позволяет получать ЦМР областей структур размером от 47 × 63 мкм до 3,4 × 4,6 мм, с шагом сетки (разрешением) ЦМР от 98 нм до 57 мкм. С использованием методики "stitching" (сшивание), заключающейся в объединении серии отдельных кадров данных, формируются ЦМР объектов большей площади (подвижный столик прибора ограничивает длину области сканирования до 200 мм). Для получения ЦМР пластин диаметром 100–200 мм измерения проводятся в узлах заданной сетки по описанной в [56] методике.

Для измерений объектов большого размера применяются системы с автоматизированным предметным столиком, осуществляющим сдвиг поля зрения, с последующим сшиванием кадров изображений [60–62]. При этом даже при использовании оптического микроскопа можно определять перепад высот структур (по положению фокуса [63, 64]). Таким образом, даже в случае исходного отсутствия модуля сшивания возможна доработка имеющегося в распоряжении оборудования и получение полной карты рельефа поверхности.

Исследования проводились на структурах оксид кремния (SiO₂) на кремнии (Si), сформированных на установках Novellus (США) путём стимулированного плазмой PECVD-осаждения и SVCS (Чехия) путём CVD-осаждения.

Осаждение из газовой фазы можно определить как конденсацию на подложках газообразных (парообраз-

ных) элементов или соединений с образованием твёрдых осадков. При химическом осаждении из газовой фазы (ХОГФ, или CVD — Chemical Vapor Deposition) состав газовой фазы и состав осадка существенно различаются. Летучее соединение осаждаемого элемента подаётся к подложке, где подвергается термическому разложению (пиролизу) или вступает в восстановительные химические реакции с другими газами (или парами); при этом нелетучие продукты реакций осаждаются на поверхность подложки.

Осадки образуются в результате большого количества химических реакций, протекающих в газовой фазе вблизи от поверхности подложки и на самой поверхности подложки, что в значительной мере усложняет процесс осаждения, но делает его гораздо более универсальным и гибким. Процессы ХОГФ иногда называют реактивным осаждением из газовой (парогазовой или паровой) фазы (reactive deposition).

ХОГФ — универсальный и энергетически экономичный метод атомно-молекулярного формирования покрытий путём контролируемого осаждения вещества в виде отдельных атомов или молекул с целью получения плёнок с требуемыми свойствами (заданной плотности, толщины, ориентации, состава и т.д.). При ХОГФ материал осаждается в виде порошка, если химическая реакция образования его частиц в твёрдом состоянии протекает только в газовой фазе, или в виде плёночного покрытия, если реакция образования твёрдых частиц материала происходит на поверхности подложки. Очевидно, что для получения функциональных слоёв интегральных микросхем (ИМС) пригодна только вторая группа процессов ХОГФ [65].

Процессы ХОГФ осуществляются на оборудовании, имеющем рабочую камеру (реактор). По рабочему давлению в реакторе процессы ХОГФ делятся на четыре большие группы:

- процессы при атмосферном давлении (Atmospheric Pressure — AP CVD: 760 Torr = 101,3 кПа);
- при субатмосферном давлении (SubAtmospheric Pressure — SAP CVD: 20–700 Torr = 2,67–93,3 кПа);
- при низком давлении (Low Pressure — LP CVD: 10⁻²–10 Torr = 1,33–1333 Па);
- при сверхнизком давлении (Ultra High Vacuum — UHV CVD: 10⁻³–10⁻⁶ Torr = 1,33 × (10⁻¹–10⁻⁴) Па).

Каждая из этих групп в свою очередь подразделяется на более мелкие подгруппы по способу активации, методу подачи реагентов, виду группы материалов, к которой относится осаждаемый слой, и по химическому составу газовой фазы. Подробная классификация отдельных групп процессов ХОГФ, используемых в производстве ИМС, по различным признакам приведена в [65].

Для получения плёнок SiO₂ в технологиях производства интегральных микросхем и микроэлектронных приборов на основе микроэлектромеханических систем (MEMS — MicroElectroMechanical Systems), называемых МЭМС-приборами, наиболее широкое применение получили три группы процессов ХОГФ [65]:

1. Термическое окисление в сухом или влажном кислороде, осуществляемое при атмосферном давлении в диапазоне температур 900–1100 °С в цилиндрических кварцевых реакторах, согласно реакции:



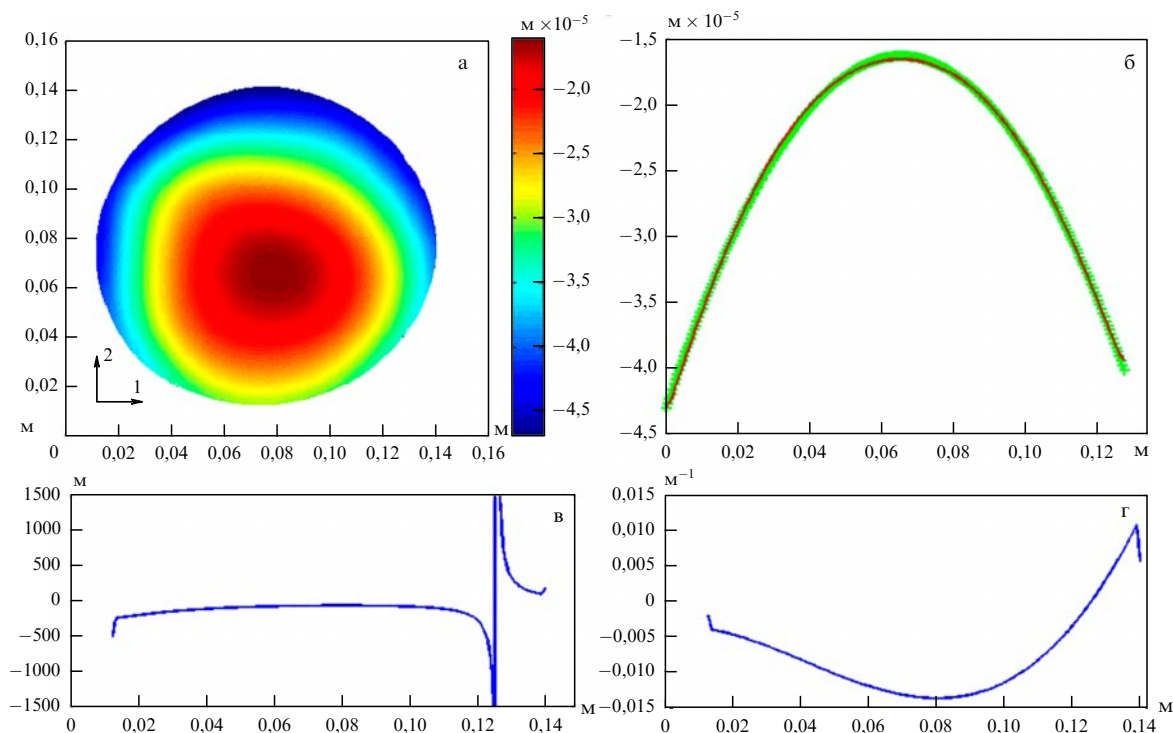
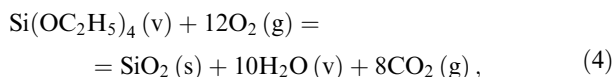


Рис. 2. (В цвете онлайн.) Структура SiO_2/Si (близкая к сферической форма пластины): (а) рельеф поверхности пластины, (б) профиль поверхности (красная сплошная линия) и соответствующая полиномиальная аппроксимация (зелёные знаки +), (в) распределение значений радиуса кривизны для профиля с рис. 2б, (г) распределение значений кривизны для профиля с рис. 2б.

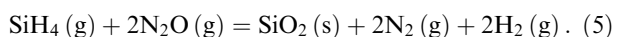
В этом случае в качестве второго реагента в процессе ХОГФ выступает материал подложки (кремний).

2. Термостимулированное осаждение из тетраэтоксисилана и кислорода (ТЭОС/кислород) ($\text{Si}(\text{OC}_2\text{H}_5)_4/\text{O}_2$) (TEOS — TetraEthOxySilane), осуществляемое при пониженных давлениях (10^{-2} –10 Торр) в диапазоне температур 650–750 °С в цилиндрических кварцевых реакторах, откачиваемых вакуумными насосами, согласно реакции:



где индексы (v), (s) и (g) соответственно означают пар (vapor), твёрдое вещество — плёнку (solid) и газ (gas).

3. Стимулированное плазмой (PE — Plasma Enhanced) осаждение из газовой смеси силана (SiH_4) и закиси азота (N_2O) с использованием азота (N_2) как газ-носителя, осуществляемое при пониженных давлениях (10^{-2} –10 Торр), включённых высокочастотных (ВЧ) генераторов плазмы мощностью 1,0–2,0 кВт в диапазоне температур 200–400 °С в планарных металлических реакторах с керамическим покрытием, откачиваемых вакуумными насосами, согласно реакции:



Примеры различных профилей поверхности представлены на рис. 1. Показаны профили поверхности пластин со структурой SiO_2/Si , сформированной PECVD-осаждением (согласно процессу (5)) SiO_2 при температуре 350 °С на пластину Si (КДБ-12 (100)) толщиной 670 мкм, где толщины плёнок SiO_2 составили 1000 нм (рис. 1а) и 233 нм (рис. 1б). Можно видеть, что профиль поверхности на рис. 1а гораздо ближе к сегменту сферы, чем на

рис. 1б, что, вероятно, является следствием большей толщины слоя SiO_2 (рис. 1а), формировавшегося на исходно неровных пластинах.

Реализация различных подходов обработки ЦМР пластин показана на примере двух различных структур — пластины, подобной сегменту сферы (рис. 2а), и пластины сложной формы (рис. 3а). На рисунке 2а показан рельеф поверхности пластины со структурой SiO_2/Si , сформированной PECVD-осаждением (согласно процессу (5)) на пластину Si толщиной 670 мкм плёнки SiO_2 толщиной 620 нм, при следующих условиях процесса: время 155 с, расход SiH_4 — 300 см³ мин⁻¹, N_2 — 3000 см³ мин⁻¹, N_2O — 9500 см³ мин⁻¹, давление 2,4 Торр, мощность ВЧ-генератора 1,1 кВт, температура 270 °С. На рисунке 3а показан рельеф поверхности пластины со структурой SiO_2/Si , сформированной CVD-осаждением (согласно процессу (4)) на пластину Si толщиной 670 мкм плёнки SiO_2 толщиной 1250 нм при следующих параметрах ТЭОС-процесса: температура 700 °С, давление 200 мТорр, расходы ТЭОС и кислорода 130 и 40 см³ мин⁻¹ соответственно.

Свойства плёнок SiO_2 , в том числе тип и значение механических напряжений в них, зависят не только от вида процесса осаждения, но и от режимных параметров каждого процесса, а также от толщины осаждённой или сформированной плёнки на поверхности подложки. Это относится и к плёнкам других материалов, например нитрида кремния (Si_3N_4), осаждаемых на подложки в различных ХОГФ-процессах.

Профили поверхности (рис. 2б, 3б) проводились вдоль линии, проходящей через центр пластины и пересекающей базовый срез.

