

ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕХНИКА

СЕРИЯ 3 МИКРОЭЛЕКТРОНИКА

Научно-технический журнал

Выпуск 3 (175) 2019

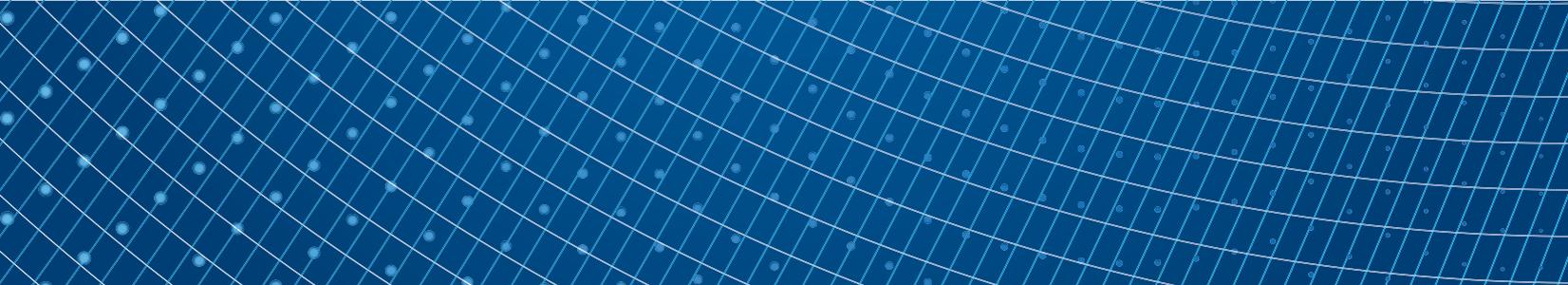
ELECTRONIC ENGINEERING

SERIES 3 MICROELECTRONICS

Scientific & Technical Journal

Issue 3 (175) 2019

Москва, 2019



**«ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕХНИКА.
Серия 3.
МИКРОЭЛЕКТРОНИКА»**

**Редакционный совет
Главный редактор**

Красников Г. Я., академик РАН,
д. т. н.

Члены редакционного совета

Асеев А. Л., академик РАН,
д. ф.-м. н.

Бетелин В. Б., академик РАН,
д. ф.-м. н.

Бокарев В. П., ответственный
секретарь, к. х. н.

Бугаев А. С., академик РАН,
д. ф.-м. н.

Быков В. А., д. т. н.

Галиев Г. Б., д. ф.-м. н.

Горбачев А. А., член-
корреспондент РАН, д. ф.-м. н.

Горнев Е. С., зам. главного редак-
тора, д. т. н.

Грибов Б. Г., член-корреспондент
РАН, д. х. н.

Зайцев Н. А., д. т. н.

Ким А. К., к. т. н.

Критенко М. И., к. т. н.

Петричкович Я. Я., д. т. н.

Сигов А. С., академик РАН,
д. ф.-м. н.

Стемпковский А. Л., академик
РАН, д. т. н.

Чаплыгин Ю. А., академик РАН,
д. т. н.

Шелепин Н. А., зам. главного
редактора, д. т. н.

Эннс В. И., к. т. н.

Адрес редакции

124460 г. Москва, Зеленоград,
1-й Западный проезд, д. 12, стр. 1

+7 495 229-70-43

journal_EEM-3@mikron.ru

www.niime.ru/

zhurnal-mikroelektronika

Журнал издается с 1965 года

Учредитель

АО «Научно-исследовательский
институт молекулярной
электроники»

Слово редактора 4

Физические явления

Д. И. Долженко, Н. М. Романов, В. М. Капралова, Н. Т. Сударь

Влияние гамма-излучения на диэлектрические характеристики
тонких пленок Al_2O_3 5–9

Разработка и конструирование

Е. И. Волкова, Д. В. Гусейнов, С. А. Попков, А. В. Сафонов

Форма концентраторов механических напряжений в задаче
по расчету собственной частоты МЭМС-резонатора 10–14

С. В. Волобуев, В. Г. Рябцев

Архитектура встроенных средств самотестирования микросхем
памяти статического типа 15–20

В. В. Благодатов, А. С. Кравцов, А. В. Нуйкин

Нейронная сеть для SCA blinded key RSA реализации 21–24

Процессы и технология

А. А. Конарев, Д. А. Варламов, Б. Г. Грибов

Получение концентрата тетраметиламмония гидроксида
мембранным электролизом раствора хлорида
тетраметиламмония 25–37

С. И. Янович

Формирование кристаллов гидратов фосфониевых соединений
при анизотропном травлении поликристаллического кремния
в галогенсодержащей плазме 38–42

Математическое моделирование

А. Г. Итальянцев, В. С. Константинов

Расчет термодинамических потенциалов орторомбической фазы
в оксиде гафния в зависимости от температуры и давления 43–50

С. В. Гаврилов, М. А. Заплетина

Анализ клеточно-автоматных алгоритмов решения задач
размещения и трассировки 51–60

Экономика и организация производства

В. Н. Панасюк, Д. С. Шипицин, А. Л. Панкратов, А. Н. Королева

Проблемы и задачи развития системы менеджмента качества
процессов проектирования СБИС 61–66

Журнал включен Всероссийской аттестационной комиссией (ВАК)

в число изданий, рекомендованных для публикации статей соискателей
ученых степеней кандидата и доктора наук №1969

**“ELECTRONIC ENGINEERING.
Series 3.
MICROELECTRONICS”**

**Editorial Council
Chief Editor**

G. Ya. Krasnikov,
Full Member of the RAS, Sc. D.

**The Members
of Editorial Council**

Aseev A. L., Full Member of the RAS,
Sc. D.

Betelin V. B.,
Full Member of the RAS, Sc. D.

Bokarev V. P., Responsible
Secretary, Ph.D.

Bugaev A. S.,
Full Member of the RAS, Sc. D.

Bykov V. A., Sc. D.

Galiev G. B., Sc. D.

Gorbatsevich A. A., Corresponding
Member of the RAS, Sc. D.

Gornev E. S., Deputy Chief Editor,
Sc. D.

Gribov B. G., Corresponding Member
of the RAS, Sc. D.

Zaitsev N. A., Sc. D.

Kim A. K., Ph.D.

Kritenko M. I., Ph.D.

Petrichkovich Ya. Ya., Sc. D.

Sigov A. S., Full Member of the RAS,
Sc. D.

Stempkovskiy A. L., Full Member of
the RAS, Sc. D.

Chaplygin Yu. A.,
Full Member of the RAS, Sc. D.

Shelepin N. A.,
Deputy Chief Editor, Sc. D.

Enns V. I., Ph.D.

Editorial Staff Address

1-st Zapadny pr-d 12, str. 1.
Zelenograd, Moscow,
124460, Russian Federation

+7 495 229-70-43

journal_EEM-3@mikron.ru

www.niime.ru/

zhurnal-mikroelektronika

The journal is published since 1965

Founder

“Molecular Electronics Research
Institute” Stock Company

Editor’s Column 4

Physical Phenomena

D. I. Dolzhenko, N. M. Romanov, V. M. Kapralova, N. T. Sudar
Effect of Gamma Radiation on Dielectric Characteristics
of Al₂O₃ Thin Films 5–9

Development and Designing

E. I. Volkova, D. V. Guseinov, S. A. Popkov, A. V. Safonov
Shape of Mechanical Stress Concentrators in the Problem
of Calculation MEMS-Resonator Eigenfrequency 10–14

S. V. Volobuev, V. G. Ryabtsev
Architecture Built-In Self Test Memory Chips of Static Type 15–20

V. V. Blagodatov, A. S. Kravtsov, A. V. Nuykin
Neural network in SCA blinded key RSA implementation 21–24

Processes and Technology

A. A. Konarev, D. A. Varlamov, B. G. Gribov
Production of Tetramethylammonium Hydroxide Concentrate
by Means of Membrane Electrolysis of Tetramethylammonium
Chloride Solution 25–37

S. I. Yanovich
Phosphonium Hydrates Crystals Growth After Anisotropic Halogen
Containing Plasma Etching of Polycrystalline Silicon 38–42

Mathematical Simulation

A. G. Italyantsev, V. S. Konstantinov
Calculations of Temperature and Pressure Dependences
of Thermodynamical Potentials of Orthorhombic Phase in Hafnia 43–50

S. V. Gavrilov, M. A. Zapletina
The Analysis of Cellular Automata Algorithms for Placement
and Routing Tasks 51–60

Economy and Organization of Production

V. N. Panasyuk, D. S. Shipitsin, A. L. Pankratov, A. N. Koroleva
Problems and Tasks of Development of The System of Management
of Quality of Processes of Designing VLSI 61–66

The journal has included in the number of publications recommended for
publication of articles by applicants for academic degrees of candidate and
doctor of Sciences №1969 by the all-Russian attestation Commission (HAC)

УВАЖАЕМЫЕ ЧИТАТЕЛИ!

Перед вами очередной, 175-й, выпуск научно-технического издания «Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника».

В данном номере сделан акцент на таких ключевых разделах, как «Физические явления», «Разработка и конструирование», «Процессы и технология», «Математическое моделирование», «Экономика и организация производства».

Выпуск журнала представлен девятью оригинальными статьями, посвященными результатам актуальных научных исследований.

Номер открывается разделом «Физические явления», в котором представлена работа с анализом процессов, происходящих в тонких пленках Al_2O_3 при их облучении гамма-квантами, влияющих на значение диэлектрической проницаемости и изменение тангенса диэлектрических потерь.

В следующем разделе «Разработка и конструирование» проведено исследование резонатора МЭМС-датчика в условиях его топологической модификации – создания в его конструкции участков с механическими концентраторами напряжений различной формы. Также в данном разделе предложены принципы построения архитектуры встроенных средств самотестирования микросхем памяти статического типа. В заключительной статье раздела представлены результаты применения машинного обучения для анализа электромагнитного излучения криптографической микросхемы с целью дальнейшей защиты от атак.

В следующем разделе «Процессы и технология» исследован процесс мембранного электролиза водного раствора хлорида тетраметиламмония для синтеза концентрата тетраметиламмония гидроксида. Также в данном разделе рассмотрен эффект образования кристаллов гидратов фосфониевых соединений после анизотропного травления поликристаллического или эпитаксиального кремния в галогеносодержащей плазме и предложены меры по их исключению.



Следующий раздел «Математическое моделирование» представлен результатами теоретических расчетов термодинамических потенциалов орторомбической, моноклинной и тетрагональной фаз оксида гафния. Кроме того, в разделе предпринята попытка систематизировать и адаптировать к размещению логических элементов и трассировки межсоединений СБИС современный исследовательский опыт, касающийся классических и неклассических клеточно-автоматных моделей, разработанных для решения задач поиска кратчайшего пути и размещения логических элементов.

В заключительном блоке «Экономика и организация производства» рассмотрены особенности процессов верификации цифровых оригиналов СБИС на основании практического опыта реализации базовых технологий на отечественной производственной площадке.

Редакция журнала нацелена на активное привлечение к сотрудничеству как именитых авторов, так и талантливых начинающих ученых не только из Москвы, и других регионов России, но и из стран ближнего и дальнего зарубежья.

Приглашаем всех заинтересованных специалистов к сотрудничеству!

С уважением,
главный редактор журнала, академик РАН

Г. Я. Красников

Влияние гамма-излучения на диэлектрические характеристики тонких пленок Al_2O_3

► Д. И. Долженко¹, Н. М. Романов^{1, 2}, В. М. Капралова¹, Н. Т. Сударь¹

¹ СПбПУ, ²АО «Светлана-Полупроводники»

Были изучены диэлектрические характеристики тонких пленок Al_2O_3 после облучения гамма-квантами от цезиевых источников с энергией 661,7 кэВ. Максимально поглощенные дозы для исследуемых образцов составили $\sim 10^8$ рад. Тонкие диэлектрические пленки Al_2O_3 толщиной 27 ± 3 нм были получены посредством метода атомно-слоевого осаждения. Исследована динамика изменений диэлектрической проницаемости и тангенса диэлектрических потерь. При дозах облучения до 10^8 рад включительно диэлектрическая проницаемость Al_2O_3 остается практически неизменной. При дозах 10^8 рад тангенс диэлектрических потерь возрастает для измерений, выполненных на частоте 1000 кГц. В работе проанализированы процессы, происходящие при облучении гамма-квантами и влияющие на значение диэлектрической проницаемости и изменения тангенса диэлектрических потерь.

Effect of Gamma Radiation on Dielectric Characteristics of Al_2O_3 Thin Films

D. I. Dolzhenko¹, N. M. Romanov^{1, 2}, V. M. Kapralova¹, N. T. Sudar¹

¹SPbPU, ²Svetlana-Semiconductors, SC

Dielectric characteristics of Al_2O_3 thin films after irradiation with gamma quanta from cesium sources with an energy of 661,7 keV were studied. The maximum absorbed doses for the studied samples were $\sim 10^8$ Rad. Dielectric Al_2O_3 thin films with a thickness of 27 ± 3 nm were obtained by atomic layer deposition. The dynamics of changes in dielectric constant and dielectric loss tangent are investigated. With doses up to 10^8 Rad inclusively, the dielectric constant of Al_2O_3 remains almost unchanged. At doses of 10^8 Rad, the dielectric loss tangent increases for measurements performed at a frequency of 1000 kHz. The paper analyzes the processes occurring during irradiation with gamma quanta and affecting the value of dielectric constant and changes in the tangent of dielectric loss.

ВВЕДЕНИЕ

В современной полупроводниковой планарной технологии наблюдается тенденция к уменьшению геометрических размеров единичных транзисторов и увеличению числа элементов на кристалле. Данная тенденция получила название эффект масштабирования (закон Мура). Эффект масштабирования вызывает сокращение эффективной толщины подзатворного диэлектрика [1] и, как следствие этого, увеличение тока затвора. Таким образом, лимитирующим фактором использования классического материала полупроводниковой технологии – диоксида кремния (SiO_2) – является туннельная инжекция носителей заряда сквозь этот диэлектрик [1]. Ток утечки становится заметным при толщине диоксида

кремния менее 3–4, нм и при дальнейшем уменьшении толщины SiO_2 он возрастает экспоненциально быстро [2], что приводит к ухудшению стабильности параметров и надежности работы полевого транзистора [2–4].

Возможным решением этой проблемы становится использование диэлектриков с высокой диэлектрической проницаемостью (high-k-диэлектрики) [5]. Один из таких диэлектриков – оксид алюминия (Al_2O_3) – рассматривается в настоящее время как один из самых перспективных кандидатов для замены оксида кремния в устройствах микро- и нанoeлектроники [6]. Отметим также, что пленки Al_2O_3 могут быть получены с помощью метода атомно-слоевого осаждения (АСО). Метод АСО обеспечивает возмож-

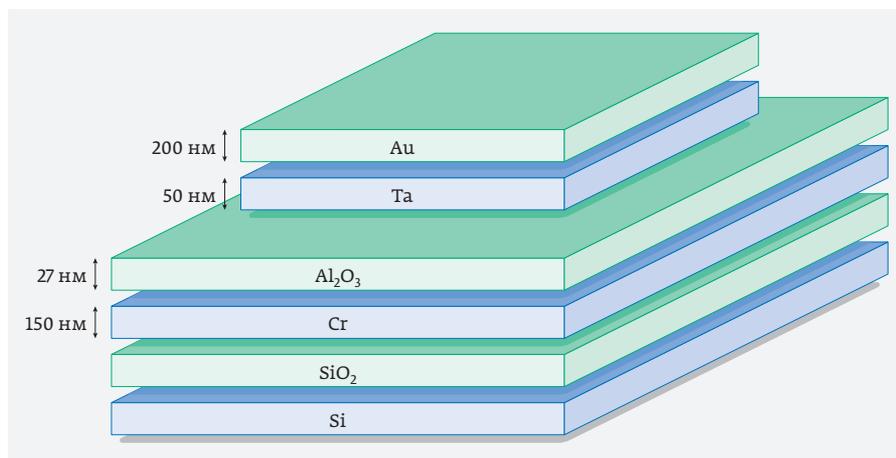


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемой многослойной структуры

ность создания оксидных слоев точно заданной толщины и нанесения их на поверхность со сложным рельефом [7].

Вместе с тем, рассматривая вопрос замены SiO₂ на Al₂O₃, требуется всесторонне изучить вопрос стабильности и надежности приборов, в которых используются тонкие диэлектрические слои из Al₂O₃, изготовленные методом АСО.

Известно, что на стабильность работы полупроводниковых приборов сильно влияют ионизирующие излучения [8]. Причем особо негативное влияние оказывает гамма-излучение, поскольку оно обладает высокой проникающей способностью и характеризуется отсутствием превентивных мер защиты [9].

Известно довольно небольшое число публикаций о влиянии гамма-излучения на электрические и диэлектрические характеристики пленок оксида алюминия. Причем в большинстве из них (см. например [10, 11]), в основном, изучалось влияние гамма-облучения на электропроводность оксидов. Данные же о воздействии гамма-облучения на диэлектрические свойства Al₂O₃ в литературе отсутствуют. Получение таких данных и стало целью настоящей работы.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Объектами исследований являлись многослойные структуры (см. рис. 1), изготовленные по следующей методике. Первоначально на кремниевой пластине Si (100) диаметром 100 мм был сформирован слой SiO₂, на который методом магнетронного напыления наносился слой хрома толщиной ~150 нм, используемый в дальнейшем в качестве одного из электродов. Затем на поверхность

хрома методом АСО наносился слой Al₂O₃ толщиной 27±3 нм. Нанесение слоя оксида алюминия осуществлялось в институте микронэлектронного производства университета им. Лейбница (Ганновер, Германия) на установке SENTECH ALD systems при температуре 500 °С за 500 циклов процесса. Далее с помощью магнетронного напыления и фотолитографии на поверхности пленки Al₂O₃ формировалось большое число дискообразных металлических электродов диаметром 1 мм. Каждый из этих электродов состоял из двух слоев металла. Первый слой толщиной 50 нм был изготовлен из тантала, поверх которого наносился 200-нм слой золота. Таким способом на поверхности кремниевой пластины было сформировано несколько сот миниатюрных плоских конденсаторов (МПК), в которых в качестве диэлектрика использовалась пленка Al₂O₃.

Диэлектрические характеристики МПК, а именно, емкость МПК (С) и тангенс угла диэлектрических потерь (tg δ), измерялись с помощью измерителя иммитанса Е7-20 при амплитуде тестового сигнала 40 мВ в диапазоне частот 25 кГц – 1 МГц. Зная геометрические характеристики МПК и используя формулу для расчета емкости плоского конденсатора, можно было рассчитать диэлектрическую проницаемость пленки Al₂O₃.

Кремниевая пластина со сформированными на ее поверхности МПК подвергалась облучению гамма-квантами с энергией 661,7 кэВ от радионуклидов Цезия-137. Количество источников излучения, их расположение и геометрия камеры обеспечивали однородный поток гамма-квантов. Облучение проводилось в кислородсодержащей квазизамкнутой камере при комнатной температуре. Однородность потока гамма-квантов достигалась за счет использования 84-х источников излучения, с постоянной мощностью поглощенной дозы 1,7 Грей/с по H₂O или 63 рад/с по Si. Так как скорость облучения ν была постоянна и равна 63 рад/с, то суммарную дозу облучения $w_{обл}$ можно вычислить по формуле $w_{обл} = \nu t_{обл}$, где $t_{обл}$ – суммарное время облучения.

Максимальные поглощенные дозы для исследуемых образцов составили ~10⁸ рад (по Si).

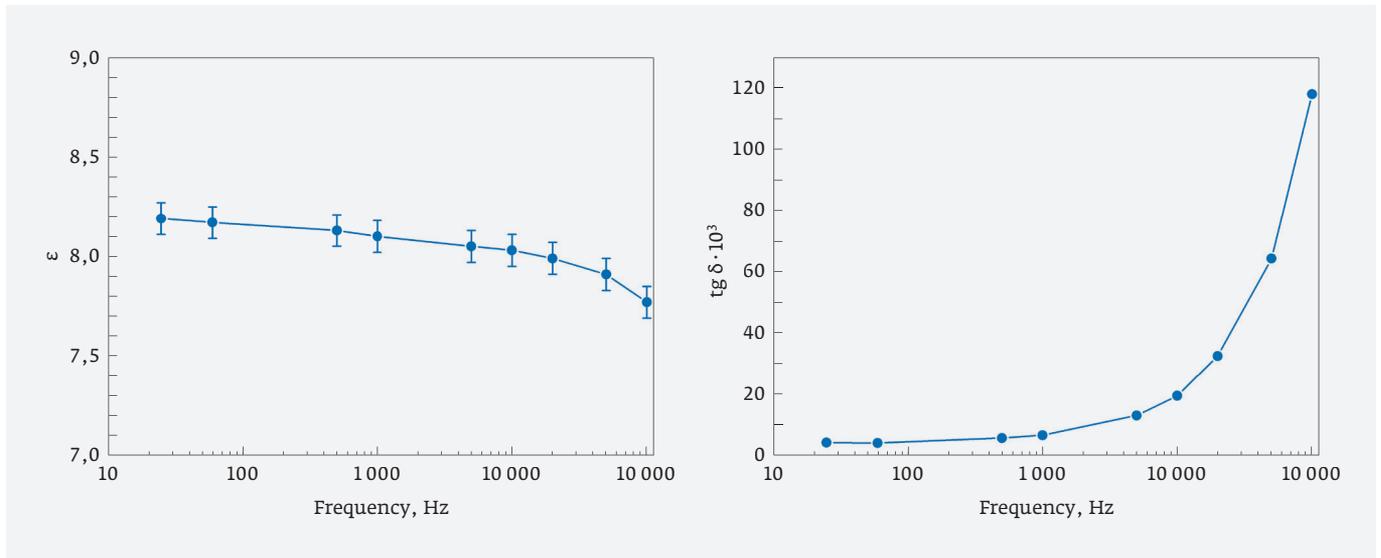


Рис. 2. Частотные зависимости диэлектрической проницаемости (а) и тангенса угла диэлектрических потерь (б) до облучения радионуклидами Цезия-137

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 представлены частотные зависимости диэлектрической проницаемости (а) и тангенса угла диэлектрических потерь (б) исследуемых образцов до их облучения радионуклидами. Видно, что в рассматриваемом частотном диапазоне при увеличении частоты значения ϵ незначительно уменьшаются, а значения $\text{tg } \delta$ возрастают. Причем на частотах менее 1000 Гц $\text{tg } \delta \leq 0,01$ и слабо зависит от частоты. На более высоких частотах наблюдается быстрое увеличение $\text{tg } \delta$.

Было установлено, что после облучения оксида алюминия радионуклидами Цезия-137, вплоть до дозы 10^8 рад (Si), диэлектрическая проницаемость оставалась практически неизменной во всем частотном диапазоне. Однако $\text{tg } \delta$ демонстрировал неравномерный рост относительно суммарной дозы облучения.

На рис. 3 представлена зависимость $\text{tg } \delta$ от суммарной дозы облучения, величина которой определялась временем экспозиции. Для уменьшения времени измерений они проводились только на частоте 1 кГц. Каждая точка на представленном графике определялась как средняя величина, на основании измерений значений $\text{tg } \delta$ 18 образцов.

Видно, что облучение до доз порядка 10^6 рад (Si) не вызывает заметного изменения значения $\text{tg } \delta$, которое составляет $\sim 0,006$. При дозах более 10^6 рад (Si) значения $\text{tg } \delta$ начинают возрастать, но при дозах более $3 \cdot 10^7$ рад (Si) значение $\text{tg } \delta$ стабилизируется и составляет $\sim 0,0075$.

Можно полагать, что возрастание $\text{tg } \delta$ при увеличении дозы обусловлено возрастанием проводимости Al_2O_3 при облучении.