Использование различных методик для анализа кривизны поверхности показано на примере структур с

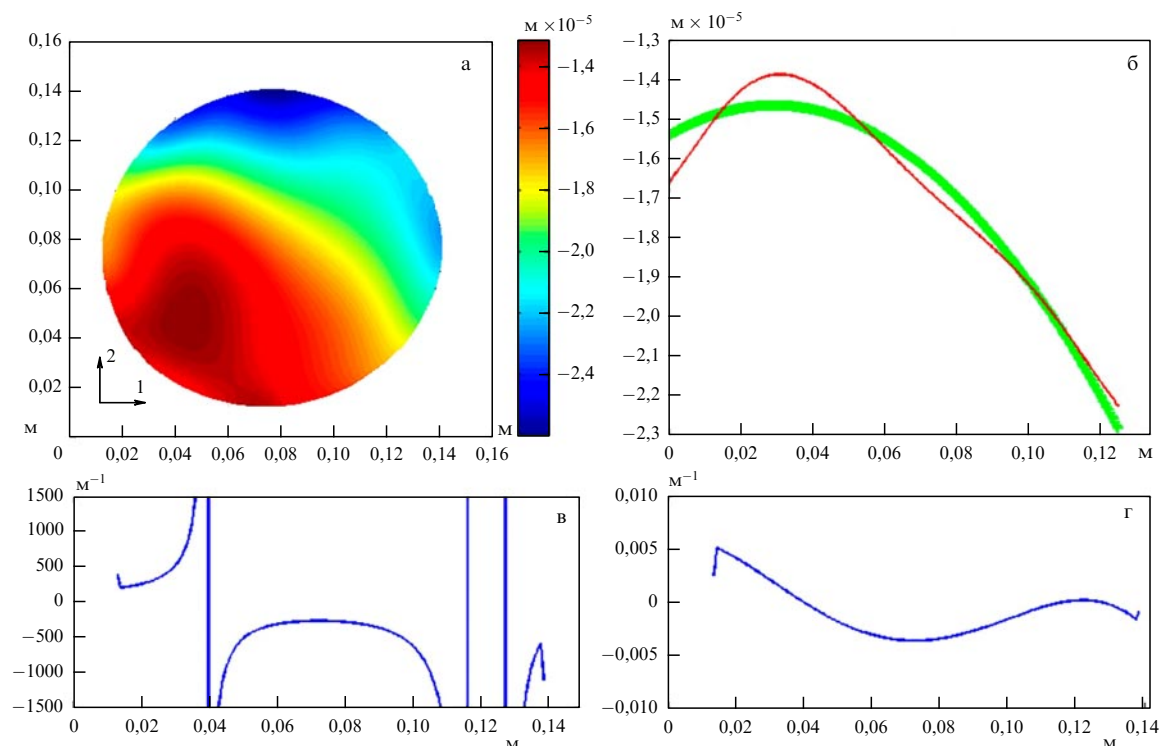


Рис. 3. (В цвете онлайн.) Структура SiO₂/Si (сложная форма пластины): (а) рельеф поверхности пластины, (б) профиль поверхности (красная сплошная линия) и соответствующая полиномиальная аппроксимация (зелёные знаки +), (в) распределение значений радиуса кривизны для профиля с рис. 3б, (г) распределение значений кривизны для профиля с рис. 3б.

гладкой поверхностью. Однако аналогичные подходы могут быть использованы и для анализа шероховатых и бугристых поверхностей, областей с резкими неоднородностями. В этом случае важной задачей исследователя будет корректное получение ЦМР и её предобработка.

4. Определение кривизн по формуле для плоских кривых с использованием полиномиальной аппроксимации

Здесь и далее обработка экспериментальных данных проведена с использованием разработанных авторами программ. Размер исходных ЦМР составляет 1339×1269 , после сглаживания и уменьшения — 326×326 .

Экспериментальные данные представляют собой массив декартовых координат (x_i, y_i, z_i) , где x_i и y_i — плановые координаты конкретной точки поверхности, z_i — высота конкретной точки.

При рассмотрении отдельно каждой строки или столбца матрицы высот Z фактически выделяются профили поверхности. Таким образом, массив данных можно представить как N векторов размером M каждый из $z = z(x)$ (при проведении профилей параллельно оси абсцисс x). Такой подход позволяет применять выражения для плоских кривых при расчёте кривизны.

Кривизна $k(x)$ (табл. 1) для кривой $z = z(x)$ вычисляется по известной формуле [40, 66, 67]

$$k(x) = \frac{|z''(x)|}{[1 + z'^2(x)]^{3/2}}. \quad (6)$$

Дифференцирование осуществляется с использованием полиномиальной аппроксимации. Каждой кривой

Таблица 1. Некоторые понятия, использующиеся при описании подходов к определению кривизны пластин

Радиус кривизны пластины	Радиус сегмента сферы, совпадающего с формой пластины
Кривизна пластины	Величина, обратная радиусу кривизны пластины
Прогиб пластины	Перепад высот между наивысшей и наинизшей областями поверхности пластины
Кривизна $k(x)$ для кривой $z = z(x)$ [40, 66, 67]	$k(x) = \frac{ z''(x) }{[1 + z'^2(x)]^{3/2}}$
Первые и вторые частные производные в декартовой системе координат для поверхности $z = z(x, y)$	$k_x = \frac{\partial z}{\partial x}$ $k_y = \frac{\partial z}{\partial y}$ $k_{xx} = \frac{\partial^2 z}{\partial x^2}$ $k_{yy} = \frac{\partial^2 z}{\partial y^2}$ $k_{xy} = \frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y}$
Вторые частные производные в цилиндрической системе координат для поверхности $z = z(r, \theta)$ [79]	$k_{rr} = \frac{\partial^2 z}{\partial r^2}$ $k_{\theta\theta} = \frac{1}{r} \frac{\partial z}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 z}{\partial \theta^2}$ $k_{r\theta} = \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial z}{\partial \theta} \right)$

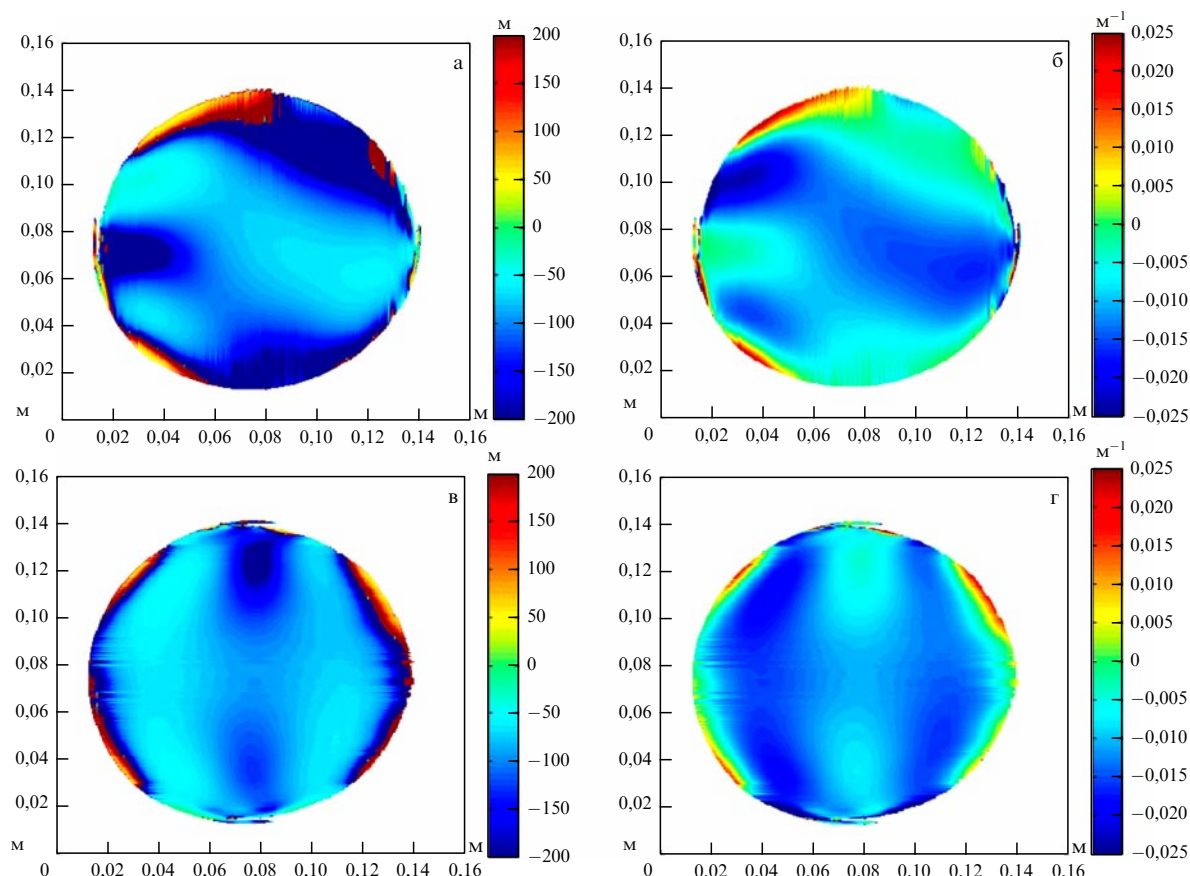


Рис. 4. Результаты расчёта радиуса кривизны и кривизны в двух основных направлениях для формы пластины, близкой к сферической (рельеф представлен на рис. 2а): (а) радиус кривизны в направлении 1, (б) кривизна в направлении 1, (в) радиус кривизны в направлении 2, (г) кривизна в направлении 2 (направления согласно рис. 2а).

$z(x)$ ставится в соответствие полином $p(x) = p_1x^n + p_2x^{n-1} + \dots + p_nx + p_{n+1}$. Расчёт первой и второй производных проводится с использованием полученных коэффициентов $p_1, p_2, \dots, p_n$.

При этом, поскольку $z_i \ll x_i$, при использовании для аппроксимации полинома второй степени полученное значение k не будет зависеть от x . Таким образом, при анализе профиля поверхности $z = z(x)$ будет получено одно численное значение кривизны профиля k (и радиуса кривизны профиля $R = 1/k$). Результат такого расчёта не зависит от оператора и предлагается к использованию при необходимости простого сравнения образцов друг с другом и для последующего расчёта механических напряжений в случае формы поверхности, подобной сегменту сферы. В частности, предлагается проведение профилей поверхности $z = z(y)$ и $z = z(x)$ через центр пластины ($N/2$ и $M/2$), вычисление соответствующих радиусов кривизны с использованием полиномов второй степени. Фактически это профили вдоль двух линий: параллельной и перпендикулярной базовому срезу пластины, что наиболее часто применяется при подобном анализе [7, 41].

Результат такого подхода к анализу рельефа поверхности структуры SiO₂/Si показан на рис. 2а. Профиль поверхности, построенный по данным измерений, и аппроксимирующая его функция, построенная на основе полинома второй степени, показаны на рис. 2б. Можно видеть, что кривые не идеально соответствуют друг

другу, однако характер зависимости схож. Радиусы кривизны для двух профилей поверхности, параллельных осям x и y , составили -80 и -90 м.

Описанная методика эффективна для анализа пластин, форма изгиба которых соответствует полиному второй степени, т.е. в целом может описываться одним значением радиуса кривизны. В большинстве случаев это так. Однако на практике приходится иметь дело с пластинами, рельеф которых имеет более сложный характер [11, 13, 14] (рис. 3а, б). В таком случае в целом также можно использовать описанную методику, но учитывать приближённость расчётов.

С другой стороны, представляет интерес возможность рассчитывать локальные радиусы кривизны в каждой точке профиля поверхности и на основе полученных данных строить карты кривизны поверхности и, следовательно, карты распределения механических напряжений по пластине [18–20, 41, 68, 69]. Это позволит локализовать области с допустимыми и недопустимыми значениями механических напряжений, о чём упоминалось ранее.

Кроме того, такой подход позволит работать с профилями поверхности сложной формы (рис. 3а, б). В целом описанную методику на основе полиномов второй степени можно применять для определения локальных радиусов кривизны, используя для аппроксимации лишь небольшой отрезок кривой $z(x)$ с центром в интересующей точке. Альтернативным вариантом является

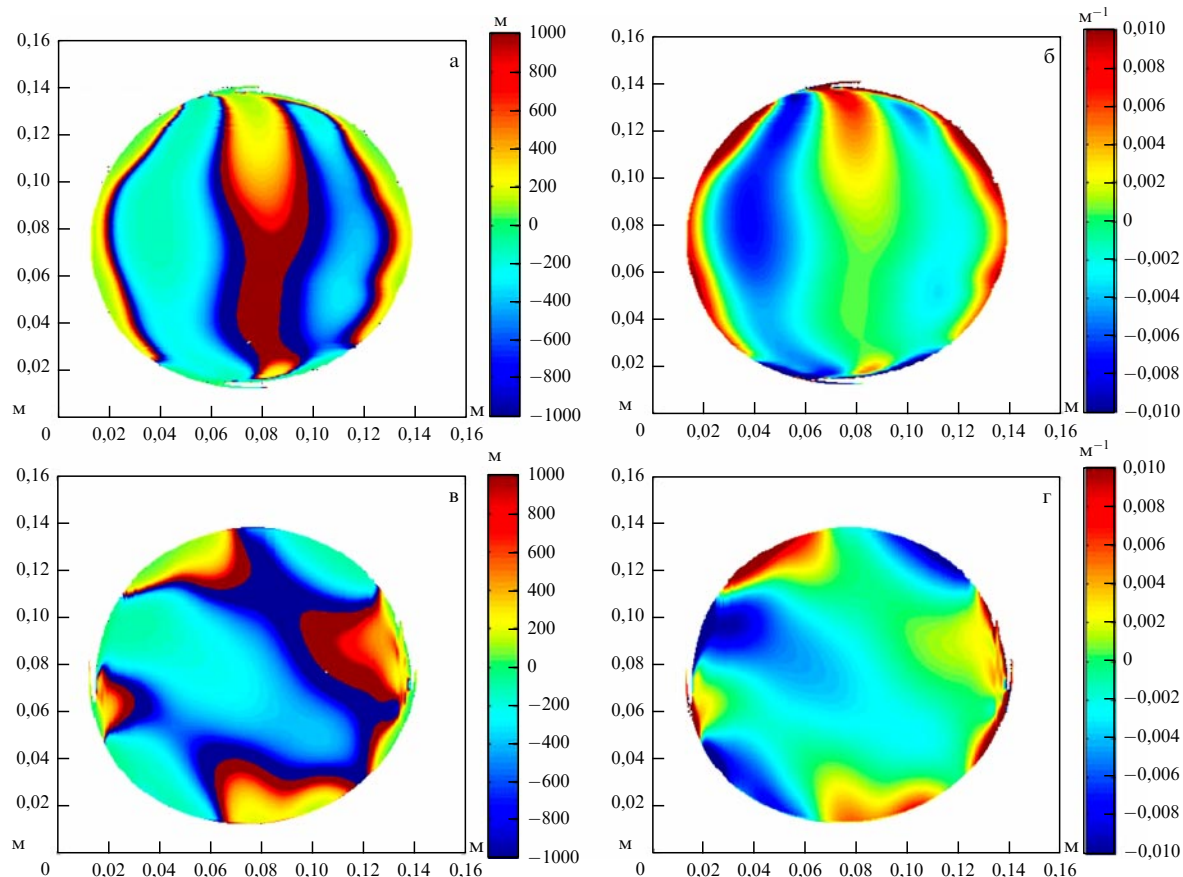


Рис. 5. Результаты расчёта радиуса кривизны и кривизны в двух основных направлениях для пластины сложной формы (рельеф представлен на рис. 3а): (а) радиус кривизны в направлении 1, (б) кривизна в направлении 1, (в) радиус кривизны в направлении 2, (г) кривизна в направлении 2 (направления согласно рис. 3а).

аппроксимация полиномами [10] более высоких степеней и последующий расчёт производных с учётом полученного набора коэффициентов. По опыту авторов, шестой степени обычно достаточно, при необходимости можно использовать и более высокие степени.

Полученные зависимости для радиуса кривизны и кривизны представлены на рис. 2в, г и 3в, г. Характер этих зависимостей согласуется с рис. 2б и 3б соответственно — расположение точек перегиба, областей с наибольшим прогибом и др. Проводя аналогичный расчёт для всех профилей поверхности вдоль определённого направления, можно построить карты радиуса кривизны и кривизны поверхности (рис. 4 и 5).

При проведении профилей поверхности возможен выбор любого направления — не только вдоль осей x и y . В этом случае исходные массивы данных (x_i, y_i, z_i) необходимо использовать для определения соответствующих координат u_i функции $z(u)$.

Поскольку в связи с анизотропией механических характеристик и неравномерностью рельефа в общем случае можно говорить лишь о радиусе кривизны и механических напряжениях в выбранной точке поверхности в выбранном направлении [10, 41, 70], такой подход позволяет определить интересующие исследователей параметры для различного типа структур.

Рассмотренные методики предлагается использовать при необходимости сравнения образцов друг с другом по одному параметру (одному значению кривизны или радиуса кривизны), расчёта механических напряжений по формуле Стоуни, а также для построения карт кривизны и радиусов кривизны серии профилей, подразумеваемая под этими терминами величины, полученные из выражения для плоских кривых (6).

5. Определение кривизны через расчёт вторых частных производных, в том числе в цилиндрических координатах

5. Определение кривизны через расчёт вторых частных производных, в том числе в цилиндрических координатах

В описанных подходах рельеф пластины рассматривается как серия профилей поверхности. Однако для более точного анализа пластину следует трактовать как цельную структуру, в которой взаимное расположение выпуклых и вогнутых неоднородностей рельефа определяет кривизну и, следовательно, влияет на механические напряжения близлежащих областей. Кроме того, в случае анализа сложного рельефа поверхности затруднительно оперировать понятиями профилей поверхности, поскольку для каждой анализируемой области возникает вопрос оптимального выбора направления профиля.

Как упоминалось ранее, в настоящее время разработан ряд методик расчёта механических напряжений, учитывающих неидеальность рассматриваемой структуры, в том числе влияние близлежащих областей. В оптимизированных методиках достаточно часто при выводе аналитических выражений и для проведения расчё-

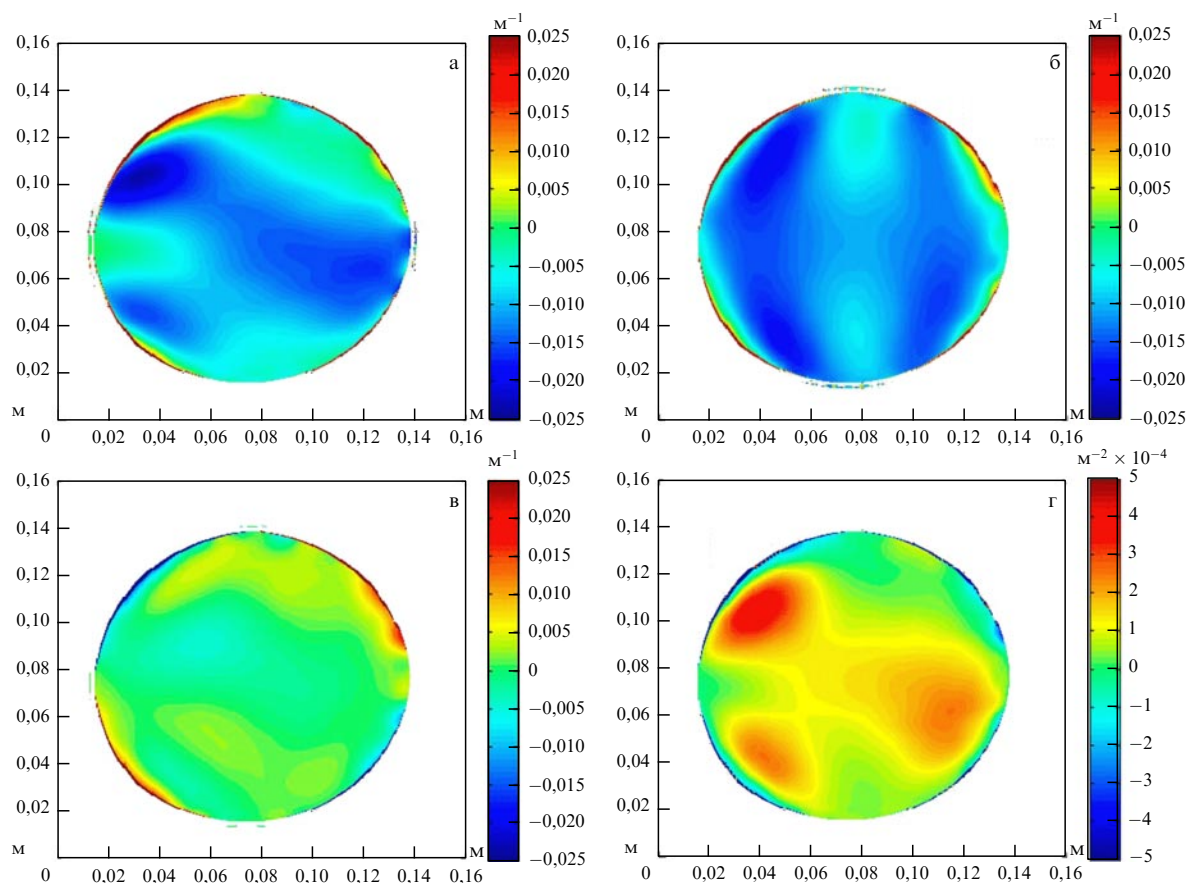


Рис. 6. Результаты расчёта в декартовой системе координат для формы пластины, близкой к сферической (рельеф представлен на рис. 2а): (а) k_{xx} , (б) k_{yy} , (в) k_{xy} , (г) приближение гауссовой кривизны $\tilde{K} = k_{xx}k_{yy} - k_{xy}^2$.

тов используются частные производные k_{xx} , k_{yy} и k_{xy} (см. табл. 1) [10, 20, 71–73], которые в профильной литературе иногда некорректно именуют термином "кривизна". Расчёт массивов значений k_{xx} , k_{yy} и k_{xy} по массиву исходных данных (x_i, y_i, z_i) обычно проводится с помощью стандартных конечно-разностных аппроксимаций дифференцирования, реализованных во многих программных продуктах. Используя значения k_{xx} , k_{yy} и k_{xy} , вычисляют механические напряжения [21] с учётом анизотропии характеристик материалов и рельефа.

Примеры расчёта k_{xx} , k_{yy} , k_{xy} для двух структур SiO_2/Si (рис. 2а и 3а) представлены на рис. 6 и 7 соответственно.

В целом, поскольку $z_i \ll x_i$, такой подход даёт результат, подобный расчёту карты с использованием серии профилей и полиномов высоких степеней, который описан в разделе 4. Действительно, паттерны на рис. 6а подобны паттернам на рис. 4б; на рис. 6б — паттернам на рис. 4г; на рис. 7а — паттернам на рис. 5б; на рис. 7б — паттернам на рис. 5г.

Однако с учётом геометрии исследуемых образцов (круглые пластины) расчёты часто проводят не в декартовых координатах, а в цилиндрических [74–76]. Методика [19, 68, 77–79] предполагает для проведения измерений метод CGS [15–18, 20, 21], а обработка экспериментальных данных производится с использованием полиномов Цернике [79–82]. Однако при наличии полученного альтернативным методом массива экспериментальных данных (x_i, y_i, z_i) можно использовать эту методику расчёта напряжений и без применения полино-

мов Цернике. Для этого массив (x_i, y_i, z_i) в декартовых координатах необходимо перевести в массив (r_i, θ_i, z_i') в цилиндрических координатах и затем вычислять частные производные.

Для корректного преобразования систем координат, как правило, необходима предобработка массива (x_i, y_i, z_i) . Так, нами при анализе круглых пластин было проведено выравнивание латеральных размеров, перенос центра пластины в центр изображения, сглаживание поверхности и др. Поскольку для вычисления производных в цилиндрических координатах необходима равномерная сетка данных (r_i, θ_i) , вначале задавался такой набор значений (r_i, θ_i) , потом он переводился в декартовы координаты (x_i', y_i') и затем по исходным значениям z_i в исходных, полученных экспериментально декартовых координатах (x_i, y_i) , путём интерполяции вычислялись значения z_i' .

Результаты расчёта вторых частных производных k_{rr} , $k_{\theta\theta}$, $k_{r\theta}$ (см. табл. 1) для двух структур SiO_2/Si (рис. 2а и 3а) представлены на рис. 8 и 9 соответственно.

Описанные в этом разделе подходы предлагается использовать для корректного расчёта нормальных и касательных механических напряжений по оптимизированным формулам, в случае необходимости учёта анизотропии исследуемого образца. Также, поскольку во многих практических случаях исследуемые структуры обладают центральной симметрией (сферической формы пластины, мембраны, островки плёнок), представление данных с использованием цилиндрических координат может существенно упростить решаемую задачу.