Поскольку оксид алюминия характеризуется запрещенной зоной E_g шириной 5,1–8,8 эВ [12], то в обычных условиях концентрация электронов в зоне проводимости невысока и, как следствие этого, его проводимость незначительна. Диэлектрические потери, обусловленные сквозной про-

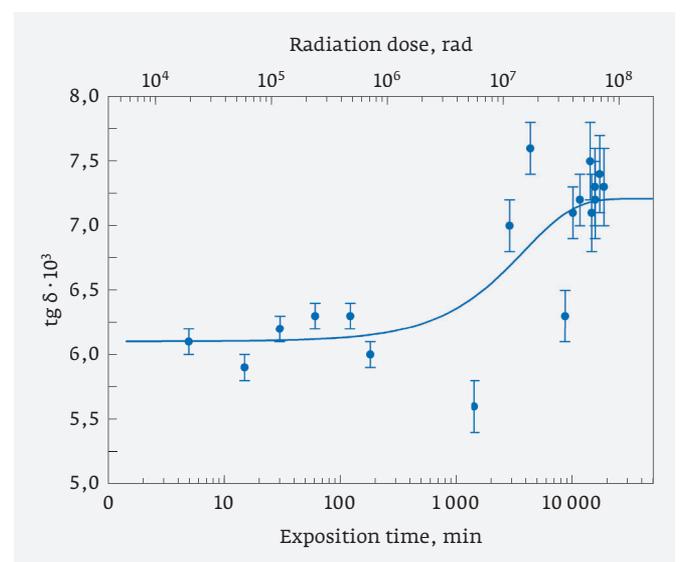


Рис. 3. График зависимости тангенса угла диэлектрических потерь от времени облучения оксида алюминия при средней скорости облучения 63 рад/с

водимостью σ на частоте f , определяются соотношением [13]

$$\operatorname{tg}\delta = \frac{\sigma}{2\pi f \epsilon \epsilon_0},$$

где $\epsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м. Из соотношения (1) следует, что тангенс диэлектрических потерь прямо пропорционален удельной проводимости. При $f = 1000$ Гц и $\operatorname{tg}\delta = 0,006$ получим $\sigma \approx 2,7 \cdot 10^{-11}$ См/см, что соответствует представленным в работе [13] данным о проводимости пленок Al_2O_3 , изготовленных методом АСО.

При облучении Al_2O_3 гамма-квантами происходит переброс электронов из валентной зоны в зону проводимости, вследствие чего проводимость оксидной пленки возрастает, что и приводит к возрастанию $\operatorname{tg}\delta$. Для $\operatorname{tg}\delta = 0,0075$, используя соотношение (1), получим $\sigma \approx 3,4 \cdot 10^{-11}$ См/см.

Переброшенные в зону проводимости электроны являются термодинамически неравновесными, и при постоянной скорости облучения их концентрация δn в зоне проводимости возрастает [15] согласно выражению:

$$\delta n = \delta n_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right) \right],$$

где t – время облучения, δn_0 – стационарная концентрация неравновесных электронов, устанавливающаяся после длительного облучения образцов и зависящая от скорости облучения, и τ_n – характерное время, определяемое условиями облучения,

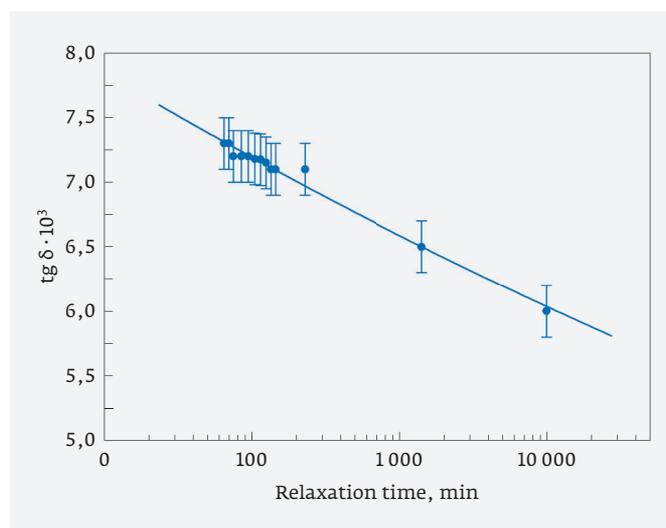


Рис. 4. Зависимость средних значений тангенса угла диэлектрических потерь от времени, прошедшего после облучения дозой $2,03 \cdot 10^6$ Гр

физической природой взаимодействия излучения с оксидом алюминия и его электронной структурой. Поэтому факт стабилизации значения $\operatorname{tg}\delta$ при больших дозах облучения и при постоянной скорости облучения можно объяснить стабилизацией концентрации неравновесных электронов в зоне проводимости при временах $t \gg \tau_n$.

После прекращения облучения образцов Al_2O_3 наблюдалось постепенное уменьшение значения $\operatorname{tg}\delta$. На рис. 4 представлена типичная зависимость $\operatorname{tg}\delta(t)$, измеренная после облучения дозой $2,03 \cdot 10^6$ Гр. Видно, что в координатах $\operatorname{tg}\delta(\lg t)$ она близка к линейной. Время, в течение которого величина $\operatorname{tg}\delta$ релаксирует к своему исходному значению, составляет $\sim 10^6$ с. Однако известно, что после прекращения облучения релаксация δn к термодинамически равновесному значению $\delta n = 0$, обусловленная рекомбинацией электронов проводимости со свободными дырками, происходит экспоненциально быстро [15].

Несоответствие наблюдаемого релаксационного процесса экспоненциальному закону, как мы полагаем, связано с участием в процессе релаксации локальных состояний (ловушек), расположенных в запрещенной зоне оксида алюминия. К сожалению, данные о концентрации и глубине ловушек в пленках Al_2O_3 , полученных методом АСО, в литературе отсутствуют. Однако известно, что в аморфных пленках Al_2O_3 , полученных методом анодного окисления, ниже дна зоны проводимости существует широкий спектр локальных состояний, причем максимум его соответствует уровню 1,2 эВ. Полная концентрация электронных ловушек достигает $\sim 5 \cdot 10^{17}$ см⁻³ [16]. Очевидно, что при облучении пленки Al_2O_3 гамма-квантами будут происходить переходы электронов не только в зону проводимости, но и заполнятся электронные ловушки. Поэтому после прекращения облучения процесс релаксации неравновесных электронных состояний будет определяться как переходами типа зона-зона, так и частичным опустошением ловушечных состояний до тех пор, пока концентрация электронов на ловушках не станет термодинамически равновесной. Полагая, что опустошение ловушек, то есть переход их в зону проводимости, носит термоактивный характер, константу скорости k_E этого процесса можно записать в виде

$$k_E = \tau_0 \exp\left(\frac{E_t}{k_B T}\right), \quad (2)$$

где T – температура, k_B – постоянная Больцмана, E_t – глубина ловушек, $\tau_0 = 10^{-13}$ с⁻¹. Из соотношения (2) сле-

дует, что характерное время удержания электрона в ловушке, равное $1/k_E$, при $T=300$ К и $E_t=1,2$ эВ составит $\sim 10^7$ с, что согласуется со временем релаксации $\text{tg } \delta$ к первоначальному значению. Таким образом, концентрация электронов в зоне проводимости диэлектрика будет превышать термодинамически равновесное значение в течение всего релаксационного процесса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе получены данные о диэлектрических свойствах пленок оксида алюминия, изготовленных методом АСО, и влиянии на них гамма-облучения.

Установлено, что при дозах облучения до 10^8 рад (Si) включительно диэлектрическая проницаемость Al_2O_3 остается практически неизменной, а тангенс диэлектрических потерь возрастает с $(6,0 \pm 0,1) \cdot 10^{-3}$ до $(7,2 \pm 0,3) \cdot 10^{-3}$ (на частоте 1000 кГц). Причиной увеличения $\text{tg } \delta$ при гамма-облучении, как можно полагать, является возрастание концентрации неравновесных электронов в зоне проводимости до определенного равновесного значения, зависящего от скорости облучения.

После прекращения облучения, вне зависимости от дозы, наблюдается постепенное уменьшение величины $\text{tg } \delta$ до первоначального значения. Его причиной является опустошение ловушечных состояний, обусловленное переходом электронов из ловушек в зону проводимости, и, как следствие этого, повышение (по сравнению с термодинамически равновесным значением) концентрации электронов в зоне проводимости.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Tennant D. M., Timp G. L., Ocola L. E., Green M., Sorsch T., Kornblit A., Klemens F., Kleiman R., Kim Y., Timp W.** Progress toward a 30 nm silicon metaloxide-semiconductor gate technology. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 1999, vol. 17, no. 6, pp. 3158-3163.
2. **High-k Gate Dielectrics/Michel Houssa.** – CRC Press, 2004. 601 p. (Series in Material Science and Engineering). ISBN0750309067.
3. **Green M. L., Gusev E. P., Degraeve R., Garfunkel E. L.** Ultrathin (< 4 nm) SiO_2 and Si-O-N gate dielectric layers for silicon microelectronics: Understanding the processing, structure, and physical and electrical limits.
4. **Dennard R. H., Gaensslen F. H., Yu H.-N., Rideout V. L., Bassous E., LeBlanc A. R.** Design of ion-implanted MOSFETs with very small device dimensions. *IEEEJ. Solid State Circuits*, 1974, vol. 9, no. 5, pp. 256-268.
5. **Wilk G. D., Wallace R. M., Anthony J. M.** High-k gate dielectrics: Current status and materials properties. *Journal of Applied Physics*, 2001, vol. 89, no.10, pp. 5243-5272.
6. **Pore V., Rahtu A., Leskela M. et al.** Atomic layer deposition of the titanium dioxide thin film from tetraethoxytitanium and water // *Chem. Vapor. Deposition*, 2004, vol. 10, no 3, p. 143.
7. **Путконен М., Тузовский В.** Новые применения атомно-слоевого осаждения (АСО) // *НАНОИНДУСТРИЯ*. 2010. № 5. С. 18-21.
8. **Claude Leroy and Pier-Giorgio Rancoita** Reports on Progress in Physics, vol. 70, no 4. Particle interaction and displacement damage in silicon devices operated in radiation environments.
9. **Oldham T. R., McLean F. B.** Total ionizing dose effects in MOS oxides and devices // *IEEE Trans. Nuclear Physics*, 2003, vol. 50, no 3, pp. 483-99.
10. **Kaya S., Yilmaz E.** Influences of Co-60 gamma-ray irradiation on electrical characteristics of Al_2O_3 MOS capacitors. *Journal of Radio analytical and Nuclear Chemistry*, 2014, vol. 302, pp. 425-431.
11. **Романов Н. М., Мокрушина С. А.** Влияние гамма-облучения на МДП-структуры с тонким оксидом Al_2O_3 // *Перспективные материалы*. 2018. № 2. С. 17-24.
12. **Конюшенко М. А., Филатова Е. О., Конашук А. С., Нелюбов А. В., Шулаков А. С.** Экспериментальное определение положения потолка валентной зоны в $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ и $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ // *Письма в ЖТФ*. 2015. Т.41. Вып. 19. С. 8-15.
13. **Борисова М. Э., Койков С. Н.** Физика диэлектриков. – Л.: Изд. Ленинградского университета, 1979. 240 с.
14. **Борисова Т. М., Кастро Р. А.** Исследование диэлектрических свойств тонких пленок оксида алюминия, выращенных методом молекулярного напыления // *ТРУДЫ МФТИ*. 2013. Т. 5. № 1. С. 21-24.
15. **Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г.** Физика полупроводников. – М.: Наука, 1977. 672 с.
16. **Одынец Л. Л., Орлов В. М.** Анодные оксидные пленки. – Л.: Наука, 1990. 200 с.

Форма концентраторов механических напряжений в задаче по расчету собственной частоты МЭМС-резонатора

► Е. И. Волкова^{1, 2}, Д. В. Гусейнов¹, С. А. Попков², А. В. Сафонов²

¹ ННГУ им. Н. И. Лобачевского

² Филиал ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» «НИИИС им. Ю. Е. Седакова»

Проведено исследование резонатора МЭМС-датчика в условиях его топологической модификации – создания в его конструкции участков с механическими концентраторами напряжений различной формы. Приводятся результаты моделирования как самих напряженных состояний, созданных концентраторами, так и расчет собственной частоты резонатора в зависимости от формы и геометрических размеров концентраторов. Среди представленных форм концентраторов напряжений был выявлен тип, который наиболее эффективен для прецизионного управления частотой резонатора без изменения габаритных размеров его исходной конструкции.

Shape of Mechanical Stress Concentrators in the Problem of Calculation MEMS-Resonator Eigenfrequency

C. I. Volkova^{1, 2}, D. V. Guseinov¹, S. A. Popkov², A. V. Safonov²

¹ UNN

² Branch of FSUE «RFNC-VNIIEF» «NIIS named after Yu. Ye. Sedakov»

A study of the MEMS-sensor resonator under the conditions of its topological modification – the creation in its design areas with mechanical stress concentrators of different shapes. The result of modeling both the stress states created by the concentrators and the calculation of the resonator eigenfrequency depending on the shape and geometric dimensions of the concentrators are presented. Among the presented forms of stress concentrators, the type that is most effective for precision control of the resonator frequency without changing the overall dimensions of its original design was identified.

ВВЕДЕНИЕ

Кремний на протяжении десятилетий – ключевой материал микро- и нанoeлектроники. Своими свойствами он привлекает особое внимание и как основной конструкционный материал в микросистемной технике (далее – МСТ). Следовательно, законы, применимые в механике твердых тел на макроуровне, могут быть соотнесены и применимы в микрометровом масштабе, что успешно продемонстрировано в [1].

Междисциплинарность микросистемной техники как динамично развивающегося научного направления позволяет оперировать в терминах и понятиях той области науки, физические законы которой были взяты за основу. В результате, аналитические решения и приемы, унаследованные из раздела механики, в частности сопротивления материалов [2], дают прочный базис при рассмотре-

нии задачи о напряженных состояниях и способах управления ими в элементах конструкции первичного преобразователя микроэлектромеханического (далее – МЭМС) датчика.

Основной интерес в настоящей работе сфокусирован на микромеханическом резонаторе как основном элементе конструкции чувствительного элемента (далее – ЧЭ) МЭМС-датчика [3], и на способе прецизионной подгонки его собственной частоты как основного параметра без изменения линейных размеров при условии его топологической модификации. В качестве инструмента модификации рассматриваются концентраторы механических напряжений различных форм (далее – концентраторы напряжений). Актуальность подобной задачи обоснована тем, что МЭМС-датчики резонансного типа на сегодняшний день получили широкое распространение как наиболее надежные и высоко-

точные датчики, входящие в состав инерциальных систем [4] различного рода приборов.

КОНЦЕНТРАТОРЫ НАПРЯЖЕНИЙ В МИКРОМЕХАНИЧЕСКОМ РЕЗОНАТОРЕ

Известно, что при проектировании МЭМС-датчиков элементы конструкции, входящие в состав ЧЭ, на различных участках самой конструкции испытывают механические напряжения. Так, согласно теории упругости [5], концентрация напряжений – явление сосредоточения больших напряжений на малых участках, прилегающих к местам с различного рода изменением формы поверхности или сечения упругого тела, а также в зонах контакта деталей. Область пространства, в которой возникают эти напряжения, называется концентратором напряжений.

Задача Кирша является характерным примером того, что наличие резких изменений формы тела (малые отверстия, выточки, канавки и др.) приводит к значительным местным напряжениям, быстро затухающим по мере удаления от геометрических концентраторов напряжений [2]. Локальные напряжения принято характеризовать [6] коэффициентом концентрации напряжений – K , представляющим собой отношение наибольшего локального напряжения (σ_{\max}) к номинальному напряжению ($\sigma_{\text{ном}}$), то есть к напряжению, вычисленному в предположении отсутствия концентратора:

$$K = \sigma_{\max} / \sigma_{\text{ном}}$$

Ранее в [7] была рассмотрена задача по использованию концентраторов напряжений в конструкции микромеханического резонатора (далее – резонатора), представляющих собой простые канавки цилиндрической формы с фиксированным радиусом, постоянным по высоте (рис. 1). В работе было предложено исследовать вклад от концентраторов в частотные характеристики. Анализ проведенных расчетов показал, что изменение радиуса канавок в 2–3 раза дает изменение по частоте до 20%, что является существенным при разработке конструкции резонатора МЭМС-датчика.

Исследования [7] подтолкнули к рассмотрению задачи для случая с концентраторами напряжений различной формы и вклада этих форм в характеристики резонатора, а также описанию и характеристике самих напряжений, возникающих в нем с помощью коэффициента концентрации напряжений.

НАХОЖДЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТА КОНЦЕНТРАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ, СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ FEM-АНАЛИЗА С АНАЛИТИЧЕСКИМ РЕШЕНИЕМ

Исходя из проделанного поиска «устойчивых» форм концентраторов напряжений были выбраны следующие типы (рис. 2).

Таким образом, было исследовано семь типов форм концентраторов напряжений в резонаторе с вариацией геометрических размеров, согласно рис. 3. Шаг изменения геометрических параметров составил 1 мкм для всех типов концентраторов.

С целью оценки и сопоставления аналитического расчета коэффициента концентрации напряжений с результатами FEM-анализа, выполненного в Comsol Multiphysics, был взят классический пример – одностороннее растяжение пластины с малым круговым отверстием (задача Кирша). Пластина с малым отверстием радиуса (a) в центральной части подвергается равномерному растяжению напряжениями (σ_0) в направлении оси x (рис. 4.), следовательно, тензор напряжений в полярной системе координат можно записать как [2]:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{rr} &= \frac{\sigma_0}{2} \left(1 - \frac{a^2}{r^2} \right) + \frac{\sigma_0}{2} \left(1 - 4 \frac{a^2}{r^2} + 3 \frac{a^4}{r^4} \right) \cos 2\theta, \\ \sigma_{\theta\theta} &= \frac{\sigma_0}{2} \left(1 + \frac{a^2}{r^2} \right) - \frac{\sigma_0}{2} \left(1 + 3 \frac{a^4}{r^4} \right) \cos 2\theta, \\ \sigma_{r\theta} &= -\frac{\sigma_0}{2} \left(1 + 2 \frac{a^2}{r^2} - 3 \frac{a^4}{r^4} \right) \sin 2\theta. \end{aligned} \right\}$$

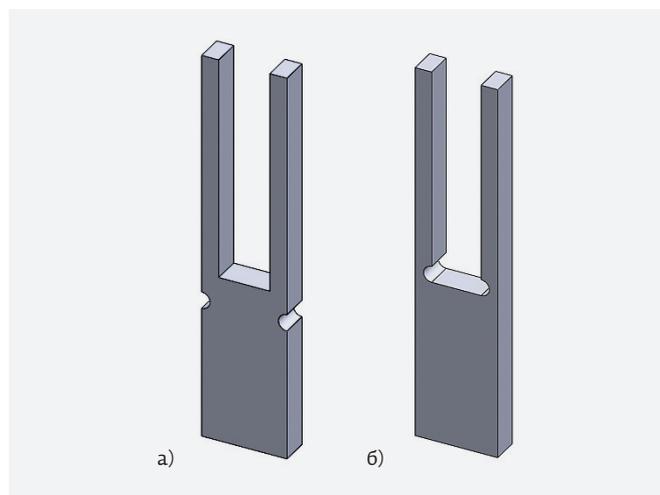


Рис. 1. Область расположения концентраторов напряжений на резонаторе камертонного типа: а – область перемычки резонатора [8], б – область заделки струн [9]

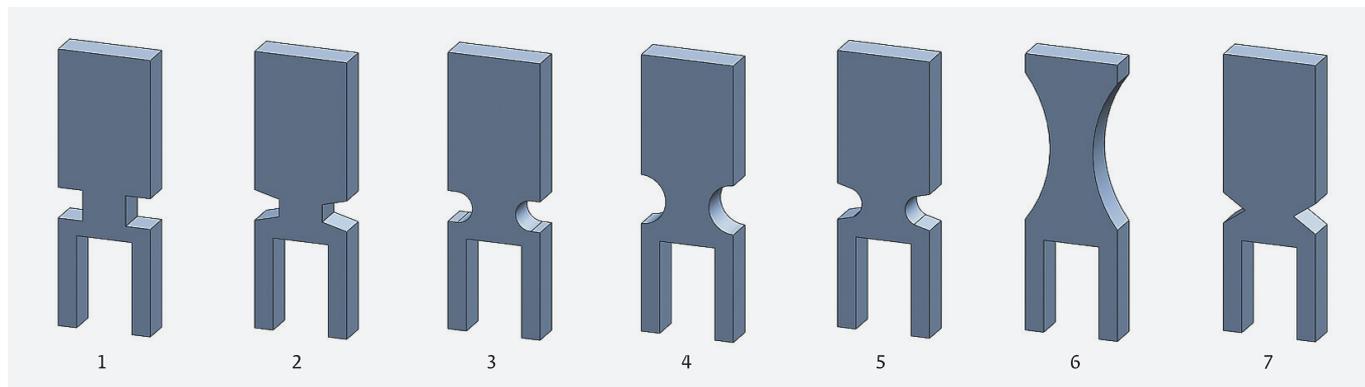


Рис. 2. Типы форм концентраторов напряжений в области перемычки резонатора: 1 – квадратная форма концентратора, 2 – трапецевидная форма, 3 – U-образная форма, 4 – цилиндрическая форма, 5 – V-образная форма с цилиндрической поверхностью у вершины, 6 – цилиндрическая форма с большим радиусом закругления, 7 – V-образная форма

В точках контура отверстия ($r=a$) соответственно:

$$\sigma_{rr} = \sigma_{r\theta} = 0, \quad \sigma_{\theta\theta} = \sigma_0(1 - 2\cos 2\theta).$$

Согласно [6, 10], $\sigma_{\max} = \sigma_0 = K\sigma_{\text{ном}}$, где $\sigma_{\text{ном}} = \sigma_0 / (D - 2a)$ ввиду конечного значения линейных размеров пластины. Коэффициент концентрации напряжений определяется следующим образом:

$$K = 3,00 - 3,13\left(\frac{2a}{D}\right) + 3,66\left(\frac{2a}{D}\right)^2 - 1,53\left(\frac{2a}{D}\right)^3.$$

Сопоставление результатов расчета коэффициента концентрации напряжений (K) показало хорошее согласие аналитического расчета и FEM-анализа – менее 1% ошибки.

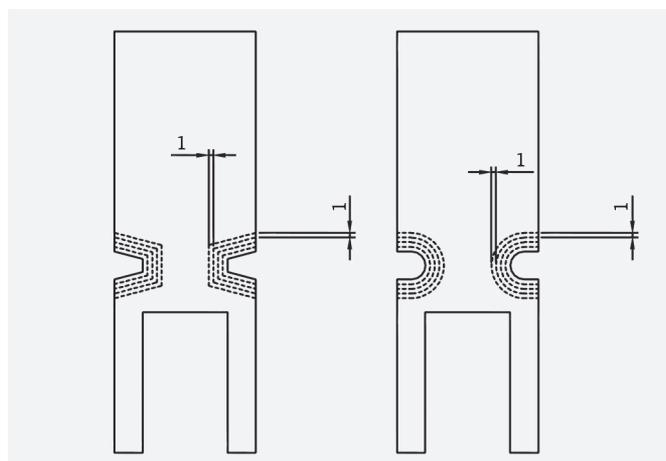


Рис. 3. Принцип изменения геометрического размера концентратора напряжений в резонаторе

Поэтому дальнейшее нахождение величины коэффициента концентрации напряжений для всех типов предложенных резонаторов осуществлялось в Comsol Multiphysics. Результаты проведенного моделирования представлены на рис. 5.