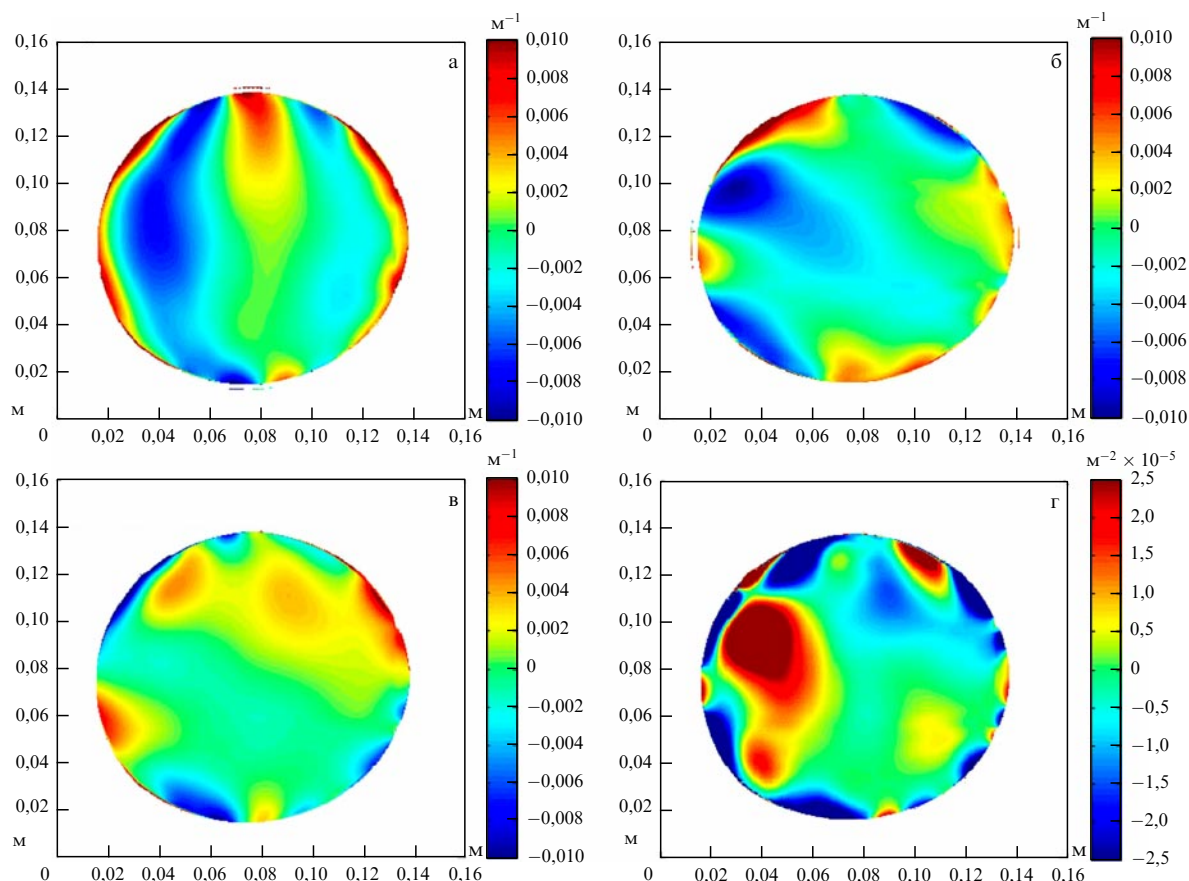


Рис. 7. Результаты расчёта в декартовой системе координат для пластины сложной формы (рельеф представлен на рис. 3а): (а) k_{xx} , (б) k_{yy} , (в) k_{xy} , (г) приближение гауссовой кривизны $\tilde{K} = k_{xx}k_{yy} - k_{xy}^2$.

6. Определение кривизн поверхности через расчёт главных кривизн. Геоморфометрия

Необходимость оперировать тремя значениями вторых частных производных вместо одного значения кривизны, производить достаточно объёмные вычисления, использовать цилиндрические координаты затрудняет широкое распространение подходов, описанных в предыдущем разделе. В целом они подходят для решения задач точного вычисления нормальных и касательных механических напряжений. Однако часто стоит задача оценки пространственного распределения значений кривизны и неоднородностей рельефа, а также механических напряжений по поверхности пластины. При этом целесообразно анализировать рельеф пластины целиком как двумерную матрицу значений Z , т.е. ЦМР, а не как серию профилей.

С другой стороны, при подробном анализе рельефа пластины можно получить ряд сведений, которые могут быть полезны для анализа не только механических напряжений, но и для других целей (например, подробного анализа объёмных дефектов).

Из дифференциальной геометрии, рассматривающей поверхность в трёхмерном евклидовом пространстве, хорошо известны такие понятия, как главные кривизны, средняя кривизна, гауссова (полная) кривизна и др. [66, 67, 83–85]. Относительная сложность математического аппарата этой дисциплины приводит к недостаточному широкому распространению методик на его основе, в том числе в области микроэлектроники. Однако практи-

ческое применение положений дифференциальной геометрии является достаточно простым для восприятия, а проводимые вычисления кривизны по ЦМР — тривиальными и легко выполнимыми во многих программных средах [86]. В настоящем разделе приводится ряд сведений, которые могут быть получены при анализе главных кривизн поверхности и связанных с ними величин.

Не будет преувеличением сказать, что понятийный и математический аппарат теории поверхности дифференциальной геометрии получил наибольшее развитие в физико-математической теории топографической поверхности в поле гравитации [87, 88], которая является теоретической основой геоморфометрии. Геоморфометрия — научная дисциплина, предметом которой является математическое моделирование и анализ рельефа, а также взаимосвязей между рельефом и другими компонентами геосистем. В настоящее время геоморфометрия широко используется для решения задач различных наук о Земле [3, 89]. В связи с этим подход к определению кривизн поверхности пластин через расчёт главных кривизн целесообразно изложить, опираясь на основные положения физико-математической теории топографической поверхности в поле гравитации.

Топографической поверхностью называется замкнутое ориентированное бесконечно дифференцируемое двумерное многообразие S в трёхмерном евклидовом пространстве E^3 . При этом выполняется ряд ограничений, из которых в нашем случае существенными являются три [3, 87]:

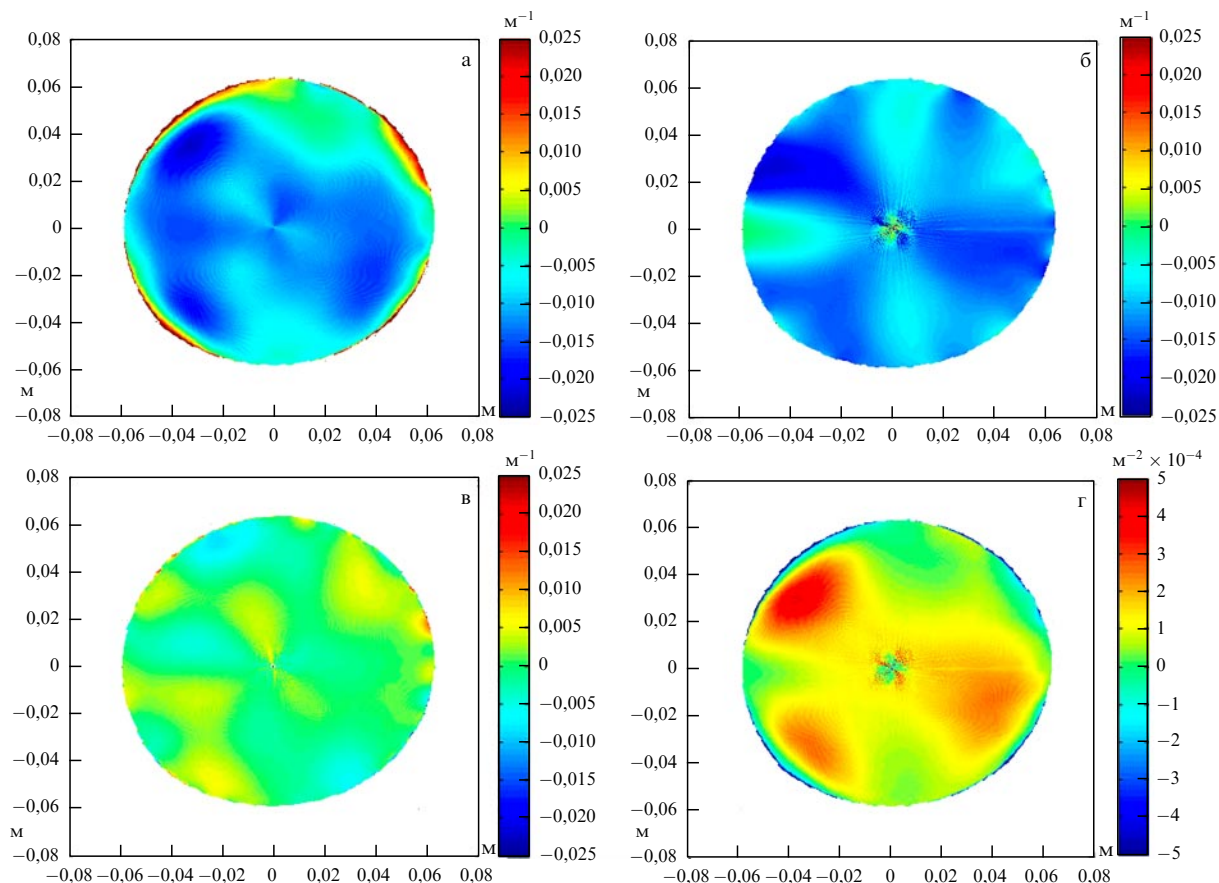


Рис. 8. Результаты расчёта в цилиндрической системе координат для формы пластины, близкой к сферической (рельеф представлен на рис. 2а): (а) k_{rr} , (б) $k_{\theta\theta}$, (в) $k_{r\theta}$, (г) гауссова кривизна $K = k_{rr} k_{\theta\theta}$.

1. Топографическая поверхность определяется гладкой однозначной функцией двух переменных $z = f(x, y)$, где z — высота, x и y — декартовы координаты. Это условие, в частности, означает, что пещеры, гроты и подобные им формы рельефа не рассматриваются.

2. Функция $z = f(x, y)$ является гладкой, т.е. топографическая поверхность имеет производные всех порядков. В геоморфометрии систематически используются первые, вторые и иногда третьи частные производные высоты.

3. Топографическая поверхность является масштабно-зависимым объектом. Это условие означает, что "фрактальную" компоненту рельефа можно считать ВЧ-шумом. В геоморфометрии фрактальные модели, как правило, не используются.

Морфометрической величиной называют однозначную функцию двух переменных, описывающую свойства топографической поверхности. Локальной морфометрической величиной называют однозначную функцию двух переменных, описывающую геометрию топографической поверхности в окрестностях данной точки поверхности вдоль направлений, задаваемых одной из двух пар взаимно перпендикулярных нормальных сечений (рис. 10).

Первой парой нормальных сечений являются главные сечения APA' и BPB' , которые хорошо известны из дифференциальной геометрии [85] (рис. 10а). Это нормальные сечения, обладающие максимальным и минимальным изгибом в данной точке P топографической поверхности.

Вторая пара нормальных сечений CPC' и DPD' выделяется гравитационным полем [87] (рис. 10б). Нормальное сечение DPD' включает в себя вектор ускорения силы тяжести $\mathbf{g}$ и имеет общую касательную с линией скольжения в данной точке P топографической поверхности. Нормальное сечение CPC' тангенциально горизонтально в данной точке P топографической поверхности.

Двум указанным парам нормальных сечений соответствуют два класса локальных морфометрических величин: атрибуты форм и атрибуты потоков [87, 88].

Атрибуты форм связаны с главными сечениями. Эти величины являются инвариантами гравитационного поля, т.е. они не зависят от направления вектора ускорения силы тяжести. К атрибутам форм относятся две главные кривизны — минимальная кривизна ($k_{\min}$) и максимальная кривизна ($k_{\max}$), средняя кривизна (H), гауссова кривизна (K), несферичность (M) и некоторые другие (табл. 2).

Атрибуты потоков¹ связаны с нормальными сечениями, выделенными гравитацией. Эти величины зависят от направления вектора ускорения силы тяжести. К атрибутам потоков относятся горизонтальная кривизна

¹ Устоявшийся термин "атрибуты потоков" был в своё время введён для обозначения морфометрических величин, применяемых для анализа латеральных потоков вещества (прежде всего, воды), перемещающихся вдоль земной поверхности и в приповерхностном слое под действием гравитации. Вместе с тем атрибуты потоков успешно применяются для "тонкого" анализа геометрии поверхности безотносительно к существованию на ней каких-либо потоков.

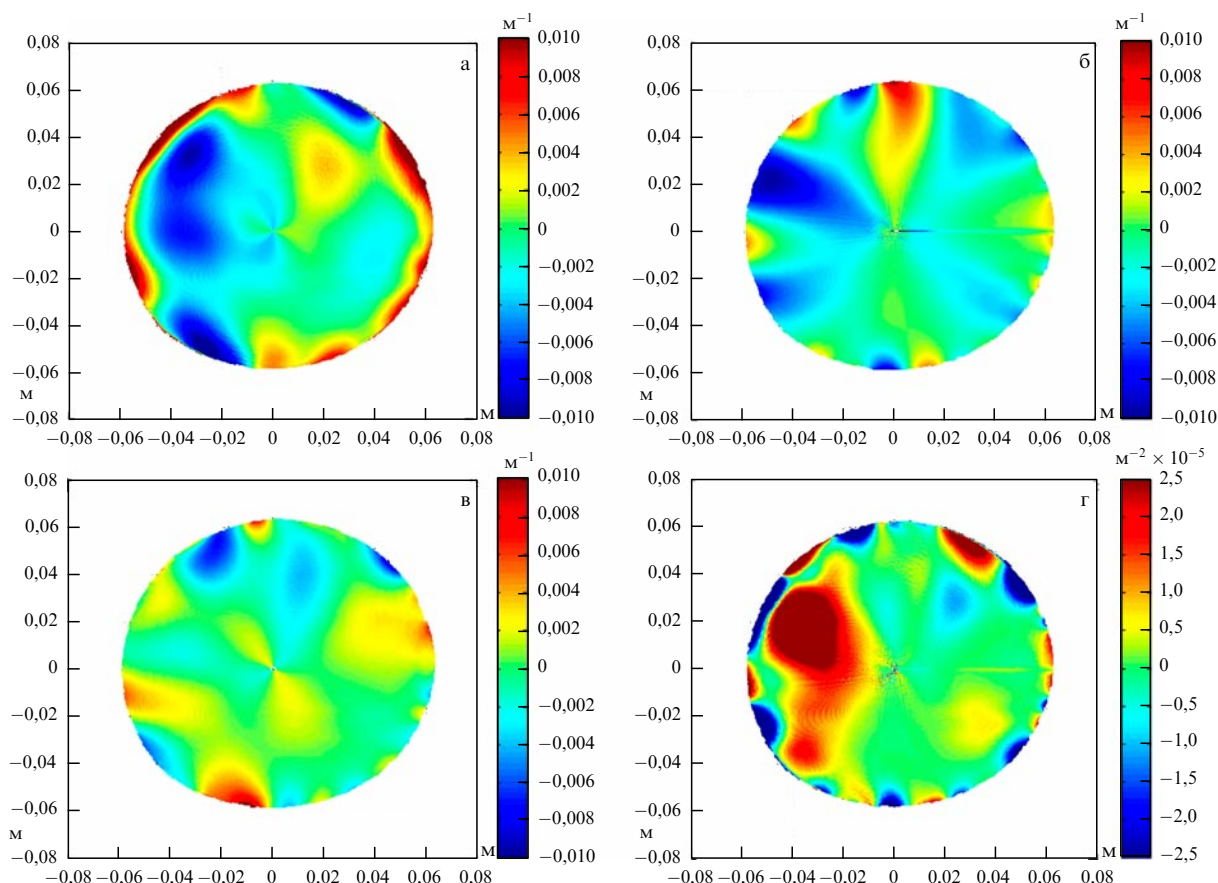


Рис. 9. Результаты расчёта кривизн в цилиндрической системе координат для пластины сложной формы (рельеф представлен на рис. 3а): (а) k_{rr} , (б) $k_{\theta\theta}$, (в) $k_{r\theta}$, (г) гауссова кривизна $K = k_{rr} k_{\theta\theta}$.

(k_h), вертикальная кривизна (k_v), избыточная горизонтальная кривизна (k_{hc}), избыточная вертикальная кривизна (k_{vc}), разностная кривизна (E), аккумуляционная кривизна (K_a), кольцевая кривизна (K_r) и некоторые другие (см. табл. 2).

Формулы и краткие интерпретации 12 локальных морфометрических величин, составляющих полную систему² кривизн [87], приведены в табл. 2. Локальные характеристики рельефа являются функциями частных производных высоты. Их расчёт по ЦМР проводится либо конечно-разностными методами, либо с помощью универсального спектрально-аналитического метода [3].

Очевидно, что поверхность любой пластины в той или иной степени шероховата и может содержать резкие неоднородности (дефекты), т.е. не является гладкой в математическом смысле и может иметь разрывы функции. Исходными данными для геоморфометрического анализа являются ЦМР — однозначные дискретные функции двух переменных, которые естественным образом описывают такую шероховатость и разрывы. Применяемые в геоморфометрии вычислительные алгоритмы позволяют рассчитывать по таким ЦМР как частные производные, так и модели кривизн, так как применяют либо локальную (в пределах скользящего окна), либо

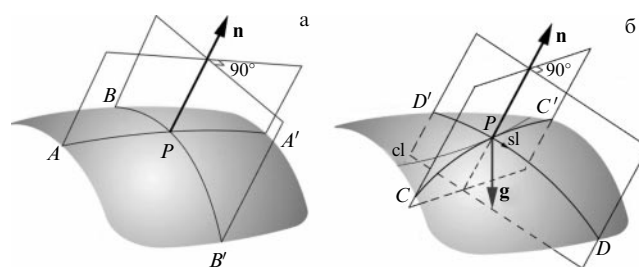


Рис. 10. Две пары нормальных сечений в точке P топографической поверхности: (а) главные сечения APA' и BPB' , (б) нормальные сечения CPC' и DPD' , выделенные гравитацией. $\mathbf{n}$ — внешняя нормаль к поверхности, $\mathbf{g}$ — вектор ускорения силы тяжести, cl — горизонталь, sl — линия скольжения [3].

глобальную аппроксимацию поверхности полиномами различного порядка.

Например, в методе Эванса полином второго порядка, коэффициентами в котором являются первые и вторые частные производные, методом наименьших квадратов приближается к скользящему окну 3×3 , для точек которого известны декартовы координаты и высоты поверхности. Перемещая скользящее окно по ЦМР, заданной на квадратной сетке, можно рассчитать значения частных производных и, соответственно, значения локальных морфометрических характеристик для всех точек ЦМР, кроме крайних строк и столбцов.

² Имеется в виду математическая полнота системы величин: возможность выразить все кривизны этой системы через другие кривизны этой же системы; использование каких-либо других величин для таких операций является излишним.

Таблица 2. Определения, формулы и интерпретации геоморфометрических величин, составляющих полную систему кривизн поверхности [3, 86, 87]

Название	Обозначение, единицы измерения	Формула, определение и краткая интерпретация
Атрибуты форм		
Минимальная кривизна	$k_{\min}$ или k_1 , м^{-1}	$k_{\min} = H - M$ Кривизна главного нормального сечения (рис. 10а) с минимальным изгибом в данной точке топографической поверхности. В геоморфологическом отношении положительные значения минимальной кривизны выделяют локальные выпуклые элементы рельефа, а отрицательные — долины.
Максимальная кривизна	$k_{\max}$ или k_2 , м^{-1}	$k_{\max} = H + M$ Кривизна главного нормального сечения (рис. 10а) с максимальным изгибом в данной точке топографической поверхности. В геоморфологическом отношении положительные значения максимальной кривизны выделяют хребты, а отрицательные — локальные впадины.
Средняя кривизна	H , м^{-1}	$H = \frac{1}{2}(k_{\min} + k_{\max}) = \frac{1}{2}(k_h + k_v) = -\frac{(1 + k_y^2)k_{xx} - 2k_x k_y k_{xy} + (1 + k_x^2)k_{yy}}{2\sqrt{(1 + k_x^2 + k_y^2)^3}}$ Полусумма кривизн двух любых нормальных взаимно перпендикулярных сечений в данной точке топографической поверхности. Представляет два механизма аккумуляции потоков — конвергенцию и относительное замедление — с равными весами.
Гауссова кривизна	K , м^{-2}	$K = k_{\min} k_{\max} = \frac{k_{xx} k_{yy} - k_{xy}^2}{(1 + k_x^2 + k_y^2)^2}$ Произведение максимальной и минимальной кривизн. Согласно <i>Theorema Egregium</i>, гауссова кривизна поверхности сохраняет свои значения после её изгибания, если оно произошло без растяжений, сжатий и разрывов.
Несферичность	M , м^{-1}	$M = \frac{1}{2}(k_{\max} - k_{\min}) = \sqrt{H^2 - K}$ Полуразность максимальной и минимальной кривизн. $M = 0$ на сфере. Показывает, насколько форма элемента земной поверхности отклоняется от сферической.
Атрибуты потоков		
Вертикальная кривизна	k_v , м^{-1}	$k_v = -\frac{k_x^2 k_{xx} + 2k_x k_y k_{xy} + k_y^2 k_{yy}}{(k_x^2 + k_y^2)\sqrt{(1 + k_x^2 + k_y^2)^3}}$ Кривизна нормального сечения, имеющего общую касательную с линией скольжения (рис. 10б) в данной точке топографической поверхности. Мера относительного замедления потоков, перемещающихся вдоль поверхности под действием гравитации (один из двух механизмов аккумуляции потоков). Потоки замедляются при $k_v < 0$ и ускоряются при $k_v > 0$. В геоморфологическом отношении на картах вертикальной кривизны могут выделяться террасовые уровни.
Горизонтальная кривизна	k_h , м^{-1}	$k_h = -\frac{k_y^2 k_{xx} - 2k_x k_y k_{xy} + k_x^2 k_{yy}}{(k_x^2 + k_y^2)\sqrt{1 + k_x^2 + k_y^2}}$ Кривизна нормального сечения, тангенциального горизонтали (рис. 10б) в данной точке топографической поверхности. Мера конвергенции потоков, перемещающихся вдоль поверхности под действием гравитации (один из двух механизмов аккумуляции потоков). Потоки конвергируют при $k_h < 0$ и дивергируют при $k_h > 0$. В геоморфологическом отношении на картах горизонтальной кривизны выделяются отроги хребтов и долин (области дивергенции и конвергенции соответственно).
Разностная кривизна	E , м^{-1}	$E = \frac{1}{2}(k_v - k_h)$ Полуразность вертикальной и горизонтальной кривизн. Показывает, насколько сильнее выражен один из двух механизмов аккумуляции: относительное замедление потоков (за который отвечает k_v) по сравнению с другим механизмом — конвергенцией потоков (за который отвечает k_h) в данной точке топографической поверхности.
Избыточная горизонтальная кривизна	k_{he} , м^{-1}	$k_{\text{he}} = k_h - k_{\min} = M - E$ Разность горизонтальной и минимальной кривизн. Показывает, насколько сильнее изогнуто нормальное сечение, тангенциальное горизонтали, по сравнению с минимальным изгибом топографической поверхности в данной точке.

Таблица 2. Окончание

Название	Обозначение, единицы измерения	Формула, определение и краткая интерпретация
Избыточная вертикальная кривизна	$k_{ve}, \text{м}^{-1}$	$k_{ve} = k_v - k_{\min} = M + E$ Разность вертикальной и минимальной кривизн. Показывает, насколько сильнее изогнуто нормальное сечение, имеющее общую касательную с линией скольжения, по сравнению с минимальным изгибом топографической поверхности в данной точке.
Аккумуляционная кривизна	$K_a, \text{м}^{-2}$	$K_a = k_h k_v = H^2 - E^2$ Произведение горизонтальной и вертикальной кривизн. Может быть использована для оценки степени аккумуляции потоков.
Кольцевая кривизна	$K_r, \text{м}^{-2}$	$K_r = k_{he} k_{ve} = M^2 - E^2$ Произведение избыточной горизонтальной и избыточной вертикальной кривизн. Описывает степень извилистости потоков.