Из представленных зависимостей видно, что для концентраторов напряжений типа – 3, 4, 5 и 6 (присутствует поверхность цилиндрической формы) наблюдаются монотонные функции, которые, за

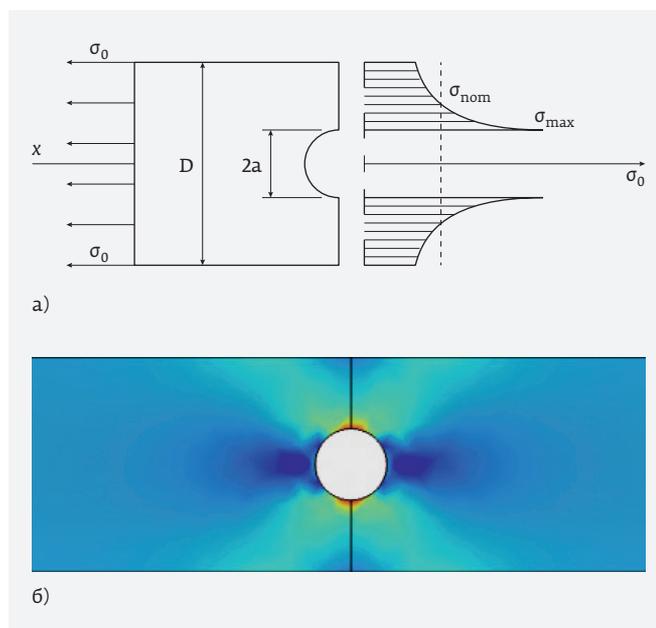


Рис. 4. Распределение напряжений по пластине с малым отверстием в случае однородного растяжения; а – действие напряжений на пластину, б – области локализации напряжений согласно FEM-анализу

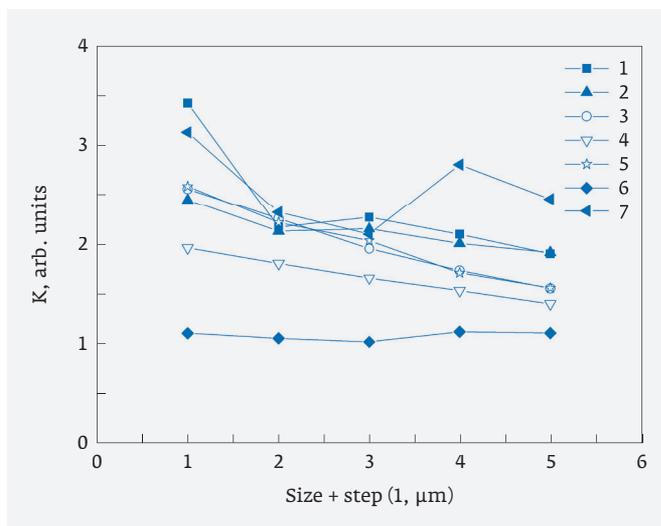


Рис. 5. Зависимость коэффициента концентрации напряжений от формы концентратора и его размера (слева направо по оси абсцисс происходит увеличение геометрических размеров концентраторов напряжений)

исключением 6-го типа, имеют спадающий характер с увеличением размера концентратора. В свою очередь, для концентраторов – 1, 2, 7 зависимости на графике обладают сложным поведением с изменением размера концентратора, что неочевидно, поскольку увеличение размера концентратора происходит линейным образом. Среди рас-

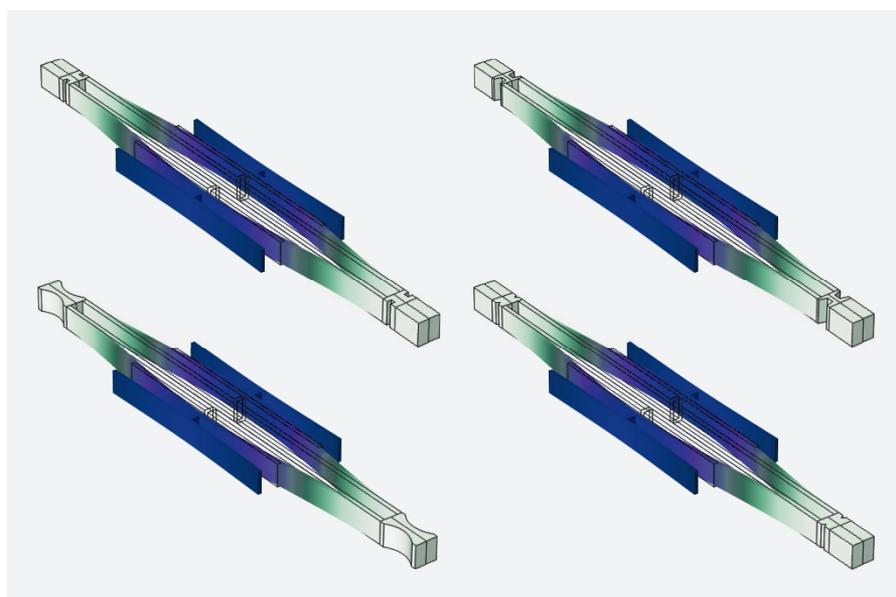


Рис. 6. Первая мода колебаний МЭМС-резонатора с концентраторами напряжений (типы форм – 1, 2, 6, 7)

смотренных типов концентраторов напряжений наиболее предпочтительны концентраторы, в конструкцию которых входит цилиндрическая поверхность – 3-6, поскольку распределение напряжений при цилиндрической форме концентратора происходит более однородно, чем для 1, 2, 7, где они локализованы на внутренних ребрах концентратора. Неоднородность в распределении и сгущение деформаций на отдельных участках МЭМС-резонатора могут приводить к образованию трещин и разломов, что критично для функционирования ЧЭ.

ПРОВЕДЕНИЕ МОДАЛЬНОГО АНАЛИЗА И НАХОЖДЕНИЕ СОБСТВЕННОЙ ЧАСТОТЫ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ФОРМЫ КОНЦЕНТРАТОРОВ НАПРЯЖЕНИЙ

Следующим этапом в проводимых исследованиях стало нахождение собственной частоты МЭМС-резонатора в зависимости от формы концентраторов напряжений, присутствующих в конструкции резонатора, и в зависимости от геометрических размеров самих концентраторов. Нахождение частоты производилось в рамках первой моды колебаний резонатора (рис. 6).

В соответствии с выполненным моделированием были получены следующие частотные зависимости (рис. 7):

Частотные кривые для всех типов форм концентраторов и размеров имеют спадающий характер в сторону увеличения латерального размера самого концентратора, что физически предопределяемо, поскольку происходит уменьшение жесткости заделки струн резонатора.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе были проведены исследования, согласно которым осуществлялась топологическая модификация резонатора МЭМС-датчика с использованием устойчивых форм концентраторов напряжений. Выявлено, что при нахождении собственной частоты резонатора с концентраторами всех рассмотренных форм наблюдается уменьшение частоты с увеличением размеров самих концентраторов. Форма частотных зависимостей для типов 1-5, 7 носит

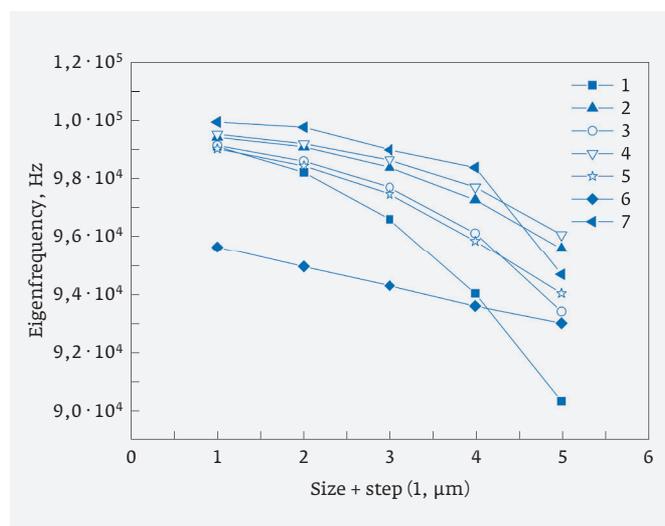


Рис. 7. Зависимость собственной частоты колебания первой моды резонатора от формы концентратора и его размера в отсутствие концентраторов напряжений, $f_0 = 100,89$ kHz

нелинейный характер, при линейных увеличениях размеров концентраторов, для типа б наблюдается линейный вид зависимости. Следовательно, используя 6-ой тип формы механических концентраторов можно добиться прецизионной подгонки частоты резонатора в заданном диапазоне частот. Характеризация локальных напряжений в резонаторе, вызванных применением концентраторов, с помощью коэффициента концентрации напряжений показала неоднозначный характер для разных типов концентраторов. При этом, вне зависимости от формы концентраторов, наблюдается уменьшение собственной частоты при увеличении их размера.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Jones T. B., Nenadic N. G.** Electromechanics and MEMS. – NY: Cambridge university press, 2013. 559 p.
2. **Демидов С. П.** Теория упругости. – М.: Высшая школа, 1979. 389 с.
3. **Вавилов В. Д., Тимошенко С. П., Тимошенко А. С.** Микросистемные датчики физических величин: монография в двух частях. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2018. 550 с.
4. **Ding H., Le X., Ma Y., Xie J.** A biaxial resonant tilt sensor with two-stage microleverage mechanisms // Transducers. 2017. P. 1014–1016.
5. Физическая энциклопедия, Т2 / Д. М. Алексеев, А. М. Балдин, А. М. Бонч-Бруевич [и др.] / Под ред. А. М. Прохорова. – М.: Советская энциклопедия, 1990. 703 с.
6. **Younis W. C., Budynas R. G.** Roark's formulas for stress and strain. – NY: McGraw-Hill, 2002. 852 p.
7. **Волкова Е. И., Попков С. А., Сафонов А. В., Гусейнов Д. В.** Расчет добротности МЭМС-резонатора с учетом вязкого демпфирования при топологической оптимизации его конструкции // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника, 2018. № 4(172). С. 62–67.
8. **Johnson T. H., Wyatt M. R.** Load cell // U. S. Patent № 5,391,844. Feb. 21, 1995.
9. **Kato Y., Ohuye H.** Mechanical oscillator // U. S. Patent № 3,697,789. Oct. 10, 1972.
10. **Pilkey W. D., Pilkey D. F.** Peterson's Stress Concentration Factors. – NY: John Wiley & Sons, 2008. 560 p.

Архитектура встроенных средств самотестирования микросхем памяти статического типа

► С. В. Волобуев, В. Г. Рябцев

ФГБОУ ВО Волгоградский ГАУ

Предложены принципы построения архитектуры встроенных средств самотестирования микросхем памяти статического типа. Генерация программ обеспечивается алгоритмическим генератором, занимающим небольшую площадь кристалла микросхемы. Предлагаются форматы команд и микроопераций, сокращающие объем памяти, необходимой для хранения программ тестов. Применение алгоритмического генератора повышает диагностические свойства формируемых тестов за счет их выполнения без пропусков тактов обращения к тестируемой микросхеме.

Architecture Built-In Self Test Memory Chips of Static Type

S. V. Volobuev, V. G. Ryabtsev

FSBEI HE Volgograd SAU

The principles of construction of architecture of built-in means of self-testing of memory chips of static type are offered. Program generation is provided by an algorithmic generator, which occupies a small area of the chip. Command and micro-operation formats are proposed that reduce the amount of memory required to store test programs. The use of an algorithmic generator increases the diagnostic properties of the generated tests due to their execution without missing cycles of access to the tested chip.

ВВЕДЕНИЕ

В промышленных контроллерах систем управления технологическими процессами для хранения программ и обрабатываемых данных широко применяются статические оперативные запоминающие устройства (ОЗУ), в которых информация сохраняется все время, пока к микросхеме подключено питание. Это позволяет постоянно выполнять управляющие программы, так как не требуется регенерировать их содержимое, если применять память динамического типа и некоторые другие виды памяти. Оперативная память является одним из самых надежных компонентов систем управления, потому что производители памяти очень тщательно тестируют свою продукцию, прежде чем она попадет на рынок и в готовые изделия. Однако в микросхемах памяти под воздействием статического электричества, миграции электронов из-за высокой проводимости окислов, туннельного эффекта и т. д. со временем могут возникать отказы и сбои.

С ростом объема оперативной памяти повышается сложность тестового диагностирования, которое состоит в подаче на входы ОЗУ тестовых наборов, снятия выходных откликов и сравнения их с эта-

лонными значениями. Набор аппаратных средств, применяемых для тестового диагностирования ОЗУ, очень широк: от специализированных технологических тестеров до встроенных в микросхему средств периферийного сканирования (Boundary-scan) и встроенного самотестирования (Built-in Self-test, BIST).

Средства периферийного сканирования (Boundary-scan) и технология JTAG-тестирования позволяют загрузить в средства встроенного самотестирования BIST или в запоминающие ячейки программный код, реализующий алгоритм тестирования памяти [7]. Однако при этом снижается частота тестирования, поскольку для подготовки теста требуется применять несколько процедур, для того чтобы сформировать коды адреса, данных, управляющих сигналов для процессов считывания и записи, что снижает достоверность диагностирования.

Общий подход BIST для микросхем памяти включает внедрение в микросхему дополнительных схем для генерации тестов, синхронизации и сравнения ответных реакций с эталонными данными, однако архитектура данных средств раскрыта недостаточно подробно. Разработка архитектуры встроенных

средств самотестирования, обеспечивающих выполнение тестов микросхем памяти на реальной рабочей частоте, стала актуальной проблемой. Проектирование встроенных средств самотестирования является методом разработки дополнительных средств, которые исключают необходимость применения внешних дорогостоящих систем диагностирования [1, 5]. Решение этой проблемы обеспечит обнаружение большинства дефектов микросхем памяти еще на этапе их изготовления, а также на всех периодах эксплуатации, что также позволит сократить затраты времени выполнение тестирования.

Цель работы – разработка архитектуры встроенных средств самотестирования для диагностирования современных быстродействующих микросхем и модулей памяти статического типа.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Для формирования тестов при выполнении встроенного самотестирования запоминающих устройств заданного объема, построенных на микросхемах памяти статического типа, целесообразно применять алгоритмический генератор, для размещения которого требуется небольшая площадь кристалла микросхемы.

Структурная схема алгоритмического генератора тестов приведена на рис. 1 и содержит: микроконтроллер (U1), счетчик адреса команд (U2), микро-

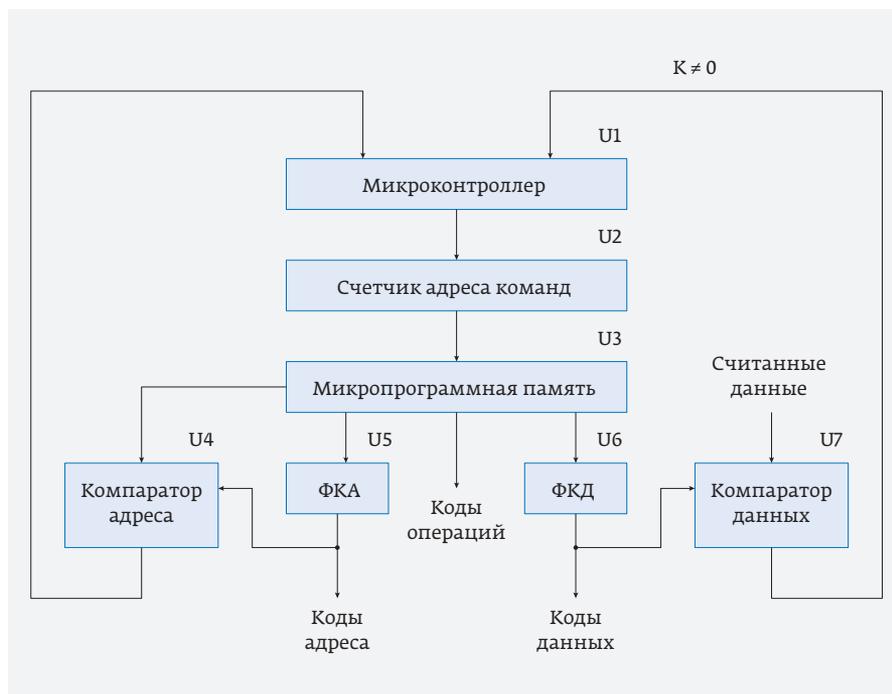


Рис. 1. Структура алгоритмического генератора тестов

программную память (U3), компаратор адреса (U4) формирователь кода адреса (ФКА) (U5), формирователь кода данных (ФКД) (U6), и компаратор данных (U7). Счетчик адреса команд позволяет выбрать 256 ячеек микропрограммной памяти, что достаточно для хранения кодов программы самого сложного теста семейства марш. При сравнении считанных и эталонных данных формируется сигнал результата тестирования $K \neq 0$.

При разработке архитектуры алгоритмического генератора необходимо выбрать формат команд и микроопераций, при этом необходимо обеспечить минимально возможный объем микропрограммной памяти [6, 8]. Микропрограммная память имеет 20-разрядное поле команд и микроопераций,

Таблица 1. Основной формат команд и микроопераций

19	...	13	12	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1	0
Поле адреса условного перехода				Код МО данных		Код МО адреса			mC	mR	mW	COP			

Таблица 2. Формат команд задания начального или конечного адреса

19	...	5	4	3	2	1	0
Поле кода начального или конечного адреса ячеек памяти						STGA or STNA	

необходимых для формирования кодов тестовых воздействий и эталонных реакций [3]. С учетом обеспечения формирования тестов семейства марш, предлагается применять два формата команд, приведенные в табл. 1 и 2.

Основной формат команд и микроопераций содержит следующие поля: COP – поле кода команд; поля рабочих операций записи, считывания и сравнения данных mW, mR, mC; поля микроопераций адреса и данных и поле адреса условного перехода. Во втором формате команд отсутствует возможность кодирования рабочих операций, микроопераций адреса и данных, а все оставшиеся разряды микропрограммной памяти используются для задания начального (STGA) или конечного (STNA) адресов ячеек тестируемой памяти. Поле адреса условного перехода позволяет выбрать 256 ячеек микропрограммной памяти, что достаточно для хранения кодов программы самого сложного теста из семейства марш.

Для формирования кода адреса ячеек памяти применен следующий набор микроопераций: сохранение кода адреса (A:=A); инверсия кода адреса (notA:=A); увеличение кода адреса на единицу (A:=A+1); уменьшение кода адреса на единицу (A:=A-1); занесение кода начального адреса (A:=GA) занесение кода конечного адреса (A:=NA). Применение двух форматов команд и микроопераций

позволяет формировать код адреса, который содержит 16 разрядов, что обеспечивает выборку 32 Кбит ячеек тестируемой памяти. Если применить двух координатную систему адресации запоминающих ячеек и два формирователя кодов адреса X и Y, то можно обеспечить самотестирование микросхемы памяти емкостью до 1 Гбит.

Для формирования кода данных применен следующий набор микроопераций: сохранение кода данных (D:=D); занесение кода из поля адреса условного перехода (D:=S); увеличение кода данных на единицу (D:=D+1); уменьшение кода адреса на единицу (D:=D-1). Ограничение длины поля адреса условного перехода позволяет тестировать микросхемы памяти, число разрядов которых не превышает восьми.

В разрядах 3...0 микропрограммной памяти можно закодировать команды (COP) алгоритмического генератора, приведенные в табл. 3.

Дешифрацию команд осуществляет микроконтроллер, структурная схема которого приведена на рис. 2.

На входы микроконтроллера поступают коды команд COP и признаки переходов A≠NA, A≠GA и K≠0. При поступлении команды перехода и соответствующего признака на выходе контроллера формируется сигнал Load, переключающий счетчик адреса команд в режим параллельного занесе-

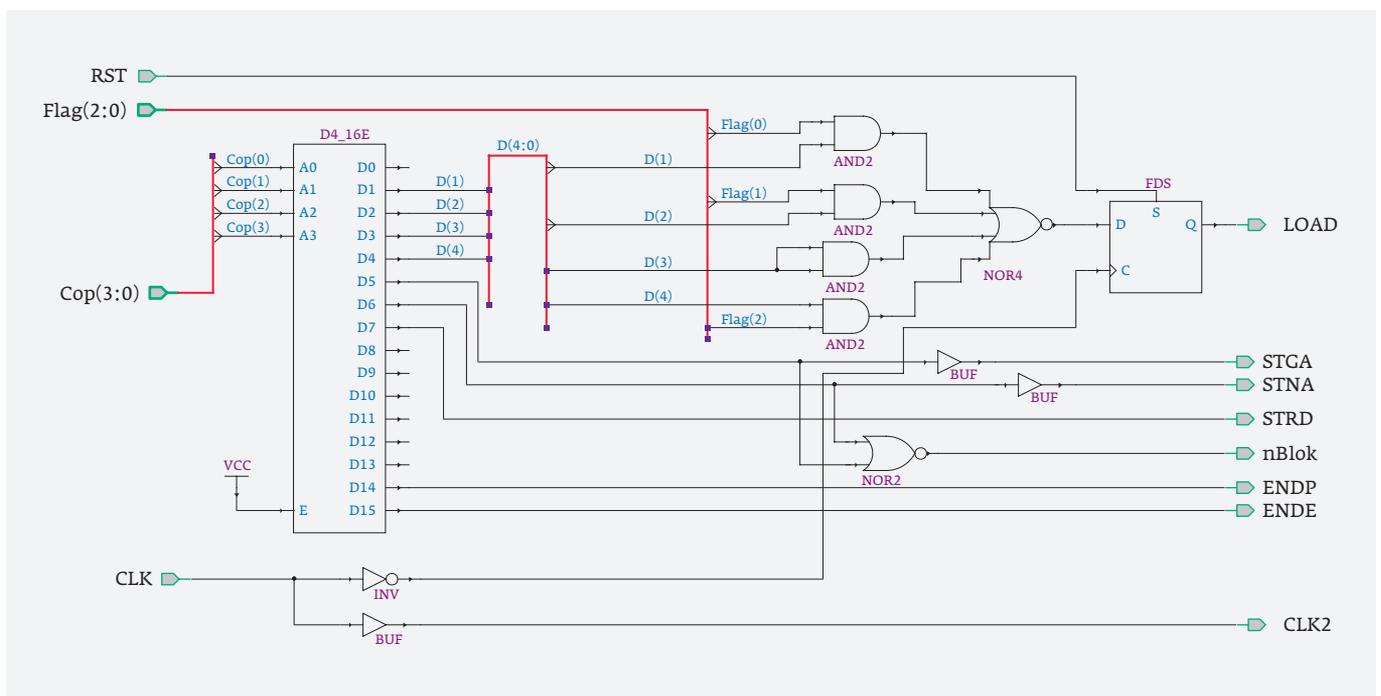


Рис. 2. Структурная схема микроконтроллера

Таблица 3. Команды алгоритмического генератора

Мнемоника	Выполняемые действия
STGA	Занесение начального кода адреса в регистр GA
STNA	Занесение конечного кода адреса в регистр NA
STRD	Занесение начального кода данных в регистр D
JANN	Переход по A≠NA
JANG	Переход по A≠GA
JKNZ	Переход по K≠0
ENDP	Переход по результату тестирования «Годен»
ENDE	Переход по результату тестирования «Брак»

ния кода адресного перехода [9]. Микроконтроллер формирует команды STGA, STNA и STRD для занесения исходных данных в регистры адреса GA, NA и данных RD соответственно. Также формируются команды ENDP и ENDE, соответствующие результатам тестирования «ГОДЕН» или «БРАК» соответственно.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Верификация разработанного проекта алгоритмического генератора тестов осуществлялась при выполнении теста March_C [2, 4]. Временная диаграмма

результата верификации проекта приведена на рис. 3. Тест выполняется с увеличением на 1 кода адреса Addr, с каждой ячейкой памяти последовательно выполняются операции считывания mR, сравнения mC и записи данных mW. Согласно алгоритму теста March_C считываются коды данных DataO 00, а записываются коды FF.

На временной диаграмме коды Data отображают содержимое микропрограммной памяти, а коды Acom_O – состояние счетчика адреса команд. Полученные результаты верификации проекта подтверждают работоспособность

алгоритмического генератора тестов.

В системе Libero SoC разработано ОЗУ со встроенными средствами самотестирования, структура которого приведена на рис. 4 и содержит: запоминающее устройство RAM; алгоритмический генератор algo_generator; мультиплексоры данных MX_Data, адреса MX_Addr, кодов операций MX_Cop и шинный формирователь Viderect_bufер.

Мультиплексоры данных MX_2_Data, адреса MX_Addr и кодов операций MX_Cop обеспечивают переключение направления передачи кодов от управляющей системы или от алгоритмического генератора в режиме самотестирования.

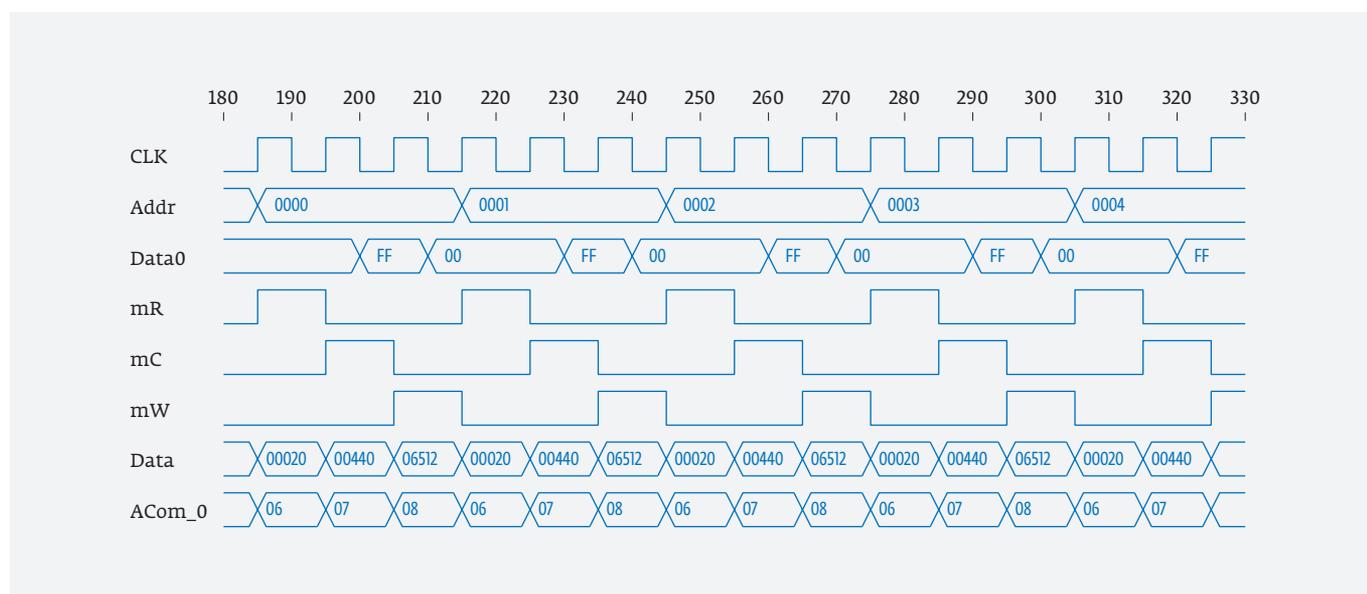


Рис. 3. Результаты верификации алгоритмического генератора

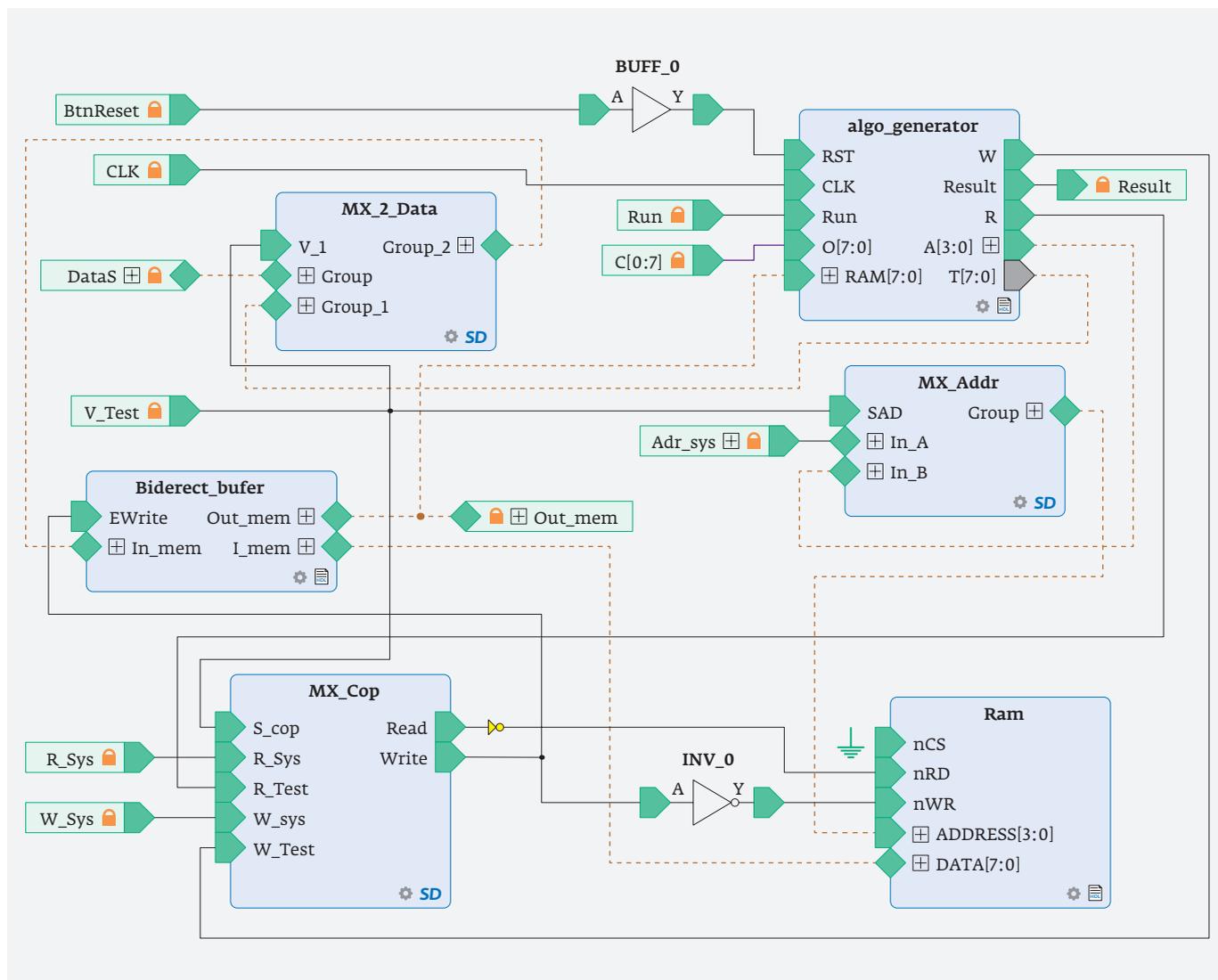


Рис. 4. ОЗУ со встроенными средствами самотестирования

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При проектировании архитектуры алгоритмического генератора обеспечивается получение высоких диагностических свойств формируемых тестов за счет их выполнения без пропусков тактов обращения к диагностируемому ОЗУ. При этом уменьшается емкость программ тестов путем использования аппаратно-микропрограммного способа формирования тестов, который сочетает высокое быстродействие с небольшими аппаратными затратами. Для обеспечения циклического выполнения программ в качестве признаков, необходимых для организации условных переходов, рекомендуется использовать результаты сравнения кода текущего адреса и кода начального или кода конечного адреса диагностируемого массива памяти.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Andrienko V.A., Moamar D., Ryabtsev V.G., Utkina T.Yu.** Architecture of Built-In Self-Test and Recovery Memory Chips // Proceedings of East-West Design & Test Workshop (EWDTW'2012): (14-17 Sep., 2012, Kharkov, Ukraine). – Kharkov: KHNURE, 2012. PP. 307-310.
2. **Parvathi Muddapu, Vasantha N., Parasad Satya.** Modified March C Algorithm for Embedded Memory Testing // International Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE). 2012. Vol. 2. № 5. PP. 571-576.

3. **Ryabtsev V., Evseev K., Almadi M.** The Concept of Memory Device Diagnosis Algorithm Design // Journal of Multidisciplinary Engineering Science and Technology (JMEST). 2016. Vol. 3. Is. 10. PP. 5771-5774.
4. **Viswabharathi D., Raghuram K., Rajesh Kumar G.** High Speed Test Architecture for SRAM using Modified March Algorithm // International Journal of Engineering Research and Applications. 2012. Vol. 2. Is. 6. PP. 1654-1659.
5. **Андриенко В.А., Рябцев В.Г., Уткина Т.Ю.** Архитектура встроенного многоверсионного самотестирования микросхем памяти // Радіоелектронні і комп'ютерні системи. 2012. № 6 (58). Харків: ХАІ. С. 53-57.
6. **Евдокимов А.П., Рябцев В.Г., Меликов А.В.** Принципы проектирования устройств тестового диагностирования быстродействующих микросхем и модулей полупроводниковой памяти // Проблемы разработки перспективных микро- и нанoeлектронных систем (МЭС). 2018. № 2. С. 23-30.
7. **Кольский Н.** Интерфейс JTAG: тестирование плат, программирование и отладка // Печатный монтаж. 2009. № 1. С. 36-40.
8. **Волобуев С.В., Евдокимов А.П., Меликов А.В., Рябцев В.Г., Шубович А.А.** Методы и средства повышения надежности модулей памяти компьютеров: монография. – Волгоград: ФГБОУ ВО Волгоградский ГАУ, 2018. 284 с.
9. **Рябцев В.Г., Волобуев С.В.** Имплементация памяти в систему на кристалле со встроенными средствами самотестирования и самовосстановления // Изв. вузов. Электроника. 2019. Т. 24. № 3. С. 239-247.

Нейронная сеть для SCA blinded key RSA реализации

► В. В. Благодатов, А. С. Кравцов, А. В. Нуйкин
АО «НИИМЭ»

В рамках работы оценивается эффективность методов машинного обучения, применительно к анализу электромагнитного побочного канала защищенных микросхем.

Neural Network in SCA Blinded Key RSA Implementation

V.V. Blagodatov, A.S. Kravtsov, A.V. Nuykin

MERI SC

The article assesses the effectiveness of Machine Learning for Side Channel Analysis of the Secured Chips.

ВВЕДЕНИЕ

Основным требованием, предъявляемым к криптографическим микросхемам, является безопасность. Безопасное хранение данных без возможности раскрытия секрета злоумышленником.

Во время работы микросхемы происходит утечка информации и образуется так называемый паразитный побочный канал связи. Индуцированное электромагнитное поле и токопотребление во времени можно рассматривать как побочные каналы утечки информации.

Атаки криптографических микросхем по побочным каналам являются наиболее доступными и эффективными. Долгое время предполагалось, что наиболее эффективными видами атак являются корреляционный анализ трасс утечки (CPA) и анализ распределений Template Analysis [1].

В данной работе представлены результаты применения машинного обучения для анализа электромагнитного излучения криптографической микросхемы. Техника анализа с применением машинного обучения продемонстрирована на примере сбалансированной реализации RSA на микроконтроллере с модулярным сопроцессором. В качестве аппаратных контрмер использовались генератор шума и активный экран. Атака состояла в попытке распознать значения бит

ключа в момент экспоненцирования по отснятой EM-трассе.

ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Для анализа мы использовали реализацию RSA, с алгоритмом экспоненцирования always multiply and square:

Входные данные (сообщение, ключ, модуль):

$$m, d, n \in \mathbb{N}$$

Выходные данные: $m^d \bmod n$

```

S = m
M = 1
FAKE = 1
For I = 0 to len (n) - 1 do
If di = 1 then
M = M × S mod n
ELSE
FAKE = FAKE × S mod n
S = S × S mod n
Return M

```

Так как участок операции возведения в квадрат S может быть отличен от операции умножения M с точки зрения сигнала утечки, вставка ложной операции умножения может решить эту проблему. Тем самым последовательность операций возведения в квадрат S и умножения M не зависит от ключа.

Multiply and Square	M, S, M, S, S, M, S, S, M, S, M, S, M, S, S, M, S, ...
Биты ключа	1 1 0 1 0 1 1 1 0 1
Always Multiply and Square	M, S, ...
Биты ключа	1 1 0 1 0 1 1 1 1 0 1

Сбалансированные реализации *always multiply and square* или *Montgomery ladder* также могут быть уязвимы для статистических атак [2]. Но при использовании *key blinding* статистическая атака в большинстве случаев практически не осуществима.

Вычисление ключа, который будет использоваться только один раз:

$$\text{Blindedkey} = k \times (e \times d - 1) + d,$$

d – постоянный секретный ключ;

e – открытая экспонента;

k – случайное число достаточной длины.

Секретный ключ будет скомпрометирован в том случае, если удастся по одной трассе восстановить *blindedkey* или по нескольким частично восстановленным *blindedkey* восстановить исходный ключ d .

После оцифровки сигнала необходимо оценить утечку ключевой информации. Для этого можем использовать статистические методы или средства машинного обучения. Мы будем анализировать участок алгоритма RSA, где происходит экспонирование с последовательным проходом по битам ключа. Далее будем угадывать значение каждого бита исходя из значений измерений, соответствующих данному участку обработки бита ключа. Предварительно потребуется спрофилировать устройство для обучения нашего классификатора на маркированных примерах.

Предварительно мы разбили каждую трассу на участки, отвечающие за обработку отдельных бит.

Для формирования обучающей выборки разделим множество участков трасс на группы. Первая группа – это участки трассы, соответствующие обработке нулевых бит без учета положения бита внутри ключа. Вторая группа – это участки трассы, соответствующие обработке единичных бит ключа.

Общее количество трасс обучающей выборки равно 20 тыс. Количество трасс в контрольной выборке, которая не участвовала в процессе обучения, равна 1700. Размер каждой трассы 1820 точек. Данный участок покрывает 10% от общего участка обработки бита ключа. Выбор точек осуществляли с помощью процедуры *getROI* из пакета *SignalView* [8], позволяющей найти «область интереса» (*RegionOfInterest*) по заданному критерию.

На рис. 2 представлен отрезок интересующей нас области для пяти случайно выбранных измерений, наложенных друг на друга. Продемонстрировано хорошее совмещение, несмотря на включенный генератор шума.

ПОЛНОСВЯЗНАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ

В качестве первого классификатора использовали полносвязную сеть с одним/двумя/тремя скрытыми слоями при различном количестве в скрытом слое. Размер входного слоя обусловлен размером трассы. Для этой архитектуры не удалось добиться обобщающей способности. Точность на обучающей выборке быстро растет, а на тестовой выборке – остается на уровне 49–51%. Это обусловлено избыточностью связей сети и ее архитектурой.

СВЕРТОЧНАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ

Особенность сверточных слоев нейронной сети заключается в их способности применять локальный фильтр в области исходных данных. В рамках работы по разработке системы биометрической видеопериферии пользователя по веб-камере использовалась свертка исходного изображения с ядром фильтра выделения границ [7].

Для выделения признаков внутри трассы, как и в работе с распознаванием лиц, использовалась свертка для выделения некоторых особенностей сигнала. Но если раньше применялось фиксированное ядро фильтра, то теперь ядро фильтра формируется в процессе его настройки методом обратного пространства ошибки.

Нам потребуется преобразовать временной ряд $x(t)$ к представлению в двумерном пространстве x^{GAF} . Это необходимо для согласования с размерностью филь-



Рис. 1. Синхронизированные участки выбора бита ключа и начало *Multiply*-операции

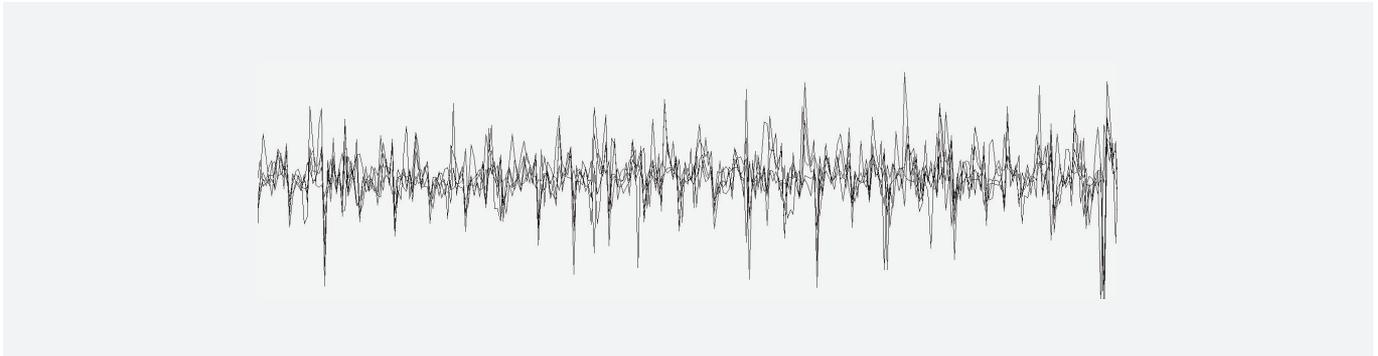


Рис. 2. Совмещенные трассы участка выбора бита ключа для пяти операций

тра свертки. Простым способом представления ряда в виде матрицы может быть построчное ее заполнение элементами ряда, как это сделано в работе [4]. При таком способе разбивки нам не удалось обучить сеть, так как не сформировались локальные признаки, которые могут быть извлечены с помощью фильтров-сверток. Поэтому для формирования матрицы мы использовали преобразование Gramian Angular Field [5]:

1. Нормировка данных в интервале $[-1, 1]$

$$x_i = \frac{(x_i - \max(X)) + (x_i - \min(X))}{\max(X) - \min(X)}$$

2. Переход к полярным координатам:

$$\begin{cases} \phi_i = \arccos(x_i) \\ r_i = \frac{t_i}{N}, t_i \in N \end{cases}$$

3. Результирующая матрица GAF:

$$X^{GAF} = \begin{bmatrix} \cos(\phi_1 + \phi_1) \cdots \cos(\phi_1 + \phi_n) \\ \cos(\phi_2 + \phi_1) \cdots \cos(\phi_2 + \phi_n) \\ \dots \\ \cos(\phi_n + \phi_1) \cdots \cos(\phi_n + \phi_n) \end{bmatrix}$$

Сложностью при подборе конфигурации сверточной сети является ресурсоемкость процесса обучения. Так, обучение модели для участка в 100 точек на обычной 6-ядерной машине для нашего набора данных занимает 18 ч для одной фиксированной конфигурации сети. Заметим, что входной слой при этом 100×100 . В таком случае поиск оптимальных параметров архитектуры занимает много времени.

Для ускорения вычисления мы использовали облачный сервис обработки данных SignalView [8], позволяющий на несколько порядков ускорить вычисления. Обучение сети той же конфигурации с одной зарезервированной вычислительной единицей (инстансом) длится 10 мин. А обучение на нашей выборке с GAF-предобработкой, где размер входного слоя сети составляет 1820×1820 нейронов, невозможно на CPU based машине.

Архитектура сети:

- Входной слой... $1820 \times 1820 \times 1$
- Сверточный ... $900 \times 900 \times 8$ карт признаков + max pooling(2x2), активация ReLu, свертка 22, шаг 2
- Сверточный .. $435 \times 435 \times 12$ карт признаков + max pooling(2x2), активация ReLu, свертка 16, шаг 1
- Полносвязный слой 1000, активация ReLu
- Выходной 1 ... активация sigmoid
- Количество эпох 200
- Точность на тестовой выборке 68%.

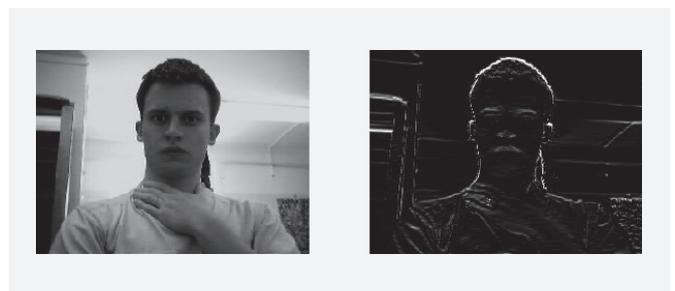


Рис. 3. Пример применения свёрточного фильтра выделения границ изображения [7]

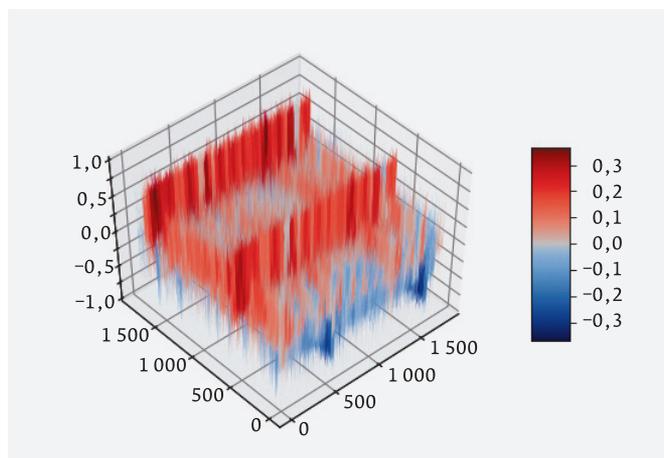


Рис. 4. GAF трасса

ВЫВОДЫ

В ходе работы в условиях применения определенных мер аппаратной и программной защиты от утечек по побочным каналам связи криптографической микросхемы с применением методов machine learning удалось классифицировать биты ключа по одной трассе с точностью 68% для каждого отдельного бита. В данной работе использовались 10% от общего числа точек обработки бита ключа и объем обучающей выборки 20 000 бит. В дальнейшем предполагается решить вопрос повышения точности за счет более эффективного использования исходных данных, увеличить объем обучающей выборки и произвести более тонкую настройку сети.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Chari S., Rao J., Rohatgi P.** Template Attacks. CHES, 2002.
2. **Amiel F. et al.** Distinguishing Multiplications from Squaring Operations. SAC, 2008.
3. **Mukhtar N. et al.** Machine-Learning-Based Side-Channel Evaluation of Elliptic-Curve Cryptographic FPGA Processor, MDPI, 2018.
4. **Maghrebi H., et al.** Breaking Cryptographic Implementations Using Deep Learning Techniques, SPACE, 2016.
5. **Wang Z., Oates T.** Encoding Time Series as Images for Visual Inspection and Classification Using Tiled Convolutional Neural Networks. AAAI Workshop, 2015.
6. **Благодатов В.В.** Видеологин на основе системы распознавания // Научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов ОГТУАЭ (ИАТЭ), 2007.
7. **Благодатов В.В.** Система распознавания лиц по фронтальному изображению лица // Дипломная работа. ОГТУАЭ (ИАТЭ), 2008.
8. GPU Cloud Service: www.signalview.ru

Получение концентрата тетраметиламмония гидроксида мембранным электролизом раствора хлорида тетраметиламмония

► А. А. Конарев¹, Д. А. Варламов², Б. Г. Грибов²

¹ФГУП «ГНЦ «НИОПИК», ²АО «НИИМЭ»

Для разработки технологии получения концентрата тетраметиламмония гидроксида выбрано направление исследований, заключающееся в мембранном электролизе водного раствора хлорида тетраметиламмония, правильность выбора которого подтверждается экспериментальными данными, полученными в лабораторных условиях и в опытно-промышленном масштабе. На основании полученных результатов оптимизированы параметры электросинтеза концентрата тетраметиламмония гидроксида и определены его технико-экономические показатели.