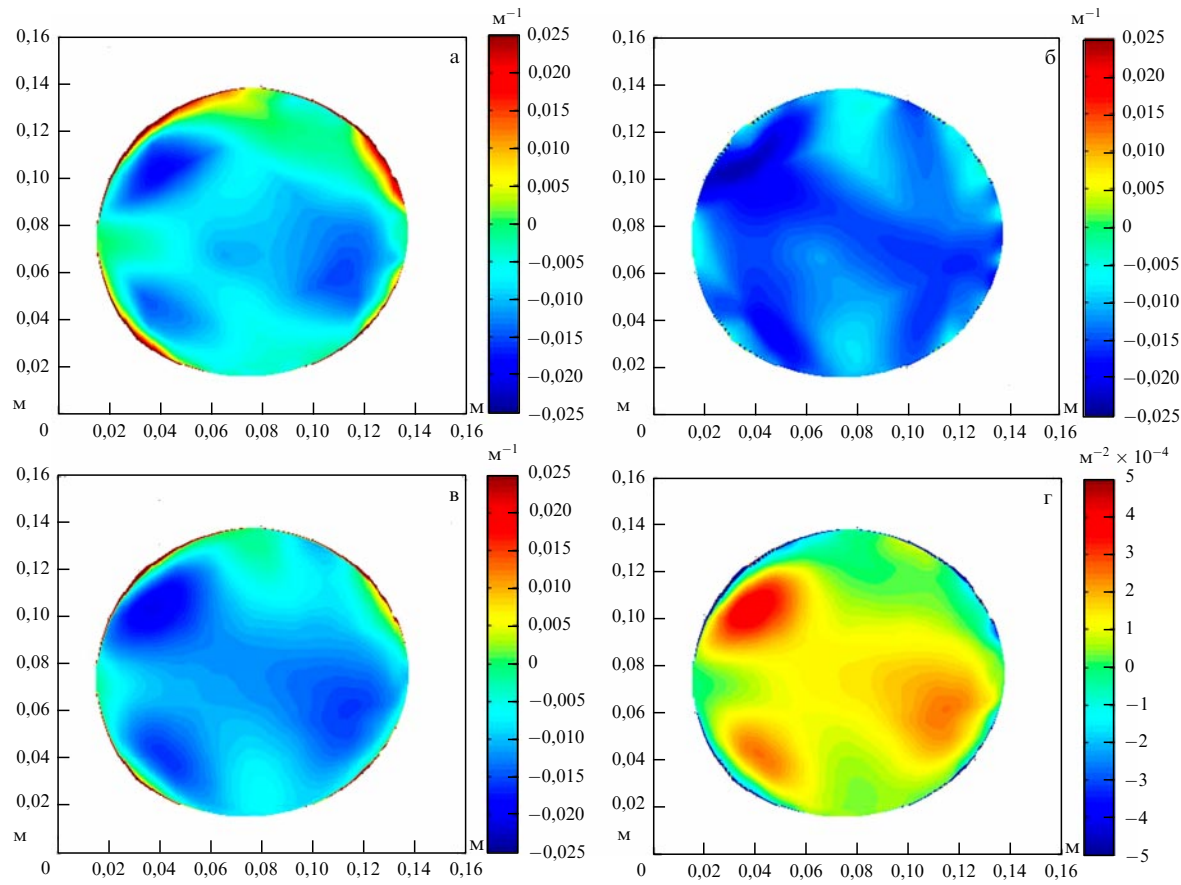


Рис. 11. Результаты расчёта главных ($k_{\max}$ и $k_{\min}$), средней (H) и гауссовой (K) кривизн для формы пластины, близкой к сферической (рельеф представлен на рис. 2а): (а) $k_{\max}$, (б) $k_{\min}$, (в) H , (г) K .

Анализируя знак величины K , выделяют три типа поверхности в данной точке [85]. Первый случай: обе главные кривизны k_1 и k_2 ($k_{\min}$ и $k_{\max}$ соответственно) не равны нулю и имеют одинаковый знак; при этом гауссова кривизна K положительна, соответствующая точка именуется эллиптической точкой. Наиболее простой пример такой поверхности — сфера.

Второй случай: разный знак главных кривизн k_1 и k_2 , что приводит к отрицательному значению гауссовой кривизны K ; соответствующая точка поверхности именуется седловой [85].

Третий случай: обращение в нуль одной из главных кривизн, что приводит к обращению в нуль гауссовой кривизны; соответствующая точка является параболической [85]. Пример поверхности с подобными точками — боковая поверхность цилиндра.

Знак средней кривизны H определяет преимущественное направление изгиба. Для выпуклых локальных участков поверхности средняя кривизна положительна, для вогнутых она отрицательна, для локальных участков уплощения равна нулю [87, 88]. Отметим, что здесь и далее при описании особенностей морфометрических ве-

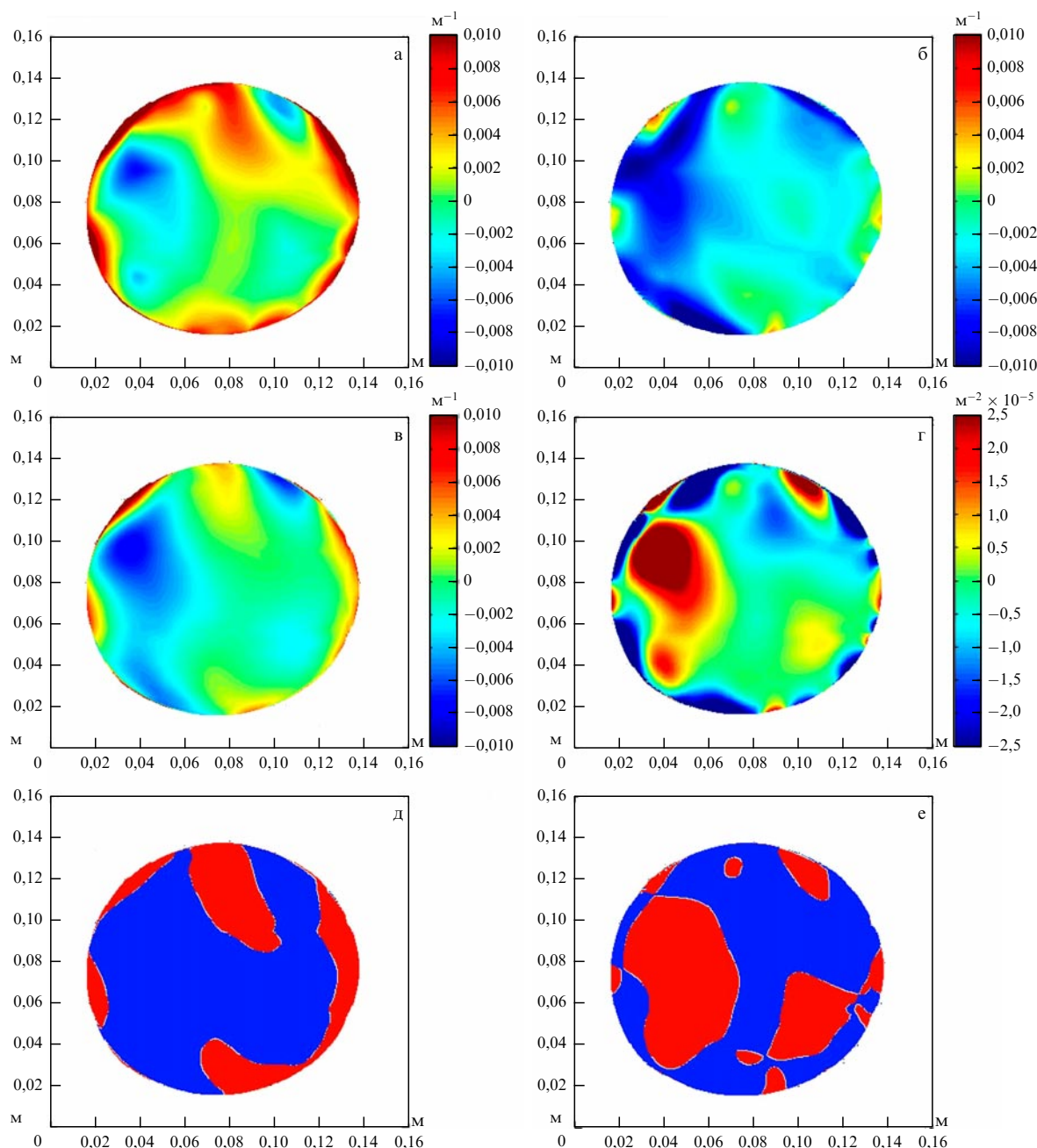


Рис. 12. (В цвете онлайн.) Результаты расчёта главных ($k_{\max}$ и $k_{\min}$), средней (H) и гауссовой (K) кривизн для пластины сложной формы (рельеф представлен на рис. 3а): (а) $k_{\max}$, (б) $k_{\min}$, (в) H , (г) K , (д) знак H (тёмным синим $H < 0$, светлым красным $H > 0$), (е) знак K (тёмным синим $K < 0$, светлым красным $K > 0$).

личин рассматривается случай направления нормали от поверхности (см. рис. 10), но карты кривизн (рис. 11, 12) получены в случае нормали к поверхности, что приводит к изменению знака средней кривизны H и главных кривизн.

Полезен анализ главных кривизн: максимальной и минимальной. При этом необходимо учитывать, что максимальная кривизна является таковой с учётом знака величин, т.е. по модулю она может быть и меньше второй главной кривизны (в случае если минимальная кривизна отрицательна). В преимущественно вогнутой области (с отрицательной средней кривизной) значение минимальной кривизны по модулю будет больше, чем значение максимальной кривизны по модулю. Аналогично в преимущественно выпуклой области (с положи-

тельной средней кривизной) значение максимальной кривизны по модулю будет больше, чем значение наименьшей кривизны по модулю.

Положительные значения максимальной кривизны соответствуют протяжённым выпуклым областям поверхности, отрицательные — локальным вогнутым элементам рельефа (впадинам). Положительные значения минимальной кривизны соответствуют локальным выпуклым участкам (бугоркам), отрицательные — протяжённым вогнутым участкам поверхности [3].

Подробное описание различных типов поверхности (рис. 13) [90] и соответствующих им кривизн весьма обширно [3] и выходит за рамки данной статьи. По сути, рассматриваемый математический аппарат весьма подробно описывает форму поверхности, что определяет

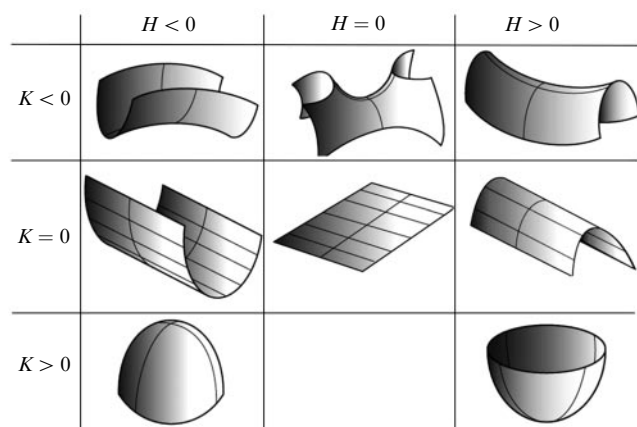


Рис. 13. Схема классификации форм поверхности по Гауссу [90].

такие сферы его применения, как анализ и классификация формы деталей [91–93], архитектура [94], науки о Земле [89], офтальмология [95] и др.

Отдельно стоит обратить внимание на такую морфометрическую величину, как интенсивность кривизны [96], или несферичность [3] (см. табл. 2). В работе [96] проведён корреляционный и факторный анализ параметров кривизны. Получено, что интенсивность кривизны наиболее надёжно и адекватно определяет особенности деформирования. Также отмечается, что интенсивность кривизны напрямую зависит от интенсивности деформаций сдвига, связанных с максимальным касательным напряжением.

Есть ряд работ, использующих понятие гауссовой кривизны для анализа поведения и изменения форм структур, в основном бистабильных систем [70–74, 76, 97–102]. Во многих из них упоминается "Замечательная теорема" (Theorema Egregium) Гаусса, описывающая взаимосвязь гауссовой кривизны и деформаций.

Таким образом, рассмотренный математический аппарат не только позволяет качественно анализировать рельеф поверхности, но и напрямую взаимосвязан с важной задачей — анализом механических напряжений и стабильности систем. Имеющиеся в геоморфометрии возможности логично применить [103, 104] и для анализа пластин и иных небольших по размеру объектов.