Production of Tetramethylammonium Hydroxide Concentrate by Means of Membrane Electrolysis of Tetramethylammonium Chloride Solution

A. A. Konarev¹, D. A. Varlamov², B. G. Gribov²

¹FSUE SSC «NIOPIK», ²MERI SC

To develop a technology for producing a tetramethylammonium hydroxide concentrate, one direction of research is chosen. The research includes a membrane electrolysis of an aqueous solution of the tetramethylammonium chloride, the correctness of which is confirmed by experimental data acquired in laboratories and in industrial experiments. On the basis of the gained results, parameters of electrosynthesis of the tetramethylammonium hydroxide concentrate are optimized and its technical and economic indices are determined.

ВВЕДЕНИЕ

Четвертичные аммониевые гидроксиды, в частности, тетраметиламмония гидроксид (ТМАГ), используются в различных отраслях промышленности: при производстве электролитов для энергосберегающих устройств, водных растворов при изготовлении печатных плат, жидкокристаллических дисплеев, в качестве чистящей жидкости для полупроводниковых подложек на одном из этапов производства полупроводников, в качестве исходного сырья для получения безметалльных проявителей, применяемых в литографических процессах микроэлектронного производства, а также в электрохимическом органическом синтезе.

Для производства интегральных схем (ИС) с нанометровыми топологическими нормами требуются новые материалы с повышенным уровнем их качества. Одной из наиболее важных технологических

операций производства ИС является фотолитографический процесс формирования рельефных покрытий на функциональных поверхностях подложек для ИС, в которых используется безметалльный проявитель. В качестве сырья для производства безметалльного проявителя фоторезиста используется концентрат ТМАГ.

Судя по данным научной и патентной литературы, в основе получения ТМАГ положен мембранный электролиз водных растворов хлорида тетраметиламмония. Условия электролиза при получении ТМАГ по результатам патентов [1–6] отличаются незначительно. Электросинтез ТМАГ проводится при плотностях тока от 1 до 50 А/дм² и температуре не более 50 °С с использованием мембранных электролизеров фильтр-прессной или ящичной конструкции. При этом концентрация исходного хлорида тетраметиламмония варьируется от 10 до 50%.

В то же время имеются и другие способы получения ТМАГ, в частности, предварительное использование анионообменных смол с последующей дополнительной очисткой продукта мембранным электролизом [7] или электродиализом [8]. Однако вопросы, касающиеся технологии производства концентрата ТМАГ, в литературе практически не описаны, что является основанием для ее разработки. Поэтому данная работа посвящена разработке лабораторной технологии получения концентрата ТМАГ мембранным электролизом водного раствора хлорида тетраметиламмония.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для разработки лабораторной технологии получения концентрата ТМАГ электролизом растворов хлорида тетраметиламмония в ФГУП «ГНЦ «НИОПИК» разработали и смонтировали укрупненную лабораторную установку с двухкамерным мембранным электролизером фильтр-прессной конструкции на токовую нагрузку от 10 до 15 А, на которой исследовали и оптимизировали условия получения концентрата ТМАГ. Апробацию полученных лабораторных данных проводили на опытной установке с четырехкамерным мембранным электролизером на токовую нагрузку от 80 до 100 А, моделирующим опытно-промышленный аппарат.

Аппарат для осуществления процесса электролиза водного раствора хлорида тетраметиламмония – электролизер поз. Э-1 представлял собой четырехкамерный аппарат фильтр-прессной конструкции, состоящий из двух катодных и двух анодных камер, разделенных катионообменной мембраной. Выбор электролизера фильтр-прессной конструкции обусловлен его компактностью и достаточно приемлемой производительностью по сравнению с электролизерами емкостного типа [9].

Технологическая схема установки для электрохимического получения ТМАГ, как лабораторной, так и опытной, представлена на рис. 1.

В качестве катионообменных мембран использовали мембраны отечественного и импортного производства: МК-40 (Рос-

сия), Флემион 811 (Япония, фирма «Асахи Гласс») и Нафион 324 (США, фирма «Дюпон»). Катодом в лабораторном и опытном электролизерах служила пластина из различных конструкционных материалов, в частности, нержавеющей стали марки X18H10T и титана марки ВТ1-0, с рабочей поверхностью 1,0 и 8,0 дм² соответственно, а анодом – две пластины из титана, покрытые окислами рутения и титана (ОРТА) такой же поверхности, или платинированный титан. При помощи прижимных плит и стяжных болтов обеспечивали герметичное соединение элементов электролизера (рамок, резиновых прокладок, мембран, электродов).

Предварительно приготовленный водный раствор хлорида тетраметиламмония загружали в аппарат поз. Е-1, из которого насосом поз. Н-1 его подавали в анодные камеры электролизера поз. Э-1 по замкнутому контуру. В аппарат поз. Е-2 заливали деионизованную воду с добавкой ТМАГ (0,15–0,20%-ный раствор) и насосом поз. Н-2 ее подавали в катодные камеры электролизера поз. Э-1 по замкнутому контуру.

Обеспечив циркуляцию растворов через электролизер поз. Э-1, на последний от выпрямительного агрегата подавали напряжение и устанавливали силу тока, соответствующую требуемой анодной плотности тока.

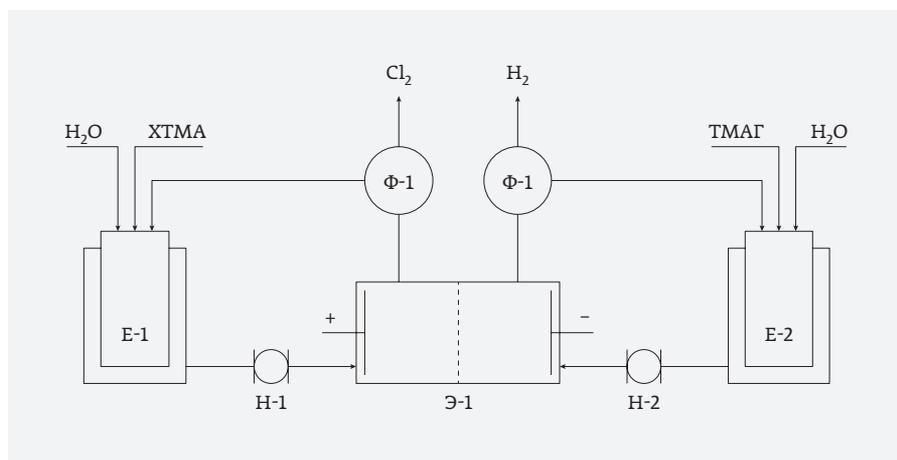


Рис. 1. Технологическая схема электрохимического получения концентрата ТМАГ. Э-1 – мембранный электролизер; Е-1 – термостатируемая промежуточная емкость с рубашкой для исходного раствора хлорида тетраметиламмония; Е-2 – термостатируемая промежуточная емкость с рубашкой для концентрата ТМАГ; Н-1 – насос для циркуляции раствора хлорида тетраметиламмония; Н-2 – насос для циркуляции раствора ТМАГ; Ф-1 – фазоразделитель для отделения хлора от анолита; Ф-2 – фазоразделитель для отделения водорода от католита

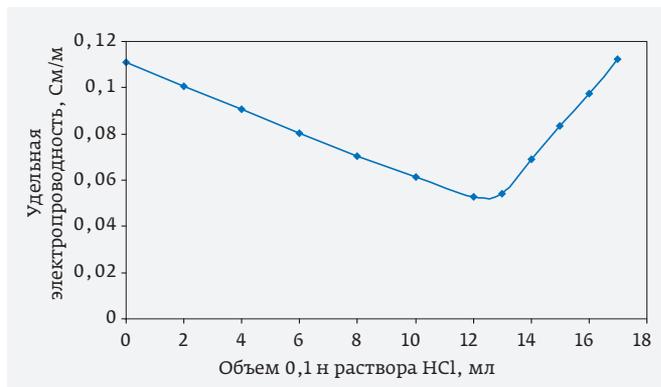


Рис. 2. Кондуктометрическая кривая титрования концентрата ТМАГ 0,1 н раствором соляной кислоты

При электролизе водного раствора хлорида тетраметиламмония на аноде образуется хлор, который поглощали раствором гидроксида натрия.

Процесс электролиза прекращали при уменьшении силы тока от 2,5 до 3,0 А.

Полученный концентрат ТМАГ анализировали на содержание основного вещества, хлоридов, карбонатов и примесей металлов, а также определяли технико-экономические показатели процесса: выход по веществу, выход по току, энергоёмкость процесса и производительность электролизера.

Содержание ТМАГ и углекислых солей в расчете на CO_3^{2-} в концентрате определяли методом нейтрализации с применением двух индикаторов – фенолфталеина и метилового оранжевого.

Содержание ТМАГ X_1 в% (масс.) в концентрате вычисляли по формуле:

$$X_1 = \frac{(V_1 - 0,1V_2) \cdot 0,009115 \cdot 100}{g}, \quad (1)$$

где V_1 – объем раствора кислоты соляной, пошедший на титрование с фенолфталеином, см³;

V_2 – объем раствора кислоты соляной, пошедший на титрование с метиловым оранжевым, см³;

0,1 – нормальность раствора кислоты соляной, н;

0,009115 – масса ТМАГ, эквивалентная 1 мл 0,1 н раствора кислоты, г;

g – навеска концентрата ТМАГ, г.

Содержание CO_3^{2-} в ТМАГ X_2 в% (масс.) вычисляли по формуле:

$$X_2 = \frac{2 \cdot V_2 \cdot 0,0030 \cdot 100}{g}, \quad (2)$$

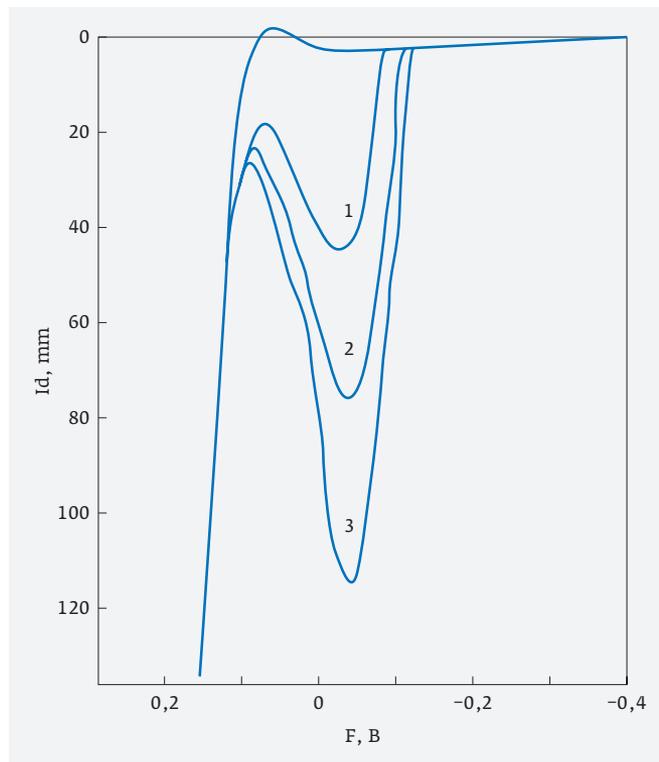


Рис. 3. Полярограммы окисления хлоридов при различной концентрации, %: 1 – 0,0035; 2 – 0,0068; 3 – 0,010. Фон: раствор азотной кислоты

где V_2 – объем раствора кислоты соляной, пошедший на титрование с метиловым оранжевым, см³;

0,0030 – масса CO_3^{2-} , эквивалентная 1 мл 0,1 н раствора кислоты, г.

Нами было установлено, что более точное определение содержания ТМАГ в концентрате обеспечивается использованием кондуктометрического метода титрования, так как он исключает применение индикаторов, вносящих ошибку в объем титранта, пошедшего на титрование.

Кондуктометрическая методика определения содержания основного вещества в концентрате ТМАГ основывается на титровании раствора ТМАГ 0,1 н раствором соляной кислоты без индикатора и регистрацией при этом величины удельной электропроводности с последующим построением простой по форме кондуктометрической кривой на компьютере, расчетом эквивалентных точек и определением основного вещества X_3 в% (масс) в образцах концентрата ТМАГ по приведенной ниже формуле:

$$X_3 = (0,009115 \cdot K \cdot V \cdot 100) / g, \quad (3)$$

$F=26,8$ – число Фарадея, $A \cdot ч$;
 M – молекулярная масса ТМАГ, равная 91,15;
 I – сила тока, A ;
 τ – продолжительность электролиза, $ч$.

Другим показателем, характеризующим эффективность использования электроэнергии при получении концентрата ТМАГ, является энергоёмкость процесса, которую определяли затратами электроэнергии на единицу продукта и рассчитывали по формуле:

$$\varepsilon (\text{кВт} \cdot \text{ч} / \text{кг}) = \frac{I \cdot U \cdot \tau}{g_{\text{ТМАГ}}}, \quad (8)$$

где: I – сила тока, A ;
 U – напряжение на электролизере, B ;
 τ – продолжительность электролиза, $ч$;
 $g_{\text{ТМАГ}}$ – количество полученного концентрата ТМАГ, $кг$;

Удельную производительность электролизера рассчитывали по формуле:

$$\Pi (\text{кг} / \text{м}^2 \cdot \text{ч}) = \frac{g_{\text{ТМАГ}}}{S \cdot \tau}, \quad (9)$$

где: $g_{\text{ТМАГ}}$ – количество полученного концентрата ТМАГ, $кг$;
 S – рабочая площадь мембраны, м^2 ;
 τ – продолжительность электролиза, $ч$.

Линейную скорость растворов (католита и анолита) в электродных камерах электролизера рассчитывали по формуле:

$$V(\text{м}/\text{с}) = \frac{Q}{a \cdot b \cdot 3600 \cdot 10}, \quad (10)$$

где: Q – производительность циркуляционного насоса, $\text{дм}^3/\text{ч}$;
 a – ширина электродной камеры, дм ;
 b – расстояние между катионообменной мембраной и электродом (катодом или анодом), дм ;
 3600 – коэффициент пересчета линейной скорости в секунду;
 10 – коэффициент пересчета линейной скорости в метрах.

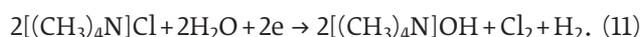
Деионизованную воду, применяемую для приготовления исходного рабочего раствора хлорида тетраметиламмония (анолита), католита, промывки оборудования и коммуникаций технологической схемы получения концентрата ТМАГ, производили на мембранной обратноосмотической установке. Деионизованная вода, получаемая на этой установке, имела величину удельного сопротивления не менее 18 $\text{МОМ} \cdot \text{см}$.

Для получения концентрата ТМАГ использовали в качестве исходного сырья – хлорид тетраметиламмония с содержанием основного вещества 99,6%.

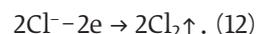
РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На основании научной и патентной литературы, а также научно-производственного опыта сформулирован подход к разработке технологии получения концентрата ТМАГ – это мембранный электролиз водного раствора хлорида тетраметиламмония.

Электрохимический метод получения концентрата ТМАГ основан на мембранном электролизе водного раствора хлорида тетраметиламмония, протекающем по суммарной реакции:



При электролизе водного раствора хлорида тетраметиламмония на аноде протекает основная реакция окисления хлорид-ионов с образованием хлора:



ТМАГ образуется в катодном пространстве за счет миграции катионов $[(\text{CH}_3)_4\text{N}]^+$ из анодного пространства через катионообменную мембрану под действием градиента электрического потенциала и протекания катодной реакции электролиза воды с образованием водорода и ионов OH^- :



Гидроксид-ионы с катионами тетраметиламмония в катодном пространстве образуют целевой продукт – концентрат ТМАГ по реакции:



Наряду с основной реакцией – образованием хлора (12) на аноде образуется побочный продукт – кислород (до 20%) по реакции:



а в объеме анолита хлор подвергается гидролизу:



Для разработки лабораторной технологии получения концентрата ТМАГ представляло целесообразным обстоятельно исследовать основные

Таблица 2. Влияние анодной плотности тока на процесс получения ТМАГ. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 30,0%, мембрана – МК-40, температура от 20 до 22 °С, катод – нержавеющая сталь X18N10T, линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,1 м/с

Плотность тока, А/дм ²	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг	Удельная производительность, кг/м ² ·ч
5,0	24,8	0,009	92,0	57,0	3,6	0,88
10,0	23,8	0,009	92,0	52,0	6,1	1,36
10,0*	24,3	0,002	92,1	57,5	5,0	2,16
15,0	23,8	0,001	92,0	50,0	5,5	2,70

* Линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,18 м/с.

параметры электролиза: плотность тока, температуру, тип катионообменной мембраны, материал катода, концентрацию исходного хлорида тетраметиламмония, линейную скорость растворов хлорида тетраметиламмония и концентрата ТМАГ в электродных камерах – влияющие на технико-экономические показатели процесса, в частности, выход ТМАГ по веществу и по току, а также качество получаемого концентрата ТМАГ и его энергоёмкость.

Влияние анодной плотности тока на процесс электролиза раствора хлорида тетраметиламмония с использованием отечественной катионообменной мембраны МК-40 показано в табл. 2, а с применением катионообменной мембраны Флемион 811 – в табл. 3.

Из данных, приведенных в табл. 2 и 3, видно, что выход ТМАГ по веществу не зависит от плотности тока в исследованном интервале и составляет от 90 до 92%, а выход по току несколько уменьшается с увеличением плотности тока. При этом существенно повышаются энергоёмкость процесса вследствие увеличения напряжения на электролизере и производительность электролизера.

Вероятно, с увеличением плотности тока возрастает побочный перенос через мембрану анионов (ОН⁻), на который расходуется часть тока, что приводит к снижению выхода целевого продукта по току.

Из данных, приведенных в табл. 2 и 3, видно, что с увеличением анодной плотности тока наблюдается уменьшение содержания хлоридов в концентрате ТМАГ. Так, при использовании мембраны МК-40 с увеличением анодной плотности тока от 5,0 до 20 А/дм² содержание хлоридов в концентрате уменьшается с 0,009 до 0,001% (табл. 2). Подобная тенденция наблюдается при использовании мембраны Флемион 811 (табл. 3). Эти данные указывают на то, что электрическое поле в катионообменной мембране, возникающее при прохождении тока, сильно тормозит передвижение хлорид-ионов через мембрану с увеличением плотности тока.

Использование одновременно двух катионообменных мембран Флемион 811+МК-40, направленное на уменьшение концентрации хлоридов в целевом продукте, как показано в табл. 3, не приводит к снижению содержания хлоридов в концентрате ТМАГ, но существенно увеличивает энергоёмкость

Таблица 3. Влияние плотности тока на процесс получения ТМАГ. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 30,0%, мембрана – Флемион 811, температура от 20 до 22 °С, катод – нержавеющая сталь X18N10T, линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,1 м/с

Плотность тока, А/дм ²	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг	Удельная производительность, кг/м ² ·ч
10,0	27,5	0,003	91,5	47,0	3,9	2,0
10,0*	25,6	0,003	91,7	31,7	10,1	1,2
15,0	25,5	0,002	92,0	46,0	5,1	2,3
20,0	26,5	0,002	90,7	52,0	5,7	3,9
15,0**	27,0	0,002	91,0	44,0	4,8	2,2

* Две мембраны: Флемион 811+МК-40; линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере 0,07 м/с.

** Дополнительная загрузка хлорида тетраметиламмония в анолит.

Таблица 4. Влияние линейной скорости раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере на процесс электросинтеза ТМАГ. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 30,0%, мембрана – МК-40, температура от 20 до 22 °С, катод – нержавеющая сталь Х18Н10Т, плотность тока – 10 А/дм²

Линейная скорость анолита, м/с	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг	Удельная производительность, кг/м ² ·ч
0,07	24,5	0,001	92,5	46,0	7,1	1,3
0,10	23,8	0,009	92,0	52,0	6,1	1,4
0,18	24,3	0,002	92,1	57,5	5,0	2,2
0,25	24,6	0,001	92,0	59,5	4,4	2,0

процесса электролиза из-за возрастания суммарного сопротивления обеих мембран.

Из данных табл. 2 видно, что увеличение линейной скорости раствора хлорида тетраметиламмония в анодном пространстве до 0,18 м/с приводит к повышению выхода ТМАГ по току до 57,5%. Это послужило основанием для более подробного исследования влияния линейной скорости анолита на процесс электросинтеза концентрата ТМАГ (табл. 4).

Увеличение линейной скорости раствора хлорида тетраметиламмония в анодном пространстве электролизера с 0,07 до 0,25 м/с не влияет на выход ТМАГ по веществу, который составляет от 92,0 до 92,5%, но существенно повышает выход продукта по току и снижает его энергоемкость (табл. 4).

Кроме того, при более высокой температуре, составляющей 42–45 °С, исследовано влияние соотношения линейной скорости реакционных растворов в катодном и анодном пространствах электролизера. Результаты этих исследований приведены в табл. 5.

Из табл. 5 следует, что при более высокой температуре электролиза, составляющей от 42 до 45 °С, с применением катионообменной мембраны Нафион 324 изменение соотношения линейных скоростей реак-

ционных растворов в электролизере в исследованном интервале не влияет на выход ТМАГ по веществу и его энергоемкость. В то же время при линейной скорости анолита, составляющей 0,33 м/с, выход по току увеличивается до 38,7%. Поэтому предпочтительнее, чтобы линейная скорость анолита была больше скорости католита. Однако, как видно из табл. 5, даже при низких линейных скоростях (0,11 м/с) реакционных растворов обеспечиваются приемлемые технико-экономические показатели процесса электролиза, что важно при выборе производительности насосов.

Следует отметить, что при использовании катионообменной мембраны Нафион 324 достигается более низкое содержание хлоридов в полученном концентрате ТМАГ, составляющее 0,00012–0,00025%, по сравнению с мембранами МК-40 и Флеминг 811.

Поскольку для получения концентрата ТМАГ в качестве исходного сырья применяется раствор хлорида тетраметиламмония с высокой концентрацией, составляющей от 28 до 30%, то содержание хлоридов в получаемом концентрате ТМАГ зависит не только от типа применяемой катионообменной мембраны и анодной плотности тока, как видно из данных табл. 3, 4 и 5, но и от других условий элек-

Таблица 5. Влияние линейной скорости растворов хлорида тетраметиламмония и ТМАГ в камерах электролизера на процесс электросинтеза ТМАГ. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 29,9%, мембрана – Нафион 324, температура от 42 до 45 °С, плотность тока – 15 А/дм², катод – титан ВТ1–0

Линейная скорость анолита, м/с	Линейная скорость католита, м/с	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг
0,33	0,33	25,5	0,00012	90,8	32,6	2,37
0,11	0,33	26,0	0,00012	91,6	33,9	2,35
0,33	0,11	24,7	0,00017	90,3	38,7	2,37
0,11	0,11	24,5	0,00025	92,2	34,1	2,33

Таблица 6. Результаты электросинтеза ТМАГ на укрупненной лабораторной установке с использованием катионообменных мембран Флемион 811 и Нафион 324. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 29,9%, катод- титан ВТ–0 в виде сетки, линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,33 м/с, линейная скорость раствора ТМАГ в катодной камере – 0,33 м/с

Тип мембраны	Анодная плотность тока, А/дм ²	Температура, °С	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг
Флемион	10	44–47	22,6	0,00300	94,4	54,6	1,50
Флемион	15	42–45	23,7	0,00100	94,2	54,0	0,78
Флемион	20	42–45	23,5	0,00110	94,0	58,5	1,33
Флемион	15	42–47	23,5	0,00160	94,4	56,1	1,15
Нафион	10	42–45	25,6	0,000150	92,0	44,6	1,69
Нафион	15	40–42	28,9	0,000075	92,2	37,0	2,17
Нафион	20	42–45	24,7	0,00017	92,0	34,0	2,37

тролиза. Нами показано, что перенос ионов хлора через мембрану осуществляется диффузией, электрическим полем и электроосмотическим потоком растворителя, а также существенно ускоряется с повышением температуры.

В случае электролиза растворов хлорида тетраметиламмония, как видно из табл. 2 и 3, содержание хлоридов в целевом продукте как при использовании мембраны МК-40, так и мембраны Флемион-811 составляет от 0,001 до 0,009% и уменьшается до 0,00012–0,00025% при использовании мембраны Нафион 324. К тому же, содержание хлоридов в концентрате ТМАГ уменьшается также с увеличением плотности тока. Для достижения содержания хлоридов в целевом ТМАГ на уровне от 0,001 до 0,002% плотность тока должна быть от 10 до 20 А/дм².

Электролиз растворов хлорида тетраметиламмония с использованием мембран Флемион 811 и Нафион 324 протекает с образованием более концентрированного раствора ТМАГ и с меньшей энергоемкостью процесса по сравнению с процессом, в котором использовалась отечественная мембрана МК-40. Так, при использовании катионообменных мембран Флемион 811 и Нафион 324 концентрация ТМАГ в растворе составляет от 25,5 до 27,5%, а в случае мембраны МК-40 – от 23,8 до 24,8%.

Судя по патентным данным [2], катионообменная мембрана Нафион 324 также предлагается для получения концентрата ТМАГ. Поэтому были проведены сравнительные исследования процесса получения концентрата ТМАГ с использованием мембран Флемион 811 и Нафион 324 на укрупненной лабораторной установке с титановым катодом при темпе-

ратуре от 42 до 47 °С. Результаты этих исследований представлены в табл. 6.

Как видно из табл. 6, тип исследованных катионообменных мембран при электролизе растворов хлорида тетраметиламмония не влияет на выход по веществу концентрата ТМАГ и составляет от 92 до 94,4%, а выход по току при этом изменяется от 34 до 58,5%. Причем больший выход ТМАГ по току достигается при использовании катионообменной мембраны Флемион 811, а, следовательно, и более низкая энергоемкость целевого продукта. Однако катионообменная мембрана Нафион 324 обеспечивает более низкое содержание хлоридов в концентрате ТМАГ, что очень важно для использования его в микроэлектронном производстве. Содержание хлоридов в продукте остается низким даже при электролизе при повышении температуры катода от 42 до 45 °С. К тому же, эта мембрана не требует предварительной активации при ее монтаже в электролизере, как в случае мембраны Флемион 811, что технологически удобно. Однако катионообменные мембраны Флемион 811 и Нафион 324 успешно работают в течение от 1,5 до 2 лет в чрезвычайно жестких условиях воздействия сильных окислителей (атомарный и молекулярный хлор, хлорокислоты) и концентрированной щелочи при высокой температуре от 80 до 90 °С и плотности тока от 20 до 30 А/дм² [10].

Из полученных результатов (табл. 3, 4 и 6) следует, что электросинтез ТМАГ предпочтительно проводить при более высокой плотности тока, составляющей от 10 до 20 А/дм², так как в этом случае достигается более высокая производительность электролизера и низкое содержание хлоридов в продукте. Однако

Таблица 7. Электроосмотический перенос воды при электролизе растворов хлорида тетраметиламмония. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 30,0%, мембрана МК-40, температура от 20 до 23 °С, катод – нержавеющая сталь Х18Н10Т, плотность тока – 10 А/дм²

Содержание в католите:		Выход по току, %	Начальный объем католита, мл	Объем перенесенной воды в католит, мл	Примечание
ТМАГ, %	хлоридов, %				
14,3	0,0022	57,0	230	140	
15,8	0,0025	63,0	175	175	
20,2	0,0110	46,3	80	155	0,07 м/с
22,2	0,0200	67,5	80	139	0,18 м/с
22,0	0,002	61,4	80	106	Флемион
26,8	0,030	42,5	80	116	Флемион
25,0	0,004	31,7	110	104	Флемион + МК-40
*10,7	0,0020	61,0	890	510	15 А/дм ²
*16,3	0,0025	62,8	700	530	
*18,8	0,0022	42,5	600	510	
*23,8	0,023	40,5	700	910	
*27,8	0,039	39,0	600	880	
*28,8	0,059	37,0	600	730	

* Две мембраны: МК-40 + Флемион 811 (опытная установка)

использование плотности тока выше 15 А/дм² приводит к трудностям поддержания температурного режима электролиза, особенно в условиях опытно-промышленного масштаба, когда токовая нагрузка на электролизере увеличивается до 300 А и выше.

При электролизе растворов хлорида тетраметиламмония наблюдается электроосмотический перенос воды через катионообменную мембрану из анодного пространства в катодное, который также способствует увеличению содержания хлорид-ионов в концентрате ТМАГ, снижая его качество. Результаты электроосмотического переноса воды из анолита в католит на лабораторной и опытной установках приведены в табл. 7.

Из данных, приведенных в табл. 7, следует, что поток воды при электролизе раствора хлорида тетраметиламмония через мембраны МК-40 из анодного пространства в катодное довольно значителен и составляет от 140 до 155 мл в ходе электролиза. Причем перенос воды через мембраны увеличивается с возрастанием концентрации ТМАГ и при этом также повышается содержание хлорид-ионов в ТМАГ. Так, с увеличением концентрации ТМАГ от 14,3 до 20,2% с использованием мембраны МК-40 перенос воды в католит возрастает со 140 до 155 мл, а содержание хлорид-ионов в католите увеличивается от 0,0022 до 0,01%. Увеличение линейной скорости

анолита до 0,18 м/с замедляет перенос воды через мембрану.

При использовании мембраны Флемион 811 наблюдается также значительный перенос воды через мембрану в католит, но он заметно меньше (от 106 до 116 мл) по сравнению с объемом воды в случае применения мембраны МК-40, а концентрация ТМАГ при этом достигается более высокая, составляющая от 22,0 до 26,8%.

При электролизе с двумя мембранами: МК-40 + Флемион 811, как видно из табл. 7, наблюдается существенное уменьшение переноса воды в католит до 104 мл при концентрации ТМАГ 25,0%, а содержание хлорид-ионов в последнем снижается до 0,004%. Поэтому представлялось целесообразным использовать две мембраны: МК-40 и Флемион 811 в опытной установке (табл. 7).

Сравнительные результаты электроосмотического переноса воды в католит с использованием катионообменных мембран Флемион 811 и Нафион 324 при температуре 40–45 °С приведены в табл. 8.

Как следует из табл. 8, электроосмотический перенос воды из анодного пространства электролизера в катодное в ходе электролиза составляет от 39,1 до 62,8 мл. Причем наибольший электроосмотический перенос воды характерен для катионообменной мембраны Флемион 811 и составляет от

Таблица 8. Электроосмотический перенос воды при электролизе растворов хлорида тетраметиламмония на лабораторной установке с использованием катионообменных мембран Флемион 811 и Нафион 324. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 29,9%, температура от 40 до 45 °С, катод – титан ВТ–0, линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,33 м/с, линейная скорость раствора тетраметиламмония гидроксида в катодной камере – 0,33 м/с

Содержание в католите:		Анодная плотность тока, А/дм ²	Начальная масса католита, г	Масса перенесенной воды в католит, г	Тип катионо-обменной мембраны
ТМАГ, %	хлоридов, %				
23,40	0,00084	10	132	69,4*	Флемион
23,69	0,00100	15	132	66,4	Флемион
22,90*	0,00110	15	132	67,0	Флемион
25,20	0,00200	15	110	62,8	Флемион
23,50	0,00110	15	132	66,0	Флемион
25,00	0,00017	20	132	44,4	Нафион
23,40	0,00084	10	132	39,34	Нафион
25,50	0,00012	15	132	39,1	Нафион
24,72	0,00017	20	132	44,4	Нафион

* Температура 25–26 °С

62,8 до 69,4 мл, а для катионообменной мембраны Нафион 324 он меньше и изменяется от 39,1 до 44,4 мл. При этом содержание хлорид-ионов в концентрате ТМАГ составляет от 0,00011 до 0,00017%, что на порядок меньше по сравнению с мембраной Флемион 811. По-видимому, повышению содержания хлоридов в концентрате ТМАГ при использовании катионообменной мембраны Флемион 811 способствует больший электроосмотический перенос воды.

На опытной установке также с увеличением концентрации ТМАГ от 10,7 до 27,8% перенос воды в католит увеличивается с 510 до 730 мл в ходе электролиза, что заметно меньше при использовании одной мембраны, а содержание хлорид-ионов в католите увеличивается с 0,002 до 0,039%. Причем резкое увеличение хлорид-ионов в ТМАГ наблюдается при его концентрации более 20,0%. К тому же, с увеличением концентрации ТМАГ существенно уменьшается выход продукта по току (табл. 4). Так, с увеличением концентрации ТМАГ от 10,7 до 28,8% выход по току уменьшается с 61,0 до 37,0%. В [11] такой характер зависимости выхода по току от концентрации щелочи объясняется, в частности, изменением влагоемкости мембран при различных концентрациях щелочи.

На лабораторной укрупненной электрохимической установке исследовано влияние concentra-

ции хлорида тетраметиламмония на процесс получения гидроксида тетраметиламмония при температуре от 40 до 42 °С (табл. 9).

Из данных, приведенных в табл. 9, видно, что при анодной плотности тока 10 А/дм² изменение концентрации хлорида тетраметиламмония в исследованном интервале от 25,5 до 29,9% практически не влияет на показатели процесса: выход по веществу, выход по току, содержание хлоридов в продукте и энергоемкость процесса. Однако удельная производительность электролизера заметно увеличивается с повышением концентрации исходного хлорида тетраметиламмония до 29,9%. Поэтому электролиз растворов хлорида тетраметиламмония целесообразно проводить с концентрацией исходной соли от 28,0 до 30,0%.

В [12] показано, что с повышением температуры от 60 до 80 °С при электролизе растворов хлорида натрия перенос хлорид-ионов в католит существенно возрастает вследствие увеличения их подвижности, а, следовательно, их скорости диффузии. К тому же, в [1–6] для получения ТМАГ рекомендуется температура не более 50 °С. Поэтому влияние температуры на процесс электросинтеза ТМАГ исследовали в узком диапазоне температур от 20 до 47 °С (табл. 10).

При увеличении температуры растворов от 20 до 47 °С, как видно из табл. 10, выход ТМАГ по

Таблица 9. Влияние концентрации хлорида тетраметиламмония на процесс получения ТМАГ. Анодная плотность тока – 10,0 А/дм², мембрана – Нафион 324, температура от 40 до 42 °С, катод – титан ВТ1–0 в виде сетки

Концентрация хлорида тетраметиламмония, %	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг	Удельная производительность, кг/м ² ·ч
25,50	23,0	0,00012	92,2	32,6	1,45	4,1
27,75	25,9	0,00010	92,5	32,2	2,28	4,3
29,90	25,0	0,00019	91,1	36,0	1,79	4,7

веществу и содержание хлоридов в продукте практически остаются неизменными, но при этом существенно снижается энергоёмкость процесса. Однако с увеличением температуры электролиза возрастает коррозионное разрушение катода, работающего в сильнощелочной среде. Как показали наши исследования, при использовании титанового катода при температуре электролиза 45–47 °С содержание примеси титана в концентрате ТМАГ составляет $45 \cdot 10^{-7}\%$, а при температуре 34–37 °С уменьшается до $23 \cdot 10^{-7}\%$. Поэтому для получения концентрата ТМАГ рекомендуется температура 25–27 °С.

Найденные условия электросинтеза концентрата ТМАГ на лабораторной установке: плотность тока от 10 до 15 А/дм², температура от 20 до 30 °С, концентрация хлорида тетраметиламмония от 28 до 30,0%, линейная скорость анолита от 0,1 до 0,3 м/с – апробированы на опытной установке с использованием катионообменной мембраны Флемион 811 (табл. 11).

При масштабировании процесса электросинтеза концентрата ТМАГ на опытной установке, как видно из данных табл. 11, достигаются аналогичный

выход продукта по веществу, составляющий от 91,4 до 92,2%, и по току – от 51 до 53,4%, большая удельная производительность электролизера и меньшая энергоёмкость процесса по сравнению с лабораторной установкой.

На опытной установке, как и на лабораторной, при использовании катионообменной мембраны Флемион 811 получают более концентрированные растворы ТМАГ, что связано с меньшим переносом воды для этой мембраны (табл. 8).

Таким образом, в результате апробации лабораторной технологии электросинтеза ТМАГ на опытной установке уточнены основные параметры электролиза: плотность тока от 10 до 15 А/дм², температура от 20 до 30 °С, концентрация хлорида тетраметиламмония от 28,0 до 30,0%, линейная скорость исходной соли в анодной камере от 0,2 до 0,3 м/с, катионообменные мембраны Флемион 811 и Нафион 324, которые позволяют получать ТМАГ с концентрацией от 20 до 25% с приемлемыми технико-экономическими показателями процесса его производства.

В [7] отмечается, что в концентрате ТМАГ содержание щелочных, щелочноземельных и переход-

Таблица 10. Влияние температуры на процесс получения ТМАГ. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 29,9%, катод-титан ВТ1–0 в виде сетки, анодная плотность тока – 10 А/дм², линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,33 м/с, линейная скорость раствора ТМАГ в катодной камере – 0,33 м/с

Тип мембраны	Температура, °С	Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг
Флемион	25–26	22,9	0,00110	93,0	54,3	1,27
Флемион	35–38	23,4	0,00084	94,2	59,5	0,52
Флемион	44–47	22,6	0,00300	94,4	54,6	1,50
МК-40*	20–22	23,8	0,00100	92,0	52,0	6,1
МК-40*	40–45	23,0	0,00200	92,0	54,0	3,4

* Линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,1 м/с

Таблица 11. Результаты получения концентрата ТМАГ на опытной установке. Концентрация хлорида тетраметиламмония – 28,0%, мембрана – Флемион 811, температура от 22 до 24 °С, анодная плотность тока – 11,0 А/дм², линейная скорость раствора хлорида тетраметиламмония в анодной камере – 0,1 м/с, катод – нержавеющая сталь X18N10T

Концентрация ТМАГ, %	Концентрация хлорид-ионов, %	Выход по веществу, %	Выход по току, %	Энергоемкость, кВт·ч/кг	Удельная производительность, кг/м ² ·ч
25,2	0,0010	91,4	51,1	1,16	7,1
25,2	0,0015	91,4	53,4	1,10	8,2
25,4	0,0020	91,6	51,3	1,20	7,2
25,2	0,0020	92,2	52,2	1,18	7,7

ных металлов, таких как Na, K, Ca, Cu, Zn, Fe, Cr, Ni, Pb, Ti, Sn, не должно превышать 0,001%, а концентрация хлоридов (ионных и латентных), формиатов или сульфатов не должна быть более 0,4%. Однако в производстве интегральных схем с нанометровыми топологическими нормами к безметалловому проявителю, изготовленному из концентрата ТМАГ, предъявляются еще более жесткие требования по содержанию примесей металлов. Их содержание в концентрате ТМАГ должно быть не более 5,0 ppb. Поэтому дальнейшие исследования по разработке технологии получения концентрата ТМАГ продолжают в направлении обеспечения в нем примесей металлов не более 5,0 ppb, что соответствует современному уровню качества этого продукта.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Настоящее исследование отражает начальный этап разработки технологии получения концентрата ТМАГ мембранным электролизом водного раствора хлорида тетраметиламмония и направлено на оценку выбранного направления синтеза целевого продукта, качества используемого сырья: деионизованной воды и хлорида тетраметиламмония, технико-экономических показателей электросинтеза, а также типа катионообменных мембран и качества получаемого концентрата ТМАГ. Правильность выбора мембранного электролиза водного раствора хлорида тетраметиламмония для разработки технологии производства концентрата ТМАГ подтверждена обстоятельными исследованиями этого технологического подхода, как в лабораторных условиях, так и с последующим его масштабированием на опытной электрохимической установке.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность за предоставленные результаты анализа примесей металлов в раз-

личных образцах концентрата тетраметиламмония гидроксида и хлорида тетраметиламмония руководителю Аналитического сертификационного испытательного центра ИПТМ РАН, к. х. н. В. К. Карандашеву, руководителю Аналитического исследовательского центра НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, к. х. н. В. М. Ретивову и его заместителю П. А. Волкову, также руководителю отдела инфраструктуры нано и микроэлектронных производств АО «НИИМЭ» А. Д. Просяну.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы подтверждают, что представленные данные не содержат конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Pat. 3523068 USA, .204–72, B01k 1/00. 1966 Process for electrolytic preparation of quaternary ammonium compounds/Eisenhauer Roy J., Gilmartin Larry D, 04.08.1970.
2. Pat. 4394226 USA, МКИ С 25 В 1/00. Electrolytic method for producing quaternary ammonium hydroxides / Wade Robert C., Guilbault Lawrence J. 19.07.1983.
3. Заявка 63-109183 Японии, МКИ С 25 В 3/00. Способ получения высокочистого гидроксида четвертичного аммония / Такахаси Сюдзи, Утияма Макота, Сева Дэнко, опубл. 13.05.1988.
4. Заявка 57-181385 Японии, МКИ С 25 В 3/00. Электросинтез четвертичного аммониевого гидроксида / Хирада Хироюки, Курори \ Эндзиниэдзу, опубл. 08.11.1982.
5. Заявка 57-155390 Японии, МКИ С 25 В 3/00. Электролитическое получение четвертичных аммониевых гидроксидов / Терен Хидэ, Ота Сиро, Симидзу Дзюмпэй, Тамура Нориеси, Кихара Кунио. опубл. 25.09.1982.

6. Pat. № 4776929 USA, МКИ С 25 С 1/00. Process for production of quaternary ammonium hydroxides / Aoyama Tetsuo, Shima Eiji, Ishikawa Jiro, Sakurai Naoto. 11.10.1988.
7. Пат. 2413796 Российская Федерация, МПК С25В3/00 Способ синтеза гидроксида органических солей / Агупов В. К., Чайка М. Ю., Беседин В. В.: заявитель и патентообладатель ОАО Воронежское специальное конструкторское бюро «Рикон». – № 2010112556; заявл. 31.03.2010; опубл. 10.03.2011.
8. Заявка 59-193289 Японии, МКИ С 25 В 3/04 Электросинтез высокочистых четвертичных аммониевых гидроокисей / Такахаси Сюдзи, Сева Дэнко. опубл. 01.11.1984.
9. **Томилов А. П., Майрановский С. Г., Фиошин М. Я.** Электрохимия органических соединений. – Л.: Химия, 1968. 592 с.
10. **Якименко Л. М.** Электродные материалы в прикладной электрохимии. – М.: Химия, 1977. 264 с.
11. **Ромашин О. П., Рябов Э. Ф., Кубасов В. Л.** Электролиз растворов NaCl с катионообменными мембранами // Хим. пром. 1978. № 10. С. 764–766.
12. **Меньшакова Н. И., Кришталик Л. И., Кубасов В. Л.** Перенос иона хлора через катионообменную мембрану при электролитическом получении щелочи // Электрохимия. 1977. Т. 13. № 11. С. 1732–1734.

Формирование кристаллов гидратов фосфониевых соединений при анизотропном травлении поликристаллического кремния в галогенсодержащей плазме

► С. И. Янович
АО «НИИМЭ»

Выявлен эффект образования кристаллов гидратов фосфониевых соединений после анизотропного травления поликристаллического или эпитаксиального кремния в галогенсодержащей плазме. Эффект наблюдается на пластинах до проведения обработки в жидких средах. В случае последующего использования маски, с помощью которой плазменным травлением создавался топологический рисунок в кремнии, для последующих операций ионного легирования структур существует фатальный риск снижения процента выхода годных и уровня надежности полупроводниковых приборов. Выявлены условия проявления эффекта, его развитие во времени и механизм формирования кристаллов на поверхности. Предложены меры по исключению рисков появления кристаллов гидратов фосфониевых соединений.

Phosphonium Hydrates Crystals Growth After Anisotropic Halogen Containing Plasma Etching of Polycrystalline Silicon

S. I. Yanovich

MERI SC

An effect of phosphonium hydrates crystals growth after anisotropic halogen containing plasma etching of epitaxial or polycrystalline silicon was discovered. Effect was observed before wafer wet clean processing. In case of consequent use of residual resist mask for next process steps like ion implant there is a risk of drastic device yield and reliability drop. Phosphonium hydrates crystals growth conditions were studied and their development on wafer surface within post-operation time frame as well. Preventive measures for phosphonium hydrates crystals growth total elimination is proposed.

ВВЕДЕНИЕ

Конструктивно-технологические аспекты формирования субмикронных транзисторных структур накладывают целые комплексы взаимосвязанных требований, как к физическим элементам субмикронных ИС, так и к процессам их формирования. Одним из таких фундаментальных требований современных технологий является принцип самосовмещения функциональных технологических элементов при формировании топологической структуры интегральных схем [1]. В частности принцип самосовмещения наиболее ярко представлен в процессе изготовления интегральных схем на планарных полевых транзисторах с изо-

лированным затвором, когда сформированный из пленки поликристаллического кремния, легированного фосфором, затвор транзистора служит маской при ионном легировании исток-стоковых областей. Затвор в этом случае маскирует область канала транзистора при формировании высоколегированных истоков и стоков [2]. Однако существуют оригинальные технологические решения, при которых для маскирования при последующем ионном легировании используется остаточная фоторезистивная или неорганическая маска, сохранившаяся после анизотропного травления поликристаллического кремния [3, 4]. Однако, в случае использования остаточной маски после анизотропного

травления поликристаллического кремния, следует принимать во внимание некоторые непредвиденные эффекты. В частности при использовании после анизотропного травления поликристаллического кремния остаточной фоторезистивной маски для последующего ионного легирования был впервые обнаружен эффект образования на поверхности пластины кристаллов, сравнимых по размерам с элементами топологического рисунка интегральной схемы. Визуальный контроль поверхности при помощи оптического микроскопа непосредственно после окончания процесса плазменного травления не обнаруживал никаких загрязнений на поверхности пластин. Однако повторная инспекция спустя три часа выявила на поверхности проконтролированных ранее областей пластин множество частиц различного размера (рис. 1). Последующая еще через шесть часов инспекция обнаружила, что с поверхности пластин исчезли множественные мелкие частицы, а вместо этого возникли крупные частицы в виде треугольных пирамид (рис. 2). В некоторых областях пластин плотность пирамидальных частиц составляла до 10^5 см⁻². Кристаллические образования с размерами, сравнимыми с элементами топологии, будут полностью маскировать занимаемые участки от имплантируемых ионов, что приведет к катастрофическому снижению выхода годных кристаллов, также резко снизит надежность таких микросхем.

Целью настоящей работы является изучение условий возникновения кристаллов на поверхности пластин после анизотропного плазменного травления

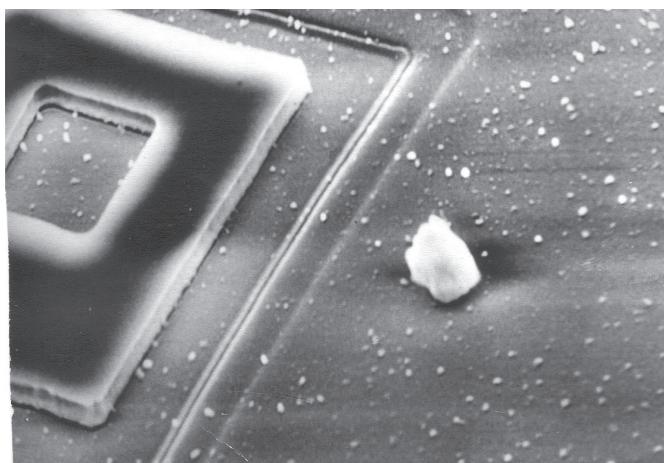


Рис. 1. Частицы, образовавшиеся через три часа после травления поликристаллического кремния, легированного фосфором, в плазме газовой смеси $SF_6 + C_2F_3Cl_3$

поликристаллического кремния, их природу и выявить способы исключения появляющихся дефектов подобного рода.