Был проведён анализ рельефа поверхности, представленного на рис. 2а и 3а. На рисунках 11, 12 приведены рассчитанные главные кривизны, средняя кривизна, гауссова кривизна.

Форма пластины, представленной на рис. 2а, подобна выгнутому сегменту сферы, что соответствует положительному значению гауссовой кривизны и положительному значению средней кривизны. Анализируя карты главных кривизн (рис. 11а, б), можно определить локальные области с большей и меньшей кривизной и соответствующие им особенности рельефа. Очевидна сопоставимость данных карт на рис. 4б, 6а, 8а и 11а.

Форма пластины, представленной на рис. 3а, достаточно сложная. Присутствуют обширные по площади выпуклые и вогнутые участки (см. рис. 12). В целом карты, представленные на рис. 12, гораздо информативнее данных, представленных на рис. 3а, и позволяют локализовать области по различному признаку. Минимальная кривизна хорошо локализует протяжённые вогнутые участки поверхности, а также показывает рас-

положение нескольких "бугров" (выпуклых областей). Максимальная кривизна показывает другой уровень локализации: например, видна выпуклая область в пределах в целом вогнутой протяжённой области. Главные кривизны независимы друг от друга [94] и в соответствии с рис. 10 одновременно характеризуют поверхность на разных уровнях.

Стоит учесть, что значения по оси Z на несколько порядков меньше значений по осям X и Y . Поэтому для смещения акцента при анализе и в целом для повышения наглядности данных можно вместо исходного набора данных (x_i, y_i, z_i) использовать набор данных (x_i, y_i, Cz_i) , где C — некоторый достаточно большой коэффициент, при домножении на который значения по оси Z становятся существенно больше значений по осям X и Y .

Также, поскольку морфометрические величины обычно характеризуются широким динамическим диапазоном значений, в геоморфометрии во избежание потери информации об их пространственном распределении для отображения применяют логарифмическое трансформирование следующего вида [3]:

$$\tilde{\gamma} = \text{sign } \gamma \ln(1 + 10^{\hat{m}} |\gamma|), \quad (7)$$

где $\tilde{\gamma}$ и γ — трансформированное и исходное значения морфометрической величины соответственно; $\hat{n} = 0$ для нелокальных величин, $\hat{n} = 2, \dots, 9$ для локальных величин; $\hat{m} = 2$ для K , K_a и K_r , $\hat{m} = 1$ для других величин. Выбор значения $\hat{n}$ зависит от шага сетки ЦМР.

Отдельно отметим, что описываемая в этом разделе методика эффективна при анализе структур сложной формы, расположенных под наклоном. На практике приходится иметь дело с необходимостью предобработки результатов измерений, в том числе с удалением линейного наклона. Однако в случае сложной формы объекта исследований расчёт вычитаемой плоскости часто становится нетривиальной задачей и требует времени, мастерства и творческого подхода исследователя. Но линейный наклон не препятствует корректному расчёту кривизн при использовании методов геоморфометрии, поэтому эти карты и предлагается применять для анализа рельефа.

Карты гауссовой кривизны, рассчитанные в цилиндрической [76, 105] и декартовой системах координат, в целом сопоставимы (рис. 6г, 8г и 11г; рис. 7г, 9г и 12г). Однако в центральной части карт, рассчитанных в цилиндрической системе координат, наблюдаются артефакты (см. рис. 8 и 9). Они вызваны тем, что начало координат (полюс) в цилиндрической системе координат является точкой сингулярности: одна из координат (угол) в ней не определена. При интерполяции ЦМР с квадратной сетки декартовой системы координат на радиально-концентрическую сетку цилиндрической системы координат вокруг полюса последней имеет место разрыв функции z , и в её окрестности возникает явление Гиббса (характерные всплески функции вблизи точки разрыва) [106]. Амплитуда всплесков невелика и на карте рельефа (высот) они незаметны для пользователя. Вместе с тем после расчёта производных и гауссовой кривизны подобные артефакты становятся заметными. Это совершенно естественно: хорошо известно, что производные очень чувствительны к ВЧ-шуму, и чем выше порядок производной, тем выше чувствительность [106]. С этим эффектом можно пытаться бороться,

используя для интерполяции сплайны с натяжением [107] или разрезая радиально-концентрическую сетку ЦМР вблизи полюса. Однако полностью устранить артефакты такого рода невозможно.

Хотя некоторые исследователи используют при расчётах приближённую (упрощённую) формулу гауссовой кривизны $\hat{K} = k_{xx}k_{yy} - k_{xy}^2$ [101] (т.е. первые производные принимаются равными нулю), для исследуемых пластин карты гауссовой кривизны, рассчитанные по такой формуле, в целом аналогичны картам гауссовой кривизны при стандартном расчёте через главные кривизны.

Результаты расчёта гауссовой кривизны в декартовой и цилиндрической системах координат с использованием методов геоморфометрии в целом аналогичны (рис. 6г, 8г и 11г; рис. 7г, 9г и 12г). Это свидетельствует о корректности каждой из описанных методик, несмотря на особенности, вызываемые проведением численных расчётов с различным программным обеспечением (ошибки вычислений) и наличием серии преобразований экспериментальных данных (восстановление недостающих данных при необходимости, корректировка размера обрабатываемого массива, сглаживание, интерполяция и др.).

В целом методы геоморфометрии эффективны для локализации различного типа областей поверхности, что часто сложно осуществимо при чисто визуальном анализе рельефа пластины.

Несмотря на достаточно редкое применение описанных в этом разделе величин для анализа структур в микроэлектронике, можно ожидать большего внимания к данной сфере знаний. Это вызвано необходимостью тщательного контроля особенности рельефа при проведении технологических операций над пластинами, например, при бондинге пластин или исследовании утонённых пластин. Кроме того, описанные в настоящей статье подходы могут быть реализованы не только для анализа рельефа круглых пластин, но и для расчёта кривизны небольших структур, в том числе МЭМС [9, 108–112]. Также они могут быть применимы для последующего расчёта тензора напряжений [86].

7. Заключение

Описаны три идеологически близких подхода к определению кривизны пластин по рельефу их поверхности. Показано применение этих подходов на примере анализа пластин со структурой оксид кремния на кремнии в случае как достаточно простой формы поверхности (сегмент сферы с радиусом кривизны порядка 80 м), так и сложной (наличие выпуклых и вогнутых участков). Приведены карты распределения кривизны и радиуса кривизны (по профилям поверхности), частных производных k_{xx} , k_{yy} , k_{xy} , k_{rr} , $k_{\theta\theta}$, $k_{r\theta}$, главных, средней и гауссовой кривизн.

Подход на основе анализа профилей поверхности, особенно с использованием для аппроксимации полиномов второй степени, эффективен при работе с большим количеством пластин простой (сферической) формы, необходимости быстрого проведения измерений и расчёта механических напряжений, сравнения образцов друг с другом. При этом, в связи с автоматизацией производства и процесса измерений, а также необходимостью более тщательного анализа структур методики, основанные на анализе только профилей поверхности, можно считать постепенно устаревающими.

Использование для анализа кривизны или радиуса кривизны определяется диапазоном анализируемых величин — может быть удобно работать как с самой величиной, так и с величиной, ей обратной.

В зависимости от цели последующей обработки и от особенностей анализируемого объекта (наличия центральной симметрии) может быть использована декартова или цилиндрическая система координат. Однако использование для расчётов цилиндрической системы координат приводит к появлению неустраняемых артефактов. Поскольку подробный анализ реальных структур не предполагает наличия в них симметрии, преимущества расчётов напряжений в цилиндрической системе координат нивелируется.

Обширный математический аппарат геоморфометрии выглядит наиболее перспективным для анализа неоднородностей рельефа поверхности, поскольку рассчитываемые морфометрические величины имеют ясный физический смысл и могут достаточно легко интерпретироваться.

Для расчёта механических напряжений хорошо подходит как использование вторых частных производных по координате, так и рассчитанных с применением дифференциальной геометрии кривизн.

В статье описаны далеко не все возможные варианты определения кривизны поверхности пластин. Однако даже представленные подходы существенно расширяют спектр получаемой при анализе информации.

Благодарности. Авторы выражают благодарность В.Ю. Кирееву (АО "Зеленоградский нанотехнологический центр"), С.А. Лычеву (Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН) и Н.В. Богачёву (Сколтех; Московский физико-технический институт, Национальный исследовательский университет) за обсуждение и ценные замечания.

Работа выполнена с использованием оборудования ЦКП "МСТ и ЭКБ" НИУ МИЭТ (Центр коллективного пользования "Микросистемная техника и электронная компонентная база" Национального исследовательского университета "Московский институт электронной техники") в рамках реализации программы Лидирующего исследовательского центра (ЛИЦ) "Доверенные сенсорные системы" (Договор № 009/20 от 10.04.2020). Работа А.А.Д. и Н.А.Д. выполнялась при финансовой поддержке Минкомсвязи России и АО "РВК" (Российская венчурная компания) (Идентификатор соглашения о предоставлении субсидии — 0000000007119P190002).

Список литературы

1. Дюжев Н А и др. *Российские нанотехнологии* **12** (7–8) 97 (2017); Dyuzhev N A et al. *Nanotechnol. Russia* **12** 426 (2017)
2. Гусев Е Э и др. *Нано- и микросистемная техника* **19** 331 (2017)
3. Florinsky I V *Digital Terrain Analysis in Soil Science and Geology* 2nd ed. (Amsterdam: Elsevier. Academic Press, 2016)
4. Кирилловский В К, Точилина Т В *Оптические измерения* Ч. 1 *Измерения геометрических параметров* 2-е изд., стер. (СПб.: Университет ИТМО, 2015)
5. Кирилловский В К *Оптические измерения* Ч. 3 *Функциональная схема прибора оптических измерений. Типовые узлы. Оптические измерения геометрических параметров* (СПб.: ИТМО, 2005)
6. Malacara D (Ed.) *Optical Shop Testing* (New York: Wiley, 1978); Пер. на русск. яз.: Малакара Д (Ред.) *Оптический производственный контроль* (М.: Машиностроение, 1985)