ЭКСПЕРИМЕНТ

В ходе экспериментов проводилось плазменное травление пластин монокристаллического кремния р- и п-типа, эпитаксиальных слоев кремния р⁺- и п⁺-типа и пленок поликристаллического кремния толщиной 0,5 мкм, осажденного пиролитическим разложением моносилана при температуре 660 °С и пониженном давлении, нелегированных, а также легированных бором и фосфором. Легирование поликристаллического кремния проводилось при температуре 900 °С в среде, содержащей пары BBr_3 или PCl_3 соответственно. Поверхностное сопротивление пленок после легирования составляло 20–50 Ом/□. Эпитаксиальные слои толщиной 2–4 мкм выращивались при температуре 1150 °С и атмосферном давлении в среде газовых смесей $SiCl_4 + H_2 + B_2H_6$ или $SiCl_4 + H_2 + PH_3$. Фоторезистивная маска формировалась из позитивного фоторезиста проявлением с помощью 2%-ного водного раствора Na_3PO_4 с экспозицией примерно 80% площади пластины.

Травление пластин проводилось в тлеющем разряде общеизвестных парогазовых смесей, таких как SF_6 [5], $SF_6 + C_2F_3Cl_3$ [6], $SF_6 + CFCl_3$ [7], $SF_6 + C_2F_4Br_2$ [6]. Кроме этого применялись и нетрадиционные газовые смеси, такие как $CCl_4 + O_2$, $SF_6 + CCl_4$, $CCl_4 + N_2$, $CF_4 + O_2$, $SF_6 + CF_3I$, $SF_6 + PCl_3$, PCl_3 . Кроме того, для случая травления в одном SF_6 была добавлена прокачка

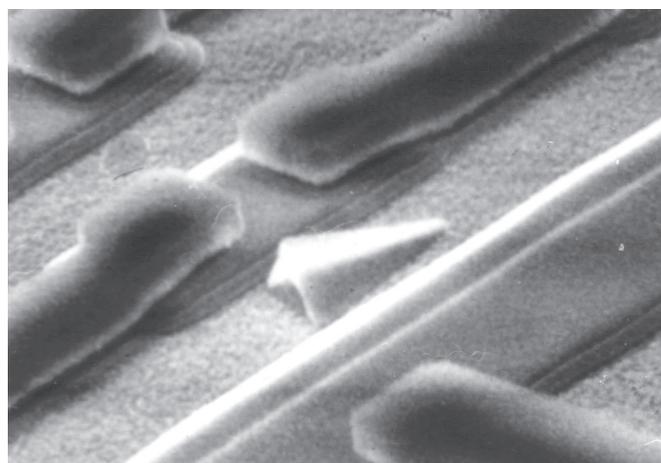


Рис. 2. Частицы, образовавшиеся через шесть часов после травления поликристаллического кремния, легированного фосфором, в плазме газовой смеси $SF_6 + C_2F_3Cl_3$

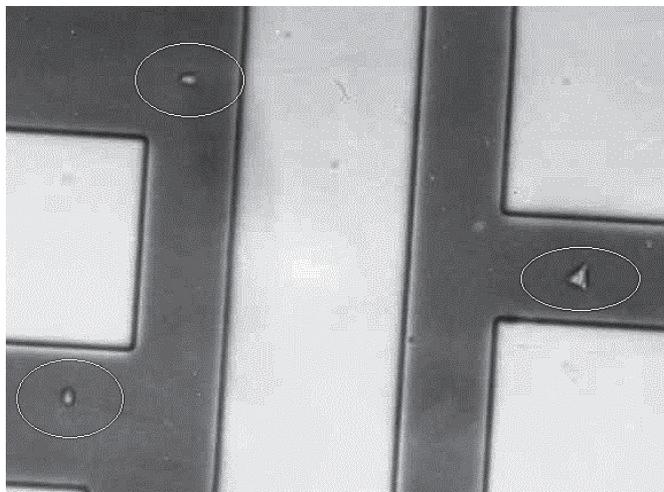


Рис. 3. Участки маскирования кристаллами от ионного легирования

реактора с потравленными пластинами парами PCl_3 без плазменного разряда в течение 5 мин. Травление пластин осуществлялось в плоско-параллельных реакторах с подведением ВЧ-мощности частотой 440 кГц, 5,28 или 13,56 МГц к верхнему электроду. После травления все пластины хранились в негерметичных контейнерах в условиях чистого производственного помещения в течение 8 часов, после чего проводилась визуальная инспекция с помощью

оптического микроскопа. После визуального контроля часть пластин помещалась в ванну с деионизованной водой на 30 с, а часть подвергалась промывке струей деионизованной воды на центрифуге в течение 5 с со скоростью вращения 400 об/мин.

Для тех комбинаций газовых смесей и травившихся подложек, при которых наблюдался устойчивый рост кристаллов, было проведено два дополнительных эксперимента. В первом – пластины после проведения процесса травления поликристаллического кремния перед выгрузкой из реакционной камеры выдерживались в условиях вакуума в течение 1 ч. Во втором – дополнительном эксперименте после проведения первой инспекции пластины помещались на охлаждаемый столик для образования конденсата влаги на поверхности, после чего вновь проводилась визуальная инспекция непосредственно после конденсации влаги и спустя 12 ч выдержки пластин в контейнере в условиях чистого производственного помещения.

Наконец, для проверки маскирующих свойств образующихся кристаллов на пластине с такими кристаллами провели операцию ионного легирования ионами фосфором с энергией 60 кЭв и дозой 10^{15} см^{-2} , после чего фоторезист с пластины был удален, и было проведено окисление в парах воды при температуре 950 °С.

Таблица 1. Частота регистрации кристаллов в поле зрения микроскопа по выборке из 20 точек на пластине

№	Парогазовая смесь	n-Si	p-Si	n-EPI-Si	p-EPI-Si	n-poly-Si	p-poly-Si	Undoped poly-Si
1	$\text{CF}_4 + \text{O}_2$	0	0	0	0	0	0	0
2	SF_6	0	0	0	0	0	0	0
3	$\text{CCl}_4 + \text{N}_2$	0	0	60	0	100	0	0
4	$\text{CCl}_4 + \text{O}_2$	0	0	50	0	80	0	0
5	$\text{SF}_6 + \text{CCl}_4$	0	0	55	0	100	0	0
6	$\text{SF}_6 + \text{C}_2\text{F}_3\text{Cl}_3$	0	0	30	0	90	0	0
7	$\text{SF}_6 + \text{CFCl}_3$	0	0	40	0	85	0	0
8	$\text{SF}_6 + \text{C}_2\text{F}_4\text{Br}_2$	0	0	20	0	70	0	0
9	$\text{SF}_6 + \text{CF}_3\text{I}$	0	0	10	0	55	0	0
10	$\text{SF}_6 + \text{PCl}_3$	0	0	75	35	100	75	80
11	PCl_3	0	0	80	50	100	85	85
12	$\text{SF}_6 + \text{продувка с } \text{PCl}_3$	0	0	0	0	0	0	0

РЕЗУЛЬТАТЫ

Маскирующий эффект. Маскирование образующимися кристаллами от ионного легирования кремния наглядно проиллюстрировано на рис. 3. Выделенные участки представляют области с тонким слоем оксида кремния (примерно 0,05–0,06 мкм) в отличие от окружающей их пленки оксида кремния толщиной 0,32 мкм, выросшего на высоколегированном кремнии.

Условия появления кристаллов. Результаты анализа условий появления кристаллов на поверхности пластин после анизотропного травления кремния приведены в табл. 1. Из таблицы следует, что появление кристаллов определяется наличием определенных химических элементов в соединениях парогазовой смеси, использованной в процессе плазменного травления, и типом пленки, подвергшейся травлению. Обнаружено три обязательных условия возникновения кристаллов на поверхности пластин:

1. присутствие фосфора в составе соединений парогазовой смеси или в составе травящейся пленки;
2. присутствие в составе соединений парогазовой смеси галогенов, отличных от фтора.
3. формирование травящейся пленки в присутствии водорода, так как появление кристаллов никогда не наблюдалось при травлении кремниевых пластин, выращенных по методу Чохральского [8].

Принимая во внимание, что в условиях плазмы ВЧ-разряда на поверхности пластин могут образовываться только достаточно простые соединения, логично рассматривать простейшие соединения, одновременно содержащие фосфор, водород и галоген, кроме фтора.

Свойства кристаллов и образующих их соединений. Как видно из табл. 2, искомые соединения летучи, так как концентрация кристаллов существенно снижается при дополнительной выдержке пластин в вакууме после окончания процесса травления. Тем не менее они стабильны и не разлагаются, обеспечивая процесс кристаллообразования, хотя и с меньшей плотностью. Визуальная инспекция в процессе краткой конденсации влаги на поверхности пластин продемонстрировала, что кристаллы легко разрушаются под воздействием влаги. Результат такой частичной трансформации приведен на рис. 4.

При полной конденсации, когда влага полностью покрывает пластину, все кристаллы полностью растворяются. Однако после выдержки пластин в течение 12 ч, обнаружилось, что кристаллы вновь появились на поверхности пластин. На рис. 5 представлен вид вновь образовавшегося кристалла после растворения при полной конденсации влаги.

Определение соединения. Анализ справочных материалов позволяет предположить, что ответственными за образование кристаллов являются фосфониевые соединения с общей формулой $R_4P^+X^-$, где

Таблица 2. Частота регистрации кристаллов на пластинах с поликристаллическим кремнием, легированным фосфором

№	Парогазовая смесь	Частота появления		Частота повторного появления после		
		После травления	1 ч вакуума	Конденсация	Отмывка в ванне	Отмывка струей
1	$CCl_4 + N_2$	100	15	100	0	0
2	$CCl_4 + O_2$	80	5	90	0	0
3	$SF_6 + CCl_4$	100	10	100	0	0
4	$SF_6 + C_2F_3Cl_3$	90	5	60	0	0
5	$Sf_6 + CFCl_3$	85	0	85	0	0
6	$SF_6 + C_2F_4Br_2$	70	0	40	0	0
7	$SF_6 + CF_3I$	55	0	35	0	0
8	$SF_6 + PCl_3$	100	15	95	0	0
9	PCl_3	100	25	100	0	0

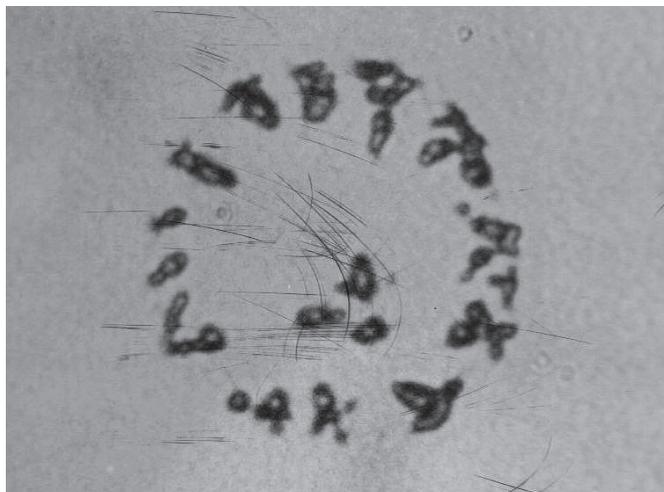


Рис. 4. Разрушенный под действием влаги кристалл

R – водород, либо алкиловая или ариловая группа;
P – фосфор; X – Cl⁻, Br⁻, I⁻ или OR⁻.

Простейшим в этой группе соединений является H₄P⁺Cl⁻ [9]. Согласно известным данным, это соединение легко растворяется в воде и других полярных растворителях. Кроме того, оно может присоединять молекулы воды и образовывать гидраты вида H₄P⁺Cl⁻ × nH₂O, которые могут существовать в форме кристаллов кубической формы [10].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Было обнаружено, что при анизотропном плазменном травлении пленок эпитаксиально выращенных кремния или поликристаллического кремния, легированных фосфором, на поверхности полупроводниковых пластин в числе прочих продуктов реакции адсорбируются фосфониевые соединения, простейшим из которых является H₄P⁺Cl⁻ × nH₂O. При выдержке пластин в условиях чистого производственного помещения адсорбированный на поверхности пластин фосфоний присоединяет молекулы воды, образуя гидрат фосфония, молекулы которого мигрируют по поверхности пластин и ассоциируются в кристаллы кубической формы, организованные в виде трехгранных пирамид с размерами порядка единиц микрон.

При проведении последующих технологических операций, подразумевающих использование остаточной фоторезистивной маски, в зависимости от межоперационного времени хранения можно столкнуться с резким снижением выхода годных приборов и их надежности.

Эффективным способом устранения проблемы образования кристаллогидратов фосфония является

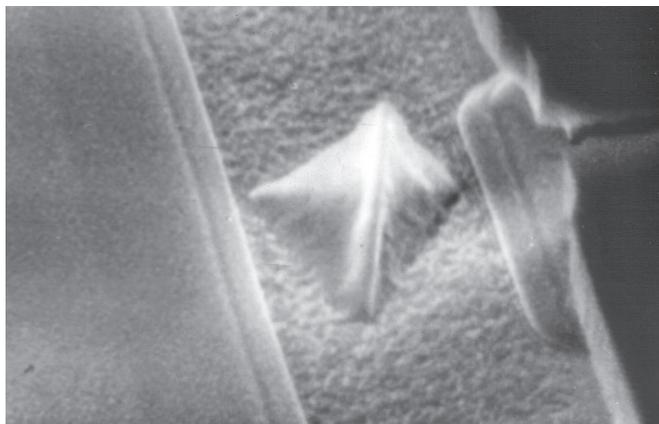


Рис. 5. Кристалл, образовавшийся после растворения при полной конденсации влаги на пластине

отмывка пластин деионизованной водой, которая полностью растворяет фосфоний и удаляет его с поверхности пластин.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Красников Г. Я.** Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП транзисторов / 2-е изд., испр. – М.: ТЕХНОСФЕРА, 2011.
2. **Parriglio L.** VLSI process integration – VLSI Technology. S. Zse. 1986. V. 2. PP. 210–211.
3. **Зеленцов А. В., Сельков Е. С. и др.** А. С. № 1023969, 1985.
4. **Hidenori Arita.** Manufacture of Field-Effect Transistor – Mitsubishi Electronic Corp/, Japan patent 63-202070 (1987).
5. **Parrens P., Raffat E., Jeuch P.** A Complete Dry Etching Process for MOSFET's with Submicron Gate Length // Revue Phys. 1982, no 6, pp. 383–388, 1982.
6. **Гущин О. П., Янович С. И. и др.** А. С. 1,391,379 (1989), СССР.
7. **Mieth M., Barker A., Corn G.** Plasma Etching Using SF₆ and Chlorine Gases // Semiconductor International, 1984, no 5, pp. 222–227.
8. **Zse S.** Semiconductor Devices Physics, 1984, vol. 1, pp. 72–75, 133.
9. Химическая энциклопедия / Под ред. И. Л. Кнунянца. – М.: Советская Энциклопедия, 1990. Т. 2. С. 1008–1009.
10. Справочник химика / Под ред. Б. П. Никольского. – М.-Л.: Химия, 1968. Т. 5. С. 852.

Расчет термодинамических потенциалов орторомбической фазы в оксиде гафния в зависимости от температуры и давления

► А. Г. Итальянцев, В. С. Константинов
АО «НИИМЭ»

В работе представлены результаты теоретических расчетов термодинамических потенциалов полярной орторомбической, моноклинной и тетрагональной фаз оксида гафния. Вычисления выполнены методами расчетов из первых принципов в недеформированных ячейках и в напряженных структурах, в которых изотропное давление изменялось в диапазоне от 5 до 40 ГПа. Потенциалы рассчитывались при абсолютной температуре до 2000 К. Показано, что орторомбическая фаза стабилизируется при давлении 30 ГПа и температуре до 600 К. Учет тепловых флуктуаций атомов сдвигает режимы стабилизации орторомбической фазы в область меньших давлений и температур. Установлено, что зависимость термодинамического стимула ΔF_{ft} перехода $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ имеет немонотонный характер и по температуре, и по давлению. Давление способствует переходу $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ вплоть до значений 20 ГПа. Дальнейший рост давления приводит к уменьшению термодинамического стимула ΔF_{ft} , и при давлении, большем 35 ГПа, ΔF_{ft} становится отрицательным. В условиях давления до 3,6 ГПа возрастание температуры уменьшает стимул перехода, при большем – увеличивает его. Кроме того, зависимости $\Delta F_{ft}(T)$ при давлениях 5 и 10 ГПа имеют ярко выраженные минимумы в области комнатных температур.

Calculations of Temperature and Pressure Dependences of Thermodynamical Potentials of Orthorhombic Phase in Hafnia

A. G. Italyantsev, V. S. Konstantinov,
MERI SC

The results of theoretical calculations of thermodynamical potentials of polar orthorhombic, monoclinic, and tetragonal phase of hafnium oxide are presented. The ab-initio calculations were carried out for the unstrained structures and the strained ones under an isotropic pressure varying from 5 until 40 GPa. The potentials were calculated at absolute temperatures until 2000 K. It is shown that orthorhombic phase is stabilized at a pressure of 30 GPa and temperatures until 600 K. The regimes of the stabilizations of orthorhombic phase shift to lower temperatures and pressures if one takes in account atomic thermal fluctuations. The dependences of the thermodynamical potential ΔF_{ft} of the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ transition are ascertained to be non-monotonic both on pressure and temperature. Pressure favours the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ transition until the value of 20 GPa. The further growth of pressure results in a decrease of ΔF_{ft} and the potential ΔF_{ft} becomes negative at pressures greater than 35 GPa. At pressures lower than 3.6 GPa, a temperature growth reduces the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ stimuli and enhances it otherwise. Moreover, it is discovered that the $\Delta F_{ft}(T)$ curves at 5 and 10 GPa have strong minima at room temperatures.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы активно ведутся исследования в области энергонезависимой памяти на новых физических принципах: магниторезистивном, сегнетоэлектрическом эффектах и на эффекте фазового перехода [1, 2]. Таким образом, встает задача поиска материаловедческих решений, хорошо масштабируемых и интегрируемых в стандартную КМОП-технологию.

В частности, одним из успешных решений в данной области оказался оксид гафния, который используется не только как high-k-диэлектрик или функциональный слой резистивной памяти [3, 4], но может проявлять и сегнетоэлектрические свойства. В настоящее время полагается [5-7] по аналогии с оксидом циркония, что сегнетоэлектрический эффект в HfO_2 обусловлен присутствием полярной орторомбической фазы Pca_2_1 . Впервые эффект обратимого переключения электрической поляризации в тонких пленках HfO_2 под действием поперечного электрического поля продемонстрирован экспериментально в [8] и подтвержден в последующих работах (см., например, обзор [9]). Переключаемая поляризация, интегрируемость в стандартную КМОП-технологию и химическая пассивность по отношению к кремнию и его оксиду делают HfO_2 многообещающим материалом в приложениях энергонезависимой памяти.

Для использования HfO_2 в качестве сегнетоэлектрического слоя необходимо учитывать особенности стабилизации полярной орторомбической фазы. Так, пленки, формируемые методом атомно-слоевого осаждения с одновременным легированием атомами А, проявляют стабильные сегнетоэлектрические свойства, только если подвергаются температурному отжигу после нанесения верхнего слоя – электрода. При отжиге в многослойной структуре возникают механические напряжения вследствие различия коэффициентов термического расширения материалов слоев. Авторы [10] предположили, что эти напряжения способствуют возникновению орторомбической фазы f-HfO_2 . Как отмечается в той же работе [10], рост толщины пленок HfO_2 свыше 10–15 нм приводит к уменьшению этих напряжений и, как следствие, ослаблению или даже полному исчезновению сегнетоэлектрических свойств.

Таким образом, можно выделить три фактора, определяющих содержание орторомбической фазы в HfO_2 , проявляющей сегнетоэлектрический эффект. Это – стехиометрический состав $\text{Hf}_x\text{A}_y\text{O}_2$, температура отжига Т и неоднородные механические напряжения, возникающие в многослойной струк-

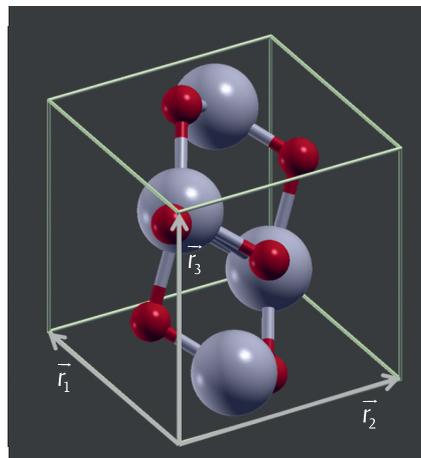


Рис.1. Базовые векторы в ячейке моноклинной фазы оксида гафния

туре при отжиге. Очевидно, что число комбинаций этих факторов с учетом того, что в качестве примеси А могут выступать атомы Zr, Si, Al, La и другие, настолько велико, что полное экспериментальное исследование структур практически невозможно. Поэтому в данной работе проведено соответствующее исследование методом математического моделирования.

ПАРАМЕТРЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Пусть кристаллические структуры моноклинной $m\text{-HfO}_2$, тетрагональной $t\text{-HfO}_2$ и орторомбической $f\text{-HfO}_2$ фазы HfO_2 каждой объемом $V_\varphi(p)$, состоят из $N=1$ элементарных ячеек с ν атомами в каждой из них. Индекс φ обозначает одну из перечисленных фаз: m , t , или f . Решеточная часть свободной энергии этих фаз рассчитывалась при абсолютной температуре Т до 2000 К и изотропном давлении p в недеформированных, $p=0$, и напряженных структурах, в которых p изменяется в диапазоне от 5 до 40 ГПа.

Для каждого значения изотропного давления p рассчитывались положения атомов и объем $V_\varphi(p)$ ячеек фаз $\varphi\text{-HfO}_2$. Положение атомов описывалось в координатах базисных векторов ячейки \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 с общим началом координат. Длины векторов соответствовали длинам граней параллелепипеда, который ограничивал объем рассчитываемой ячейки фазы $\varphi\text{-HfO}_2$, как показано на рис. 1. Таким образом, положение атома А описывалось в виде суммы:

$$\vec{r}_A = X_1^A \vec{r}_1 + X_2^A \vec{r}_2 + X_3^A \vec{r}_3, \quad (1)$$

где \vec{r}_1 , \vec{r}_2 , \vec{r}_3 – базисные векторы ячейки, X_1^A , X_2^A , X_3^A – безразмерные координаты атома.

В последующих этапах расчетов полученные координаты атомов и объем $V_\varphi(p)$ фаз $\varphi\text{-HfO}_2$ фиксирова-

лись, и по известной формуле [11 Ландау] рассчитывалась свободная энергия Гельмгольца:

$$F_{\varphi} = U_{\varphi} + F_{\varphi}^{vib}(T) - TS_{\varphi}, \quad (2)$$

где U_{φ} – энергия основного состояния, $F_{\varphi}^{vib}(T)$ – вклад фоновых колебаний при абсолютной температуре T , S_{φ} – колебательная энтропия. Вклад фоновых колебаний $F_{\varphi}^{vib}(T)$ включает энергию нулевых колебаний. Фононный вклад в свободную энергию рассчитывался на основе плотности фононных состояний $g_{\alpha}(\omega)$ [11 Ландау]:

$$F_{\varphi}^{vib}(T) = N\varepsilon_0 + TV_{\varphi}(p) \sum_{\alpha=1}^{3v} \int \ln \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \right] g_{\alpha}(\omega) d\omega, \quad (3)$$

где α – индекс нормального колебания, $\varepsilon_0 = \varepsilon_0(N/V_{\varphi})$ – энергия нулевых колебаний. Суммирование в (3) производится по всем ветвям спектра, а интегрирование – по значениям волнового вектора \vec{k} фононов в одной ячейке обратной решетки.