7. Djuzhev N A et al. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* **189** 012019 (2017)
8. Yun H M, Chao L P, Hsu J S *Appl. Mech. Mater.* **121–126** 4295 (2012)
9. Poelma R H et al. *J. Micromech. Microeng.* **21** 065003 (2011)
10. Dunn M L, Zhang Y, Bright V M *J. Microelectromech. Syst.* **11** 372 (2002)
11. Пилипенко В А и др. *Приборы и методы измерений* (1) 71 (2011)
12. Егоров Г П "Механические напряжения в металлических пленках при магнетронном осаждении", Дисс. ... канд. физ.-мат. наук (М.: МИСиС, 2018)
13. Сенько С Ф, Зеленин В А *Приборы и методы измерений* **9** 74 (2018)
14. Сенько С Ф, Сенько А С, Зеленин В А *Докл. Белорусск. гос. ун-та информатики и радиоэлектроники* (5) 12 (2018)
15. Freund L B, Suresh S *Thin Film Materials. Stress, Defect Formation, and Surface Evolution* (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2003)
16. Vaudin M D, Kessler E G, Owen D M *Metrologia* **48** 201 (2011)
17. Rosakis A J et al. *Thin Solid Films* **325** 42 (1998)
18. van Dijk L et al. *Proc. SPIE* **10145** 101452L (2017)
19. Dong X et al. *Opt. Express* **19** 13201 (2011)
20. Dong X et al. *Exp. Mech.* **53** 959 (2013)
21. Zhang C et al. *Exp. Mech.* **56** 1123 (2016)
22. Stoney G G *Proc. R. Soc. Lond. A* **82** 172 (1909)
23. Айвазян Г Е *Изв. НАН Республики Армения и Гос. инженерного ун-та Армении. Сер. технических наук* **53** 63 (2000)
24. Дедкова А А, Киреев В Ю, Махиборода М А *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование* **20** (2) 23 (2020)
25. Табенкин А Н, Тарасов С Б, Степанов С Н *Шероховатость, волнистость, профиль. Международный опыт* (СПб.: Изд-во Политехнического ун-та, 2007)
26. Glang R, Holmwood R A, Rosenfeld R L *Rev. Sci. Instrum.* **36** 7 (1965)
27. Новак А В, Новак В Р, Дедкова А А, Гусев Е Э *Изв. вузов. Электроника* **22** 138 (2017); Пер. на англ. яз.: Novak A V, Novak V R, Dedkova A A, Gusev E E *Semiconductors* **52** 1953 (2018)
28. Bigl S et al. *Materials* **10** 1287 (2017)
29. Добрынин А В *Письма в ЖТФ* **23** (18) 32 (1997); Dobrynin A V *Tech. Phys. Lett.* **23** 709 (1997)
30. Маркочев В М, Егоров Г П *Заводская лаборатория. Диагностика материалов* **84** (3) 61 (2017)
31. Ohlidal I et al. *Proc. SPIE* **5527** 139 (2004)
32. Mallik A, Stout R, Ackaert J *IEEE Trans. Components Packag. Manuf. Technol.* **4** 240 (2014)
33. Струнин В И, Худайберганов Г Ж, в сб. *Омские научные чтения – 2018. Материалы Второй Всероссийской научной конф., Омск, 10–15 декабря 2018 г.* (Отв. ред. Т Ф Ящук) (Омск: Омский гос. ун-т им. Ф.М. Достоевского, 2018) с. 644
34. Picciotto A et al. *Appl. Surf. Sci.* **256** 251 (2009)
35. Stenzel O et al. *Thin Solid Films* **517** 6058 (2009)
36. Szekeeres A, in *Fundamental Aspects of Ultrathin Dielectrics on Si-based Devices* (NATO Science Series, Vol. 47, Eds E Garfunkel, E Gusev, A Vul') (Dordrecht: Springer, 1998) p. 65, https://doi.org/10.1007/978-94-011-5008-8_5
37. Bouaouina B et al. *Surf. Coat. Technol.* **333** 32 (2018)
38. Klose Ph et al. *Int. J. Hydrogen Energy* **42** 22583 (2017)
39. Seidl W M et al. *Surf. Coat. Technol.* **347** 92 (2018)
40. Krawiec H et al. *Appl. Surf. Sci.* **475** 162 (2019)
41. Сенько С Ф, Зеленин В А *Приборы и методы измерений* **9** 254 (2018)
42. Shinohara A et al. *Mater. Sci. Forum* **941** 2069 (2018)
43. Liu D, Chen W *J. Eng. Mater. Technol.* **134** 031002 (2012)
44. Liu D Y, Chen W Q *Mech. Res. Commun.* **37** 520 (2010)
45. Wang T-G et al. *Mater. Sci. Eng. A* **527** 454 (2010)
46. Zhang N-H, Chen J-Z *Eur. J. Mech. A* **28** 284 (2009)
47. Zhang X C et al. *Surf. Coat. Technol.* **201** 6715 (2007)
48. Klein C A, Miller R P *J. Appl. Phys.* **87** 2265 (2000)
49. Benabdi M, Roche A A *J. Adhesion Sci. Technol.* **11** 281 (1997)
50. Коваленко Д А, Петров В В *Журн. нано- и электронной физики* **7** 03036 (2015)
51. Chou T-L, Yang S-Y, Chiang K-N *Thin Solid Films* **519** 7883 (2011)
52. Joseph S et al. *Proc. SPIE* **9453** 94530R (2015)
53. Бут Д К, Бычков П С, Лычев С А *Вестн. Пермского нац. исслед. политехнического ун-та. Механика* (1) 17 (2020)
54. Бычков П А, Лычев С А, Бут Б Т *Вестн. Самарского ун-та. Естественнонаучн. сер.* **25** (4) 48 (2019)
55. Дедкова А А и др. *Дефектоскопия* (5) 52 (2020); Dedkova A A et al. *Russ. J. Nondestruct. Testing* **56** 452 (2020)
56. Djuzhev N A et al. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.* **289** 012007 (2018)
57. Jiang C et al. *Proc. SPIE* **10932** 109320K (2019)
58. Mao C-L et al. *Acta Metrolog.* **39** 5628 (2018)
59. Ardigo M R, Ahmed M, Besnard A *Adv. Mater. Res.* **996** 361 (2014)
60. Боргардт Н И, Алексеев Н В, Волков Р Л *Изв. вузов. Электроника* (5) 91 (2011)
61. Гужов В и др. *Автоматика и программная инженерия* (2) 71 (2016)
62. Лопарев А В и др. *Оптический журн.* **79** (6) 79 (2012); Loparev A V et al. *J. Opt. Technol.* **79** 371 (2012)
63. Дедкова А А, Махиборода М А *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование* **20** (2) 41 (2020)
64. Зенцова Е А, в сб. *Инновации, качество и сервис в технике и технологиях. V-я Международная научно-практическая конф., 04–05 июня 2015 г. Сборник научных трудов* (Курск: Юго-Западный гос. ун-т, 2015) с. 150
65. Киреев В Ю, Столяров А А *Технологии микрорелектроники. Химическое осаждение из газовой фазы* (М.: Техносфера, 2006)
66. Иванов А О, Тужилин А А "Лекции по классической дифференциальной геометрии", <http://dfgm.math.msu.su/files/IvaTuz-Term1-2017.pdf>
67. Скопенков А Б *Основы дифференциальной геометрии в интересных задачах* (М.: МЦНМО, 2009)
68. Huang Y, Ngo D, Rosakis A J *Acta Mech. Sinica* **21** 362 (2005)
69. Киямов Х Г и др. *Изв. Казанского гос. архитектурно-строительного ун-та* (1) 35 (2007)
70. Seffen K A, Guest S D *J. Appl. Mech.* **78** 011002 (2011)
71. Seffen K A, McMahon R A *Int. J. Mech. Sci.* **49** 230 (2007)
72. Guest S D, Kebabze E, Pellegrino S J. *Mech. Mater. Struct.* **6** 203 (2011)
73. Eckstein E, Pirrera A, Weaver P M *AIAA J.* **54** 1778 (2016)
74. Seffen K A *J. Appl. Mech.* **83** 021005 (2016)
75. Sobota P M, Seffen K A *R. Soc. Open Sci.* **6** 190888 (2019)
76. Sobota P M, Seffen K A *Proc. R. Soc. Lond. A* **473** 20170230 (2017)
77. Wang M Q et al. *Int. J. Solids Struct.* **49** 1701 (2012)
78. Ngo D et al. *Thin Solid Films* **515** 2220 (2006)
79. Brown M A "Measuring stress in thin film - substrate systems featuring spatial nonuniformities of film thickness and/or misfit strain", Thesis in partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Philosophy (Pasadena, CA: California Inst. of Technology, 2007)
80. Лексин А Ю, Кутровская С В *Физические и математические принципы адаптивной оптики* (Владимир: ВлГУ, 2015) Методические указания к лабораторным занятиям для студентов ВлГУ, обучающихся по направлениям 12.03.05 "Лазерная техника и лазерные технологии", 12.04.02 "Опготехника", 12.04.05 "Лазерная техника и лазерные технологии"
81. Творогов Сергей "Sage: строим полиномы Цернике", <https://sergeitvorogov.ru/archives/2376>
82. Zernike F *Physica* **1** 689 (1934)
83. Позняк Э Г, Шикин Е В *Дифференциальная геометрия: первое знакомство* (М.: Изд-во МГУ, 1990)
84. Кузнецова Е В *Строительная механика. Изгиб пластин* (Пермь: Пермский гос. технический ун-т, 2006) Учебно-методическое пособие
85. Погорелов А В *Дифференциальная геометрия* (М.: Наука, 1974)
86. Machado G, Favier D, Chagnon G *Exp. Mech.* **52** 865 (2012)
87. Shary P A *Math. Geol.* **27** 373 (1995)
88. Shary P A, Sharaya L S, Mitusov A V *Geoderma* **107** 1 (2002)
89. Florinsky I V *Prog. Phys. Geogr. Earth Environment* **41** 723 (2017)
90. Mynatt I, Bergbauer S, Pollard D D *J. Struct. Geol.* **29** 1256 (2007)

91. Радзевич С П *Формообразование поверхностей деталей (Основы теории)* (Киев: Растан, 2001)
92. Пономарев Б Б, Нгуен Ши Хьен *Вестн. Иркутского гос. технического ун-та* **22** (4) 62 (2018)
93. Нгуен Ши Хьен *Новая наука: современное состояние и пути развития* (12-4) 99 (2016)
94. Pellis D, Pottmann H, in *Advances in Architectural Geometry 2018* (Eds L Hesselgren) (Vienna: Klein Publ. GmbH, 2018) p. 34
95. R-Optics, <https://r-optics.ru/product/analizator-perednego-segmenta-glaza-pentacam-5002>
96. Грачев А В, Мухамедиев Ш А, Николаев В А *Russ. J. Earth Sci.* **2** (1) RJE00034 (2000)
97. Pezzulla M et al. *Soft Matter* **12** 4435 (2016)
98. Wang H, Nilsen E T, Upmanyu M J. *R. Soc. Interface* **17** 20190751 (2020)
99. Seffen K A, Maurini C J. *Mech. Phys. Solids* **61** 190 (2013)
100. Fernandes A, Maurini C, Vidoli S *Int. J. Solids Struct.* **47** 1449 (2010)
101. Hamouche W et al. *Meccanica* **51** 2305 (2016)
102. Hamouche W et al. *Proc. R. Soc. Lond. A* **473** 20170364 (2017)
103. Pike R J *Int. J. Machine Tools Manuf.* **41** 1881 (2001)
104. Pike R J *Prof. Geogr.* **53** 263 (2001)
105. Степаненко В А, Охоткин К Г, Захаров Ю В *Дифференциальная геометрия Ч. 1 Методические указания по курсу "Математический анализ" для студентов физического факультета и межвузовского инженерно-физического отделения* (Красноярск: Красноярский государственный ун-т, 2000); <http://sib-sauktf.ru/courses/DiffGeom/>
106. Florinsky I V *Int. J. Geogr. Inf. Sci.* **16** 475 (2002)
107. Mitášová H, Mitáš L *Math. Geol.* **25** 641 (1993)
108. Favache A et al. *Rev. Sci. Instrum.* **87** 015002 (2016)
109. Djuzhev N A et al. *Proc. SPIE* **10224** 1022428 (2016)
110. Дедкова А А и др. *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование* **17** (1) 51 (2017)
111. Poelma R H et al. *J. Micromech. Microeng.* **21** 065003 (2011)
112. Laconte J et al. *Microelectron. Eng.* **76** 219 (2004)

Approaches to determining curvature of wafers by their topography

A.A. Dedkova^(1,a), I.V. Florinsky^(2,b), N.A. Djuzhev⁽¹⁾

⁽¹⁾ National Research University of Electronic Technology, pl. Shokina 1, 124498 Zelenograd, Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ Institute of Mathematical Problems of Biology, Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences, ul. Prof. Vitekhicha 1, 142290 Pushchino, Moscow region, Russian Federation

E-mail: ^(a) dedkova@ckp-miet.ru, ^(b) iflor@mail.ru

We discuss the peculiarities of curvature analysis of wafers considering heterogeneity of their topography for quantitative estimation and localization of irregularity, or for subsequent calculations of mechanical stresses. We analyze three approaches to calculating surface curvatures from digital elevation models. The first approach is based on the analysis of wafer surface profiles using polynomial approximation; the calculation is based on the curvature radius determination of a curved line; mechanical stresses are calculated using the Stoney method. The second approach uses the second partial derivatives of an elevation function in the Cartesian or cylindrical coordinate systems to analyze irregular topography and then to calculate mechanical stresses. The third approach considers the entire wafer topography as a two-dimensional elevation matrix and uses the mathematical apparatus of differential geometry and the experience of geomorphometry to determine convex and concave areas of the surface as well as to perform a complete analysis of the surface curvature system. We demonstrate the implementation of those approaches on a wafer like a segment of a sphere and on a complex-shaped wafer.

Keywords: surface, topography, curvature, radius of curvature, deflection, mechanical stresses, deformation, Stoney equation, silicon wafer, optical profilometry, defectiveness, geomorphometry, digital elevation model, DEM

PACS number: 68.35.Gy

Bibliography — 112 references

Received 29 March 2021, revised 5 August 2021

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **192** (7) 754–771 (2022)

Physics – Uspekhi **65** (7) (2022)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2021.10.039076>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2021.10.039076>