Колебательная энтропия S_{φ} рассчитывалась согласно [11 Ландау] по формуле:

$$S_{\varphi} = \sum_{\alpha=1}^{3v} \int \ln \frac{eU_{\alpha}(\vec{k})}{\hbar\omega_{\alpha}(\vec{k})} d\Omega, \quad (4)$$

где $U_{\alpha}(\vec{k})d\Omega$ – энергия тепловых колебаний в элементе $d\Omega = d^3k dV / (2\pi)^3$, который равен числу состояний фононов в α -ой ветви спектра, приходящихся на интервал d^3k значений волнового вектора фононов и элемента dV пространственного объема фазы φ , e – основание натурального логарифма, \vec{k} – волновой вектор фонона.

Практические вычисления по формулам (1)-(4) выполнялись в программном комплексе Quantum Espresso [12]. При описании электронной плотности атомов кислорода и гафния использовались обменно-корреляционный функционал Perdew-Burke-Ernzerhof и соответствующие ему псевдопотенциалы [13, 14]. Для описания волновых функций и дискретизации импульсного пространства применялась сетка Монкруста-Пака размера $4 \times 4 \times 4$ [15] и базис плоских волн с энергиями до $200 \text{ Ry} = 200 \cdot 13,6 \text{ эВ} = 2720 \text{ эВ}$. Начальные значения базисных векторов, углов между ними в примитивных ячейках фаз и начальные координаты атомов взяты из базы [16]. Расчет энергии основного состояния завершался, если разница энергий основного состояния последовательных итераций оказывалась меньше $10^{-7} \text{ Ry} = 10^{-7} \cdot 13,6 \text{ эВ} = 1,36 \cdot 10^{-6} \text{ эВ}$. Расчет положения атомов в ячейке проводился до тех пор, пока в процессе релаксации ячеек межатомные силы не становились меньше $10^{-3} \text{ Ry/Bohr} = 10^{-3} \cdot 2,18 \cdot 10^{-11} / 5,29 \cdot 10^{-9} =$

$= 4,12 \cdot 10^{-6}$ (эрг/см) $= 2,57 \cdot 10^6$ (эВ/см) и разница энергий основных состояний между последовательными итерациями не становилась меньше $10^{-4} \text{ Ry} = 10^{-4} \cdot 13,6 \text{ эВ} = 1,36 \cdot 10^{-3} \text{ эВ}$.

На рис. 2 представлены структуры элементарных ячеек оксида гафния основной, моноклинной, фазы $m\text{-HfO}_2$ (№ 14, $P2_1/c$), тетрагональной фазы $t\text{-HfO}_2$ (№ 137, $P4_2/nmc$), кубической фазы (№ 225, $Fm\bar{3}m$), а также в интересующей нас в данной работе орторомбической фазы $f\text{-HfO}_2$ (№ 29, $Pca2_1$) вместе с осью переключения поляризации в ней. Существование оксида гафния в данных фазах подтверждено многими экспериментальными работами (см. обзор [9]). Помимо этого, в том же обзоре отмечается возможность формирования HfO_2 в орторомбических фазах $Pbca$ и $Pnma$, которые в изученных диапазонах температур и давлений не играют определяющей роли, и поэтому они исключены из рассмотрения в настоящей работе. Из рассмотрения также исключена кубическая фаза, поскольку в исследованных диапазонах давлений и температур она является нестабильной [17].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1 представлены рассчитанные величины базисных векторов и углов между ними в рассматриваемых фазах HfO_2 при нулевом давлении. Результаты, полученные в настоящей работе, отмечены *, сравнительные результаты, известные из литературы – отмечены ссылками. Как видно, получен-

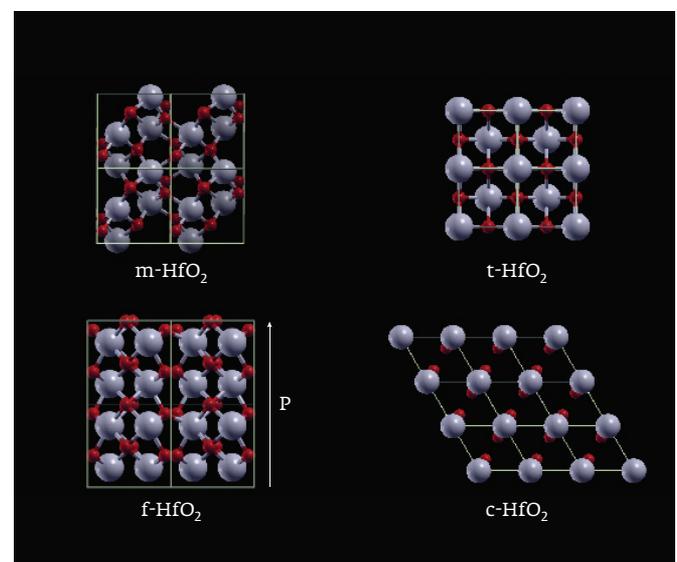


Рис. 2. Проекция структур элементарных ячеек $m\text{-HfO}_2$, $t\text{-HfO}_2$, $f\text{-HfO}_2$ и $c\text{-HfO}_2$ на плоскость (001): красным показаны атомы кислорода, серым – гафния

Таблица 1. Рассчитанные в настоящей работе базисные вектора и углы между ними $m\text{-HfO}_2$, $t\text{-HfO}_2$ и $f\text{-HfO}_2$ при нулевом давлении и их сравнение с литературными данными

Фаза	Простр. группа	Состав ячейки	a, Å	b, Å	c, Å	β , °	Ссылка
$m\text{-HfO}_2$	№ 14, $P2_1/c$	$4\text{Hf}+8\text{O}$	5,09°	5,15°	5,26°	99,6°	[18],
			5,15	5,20	5,33	99,7	[19],
			5,09	5,16	5,26	99,7	[20],
			5,12	5,19	5,28	99,4	[21],
			5,07	5,14	5,29	99,7	[22]
			5,13	5,19	5,30	99,7	
$t\text{-HfO}_2$	№ 137, $P4_2/nmc$	$2\text{Hf}+4\text{O}$	3,55°	3,55°	5,17°	90°	[19],
			3,56	3,56	5,12	90	[23],
			3,58	3,58	5,20	90	[22]
			3,58	3,58	5,20	90	
$f\text{-HfO}_2$	№ 29, $Pca2_1$	$4\text{Hf}+8\text{O}$	5,05°	5,08°	5,27°	90°	[18],
			5,06	5,09	5,27	90	[19],
			4,90	4,92	5,10	90	[24]
			5,10	5,11	5,90	90	

ные значения находятся в хорошем соответствии с известными теоретическими и экспериментальными данными, что говорит о корректности выбранной расчетной схемы.

На рисунке 3 представлены рассчитанные зависимости свободной энергии, приведенные на одну формульную единицу тетрагональной и полярной орторомбической фаз HfO_2 относительно ее моноклинной фазы, то есть зависимости термодинамических потенциалов $\Delta F_{mf}(T) = F_f - F_m$ и $\Delta F_{mt}(T) = F_t - F_m$. Зависимости при давлениях 5 и 10 ГПа не показаны, поскольку они имеют характер схожий с тем, что имеют кривые при давлении 20 ГПа. Свободная энергия моноклинной фазы $m\text{-HfO}_2$ взята в качестве реперного, нулевого уровня. Как видно из рис. 3, $\Delta F_{mf}(T)$ и $\Delta F_{mt}(T)$ в большей части рассмотренного температурного диапазона положительны. Это подтверждает многочисленные теоретические и экспериментальные данные о том, что $m\text{-HfO}_2$ – самая термодинамически стабильная фаза.

Термодинамический потенциал тетрагональной фазы $\Delta F_{mt}(T)$ в большей части рассмотренного диапазона давлений и температур удовлетворяет соотношению $0 < \Delta F_{mf}(T) < \Delta F_{mt}(T)$, то есть тетрагональная фаза обладает большей свободной энергией, чем моноклинная и орторомбическая фазы. С увеличением изотропного давления кривые $\Delta F_{mt}(T)$ сдвигаются в область меньших свободных энергий, и при давлении $p=40$ ГПа они становятся отрицательными так, что выполняется

соотношение $\Delta F_{mt}(T) < \Delta F_{mf}(T) < 0$. Таким образом, можно утверждать, что давление является существенным фактором для стабилизации тетрагональной фазы.

Особенность термодинамического потенциала орторомбической фазы $\Delta F_{mf}(T)$ состоит в том, что она расположена между $\Delta F_{mt}(T)$ и реперным уровнем моноклинной фазы. Увеличение изотропного давления, как и в случае тетрагональной фазы, приводит к уменьшению уровня свободной энергии, однако смещение происходит медленнее. Необходимо отметить, что при давлении $p=30$ ГПа и температуре до 600 К справедливо соотношение $\Delta F_{mf}(T) < 0 < \Delta F_{mt}(T)$, то есть орторомбическая фаза – наиболее термодинамически выгодная.

Таким образом, при указанных условиях орторомбическая фаза $f\text{-HfO}_2$ может быть стабилизирована по отношению к моноклинной и тетрагональной. Кроме того, при давлении $p=40$ ГПа и температуре до 1000 К $\Delta F_{mf}(T)$ также отрицателен, но при этом свободная энергия тетрагональной фазы меньше, то есть $\Delta F_{mt}(T) < \Delta F_{mf}(T) < 0$.

На рис. 4 представлены две p - T -диаграммы, анализирующие соотношение рассчитанных свободных энергий ячеек. Первая диаграмма на рис. 4а показывает, какая из рассмотренных фаз обладает наименьшей свободной энергией Гельмгольца. На второй диаграмме (рис. 4б) представлены уточненные данные, которые учитывают конечную дисперсию теплового движения атомов. На диаграммах серым цветом отмечены те сочетания изотропного давления p и температуры T , при которых самая термодинамически стабильная фаза – $m\text{-HfO}_2$, зеленым – $t\text{-HfO}_2$, красным – $f\text{-HfO}_2$. На рис. 4б оранжевым выделены те области, в которых разница свободной энергии орторомбической фазы F_f и свободной энергии наиболее термодинамически стабильной фазы F_{\min} меньше $k_B T$, то есть выполнено условие $|F_f - F_{\min}| < k_B T$. При учете этого фактора режимы возможной стабилизации $f\text{-HfO}_2$ сдвигаются в область меньших давлений и температур. Например, стабилизация орторомбической фазы становится возможной уже при давлении 30 ГПа и температуре 200 К и выше или при давлении 10 ГПа и температуре 900 К и выше. Полученные

расчетные данные подтверждают результаты [25], где показано, что при доле Si $\chi=2,6-5,6\%$ в составе матрицы HfO_2 , требуется отжиг $T=1000\text{ }^\circ\text{C}$, $\tau=20\text{ с}$, и согласуется с данными работы [26], в которой установлено, что для HfO_2 с примесью Zr $\chi=50\%$ необходим быстрый отжиг $T=550\text{ }^\circ\text{C}$, $\tau=30\text{ с}$ в атмосфере N_2 .

На рис. 5 приведены зависимости термодинамического потенциала перехода $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ $\Delta F_{ft}(T) = F_t - F_f$ от изотропного давления и температуры. Особенность именно этого перехода связана с тем, что между $t\text{-HfO}_2$ фазой и $f\text{-HfO}_2$ в экспериментальных структурах энергетический барьер на порядок ниже, чем между $t\text{-HfO}_2$ и $m\text{-HfO}_2$. Как отмечается в работе [27], барьеры составляют 30

и 300 мэВ, что позволило авторам выдвинуть гипотезу о том, что орторомбическая фаза формируется именно из тетрагональной.

Как видно из рис. 5, влияние давления и температуры на ΔF_{ft} носит немонотонный характер, и трудно было бы ожидать, что во всех исследуемых диапазонах оно могло бы быть изучено экспериментально. Например, показано, что рост изотропного давления до 20 ГПа сопровождается увеличением ΔF_{ft} , то есть образование орторомбической фазы должно доминировать. При давлении свыше 35 ГПа тетрагональная фаза становится термодинамически выгоднее орторомбической. Температура может способствовать как переходу из $t\text{-HfO}_2$ в $f\text{-HfO}_2$, так и обратному переходу. При давлении 3,6 ГПа и выше

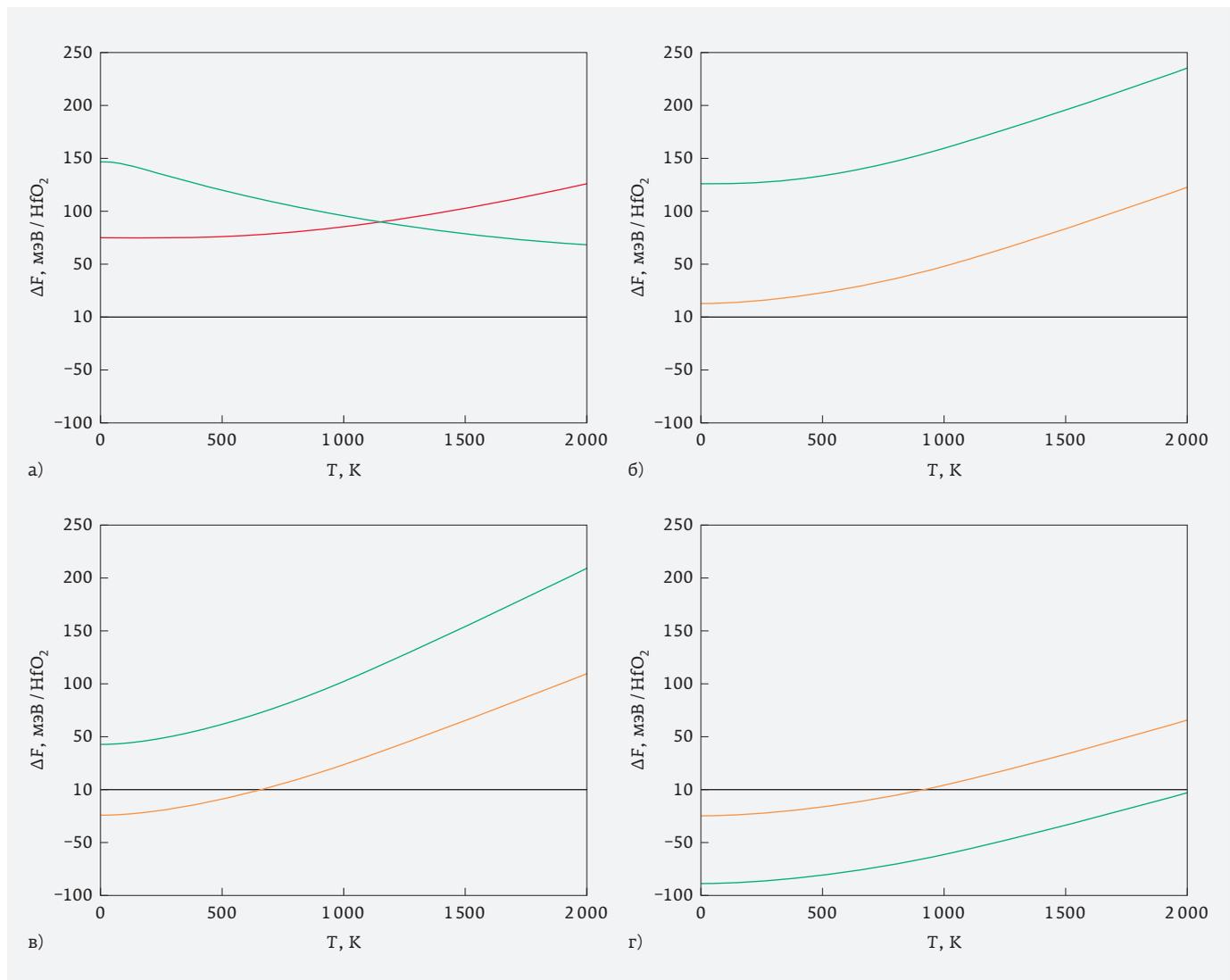


Рис. 3. Зависимости $\Delta F_{mf}(T)$ (красные кривые), ΔF_{mt} (зеленые кривые), черный – базовый уровень моноклинной фазы при изотропном давлении: а – 0 ГПа; б – 20 ГПа; в – 30 ГПа и г – 40 ГПа



Рис. 4. Фазы с наименьшей свободной энергией Гельмгольца, приходящейся на 1 HfO₂, в поле (p, T): а) T = const для всех атомов: б) с поправкой на дисперсию теплового движения атомов

стимул перехода в орторомбическую фазу ΔF_{ft} растет с увеличением температуры, а при давлениях меньших, чем 3,6 ГПа рост температуры способствует переходу в тетрагональную фазу. Помимо этого, на графиках $\Delta F_{ft}(T)$ при $p = 5$ и 10 ГПа наблюдается ярко выраженный минимум в области комнатных температур.

ВЫВОДЫ

На основе результатов расчетов из первых принципов найдены термодинамические потенциалы полярной орторомбической фазы оксида гафния при комплексном воздействии температуры и изотропных механических напряжений.

Установлено, что орторомбическая фаза стабилизируется при давлении $p = 30$ ГПа и температуре T до 600 К. Учет тепловых флуктуаций атомов сдвигает режимы стабилизации орторомбической фазы в область меньших давлений и температур.

Также установлен сложный характер зависимости термодинамического стимула перехода из тетрагональной фазы и орторомбическую от изо-

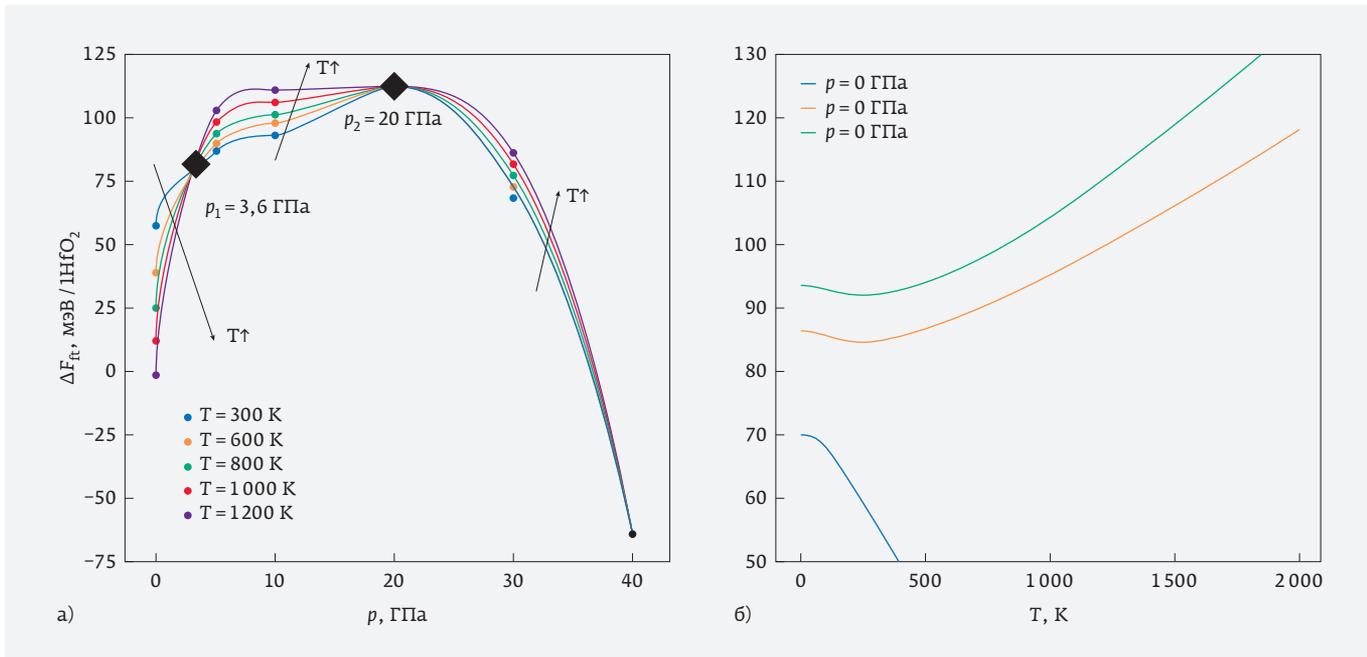


Рис. 5. Зависимость термодинамического стимула ΔF_{ft} перехода из тетрагональной фазы в орторомбическую а – от изотропного давления для температур 300, 600, 800, 1000 и 1200 К; б – от температуры для изотропных давлений $p = 0, 5$ и 10 ГПа

тропного давления и температуры. Показано, что рост изотропного давления до 20 ГПа способствует переходу $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$, но с дальнейшим увеличением давления термодинамический стимул уменьшается. Чем выше температура, тем выше термодинамический стимул ΔF_{ft} , если давление превышает 3,6 ГПа, и, наоборот, если давление менее 3,6 ГПа. Кроме того, обнаружены минимумы в области $\Delta F_{ft}(T)$ комнатных температур при давлениях $p=5$ и 10 ГПа.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают глубокую благодарность д. ф. - м. н. Михаилу Юрьевичу Барабаненкову за ценные рекомендации, руководству и сотрудникам Гибридного высокопроизводительного вычислительного комплекса (ГВВК) в составе ЦОД ФИЦ ИУ РАН, на мощностях которого были выполнены расчеты, и лично заведующей отделом, д. ф. - м. н. Каринэ Карленовне Абгарян, начальнику отдела, к. т. н. Константину Иосифовичу Воловичу и старшему научному сотруднику, к. ф. - м. н. Дмитрию Игоревичу Бажанову.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Красников Г. Я., Шелепин Н. А.** Состояние и перспективы развития технологий и элементной базы СБИС с энергонезависимой памятью // Проектирование систем на кристалле: тенденции развития и проблемы. 2010. С. 55–55.
2. **Красников Г. Я., Зайцев Н. А., Красников А. Г.** Современное состояние разработок в области энергонезависимой памяти // Нано- и микросистемная техника. 2015. № 4. С. 60–64.
3. **Батурин А. С., Булах К. В., Григал И. П., Егоров К. В., Заблоцкий А. В., Маркеев А. М., Лебединский Ю. Ю., Горнев Е. С., Орлов О. М., Чуприк А. А.** Эффект резистивного переключения в оксидных пленках $\text{Hf}_x\text{Al}_{1-x}\text{O}_y$ с переменным составом, выращенных методом атомно-слоевого осаждения // Нано- и микросистемная техника. 2013. № 6. С. 13–18.
4. **Чуприк А. А., Батурин А. С., Орлов О. М., Горнев Е. С. и др.** Ячейка энергонезависимой памяти на эффекте резистивного переключения в оксидных пленках $\text{Hf}_x\text{Al}_{1-x}\text{O}_y$ // Микроэлектроника. 2014. Т. 43. № 4. С. 243–243.
5. **Kisi E. H., Howard Ch. J., Hill R. J.** Crystal structure of orthorhombic zirconia in partially stabilized zirconia // Journal of the American Ceramic Society. 1989. Т. 72. No 9. С. 1757–1760.
6. **Howard Ch. J., Kisi E. H., Roberts R. B. [и др.]** Neutron Diffraction Studies of Phase Transformations between Tetragonal and Orthorhombic Zirconia in Magnesia-Partially-Stabilized Zirconia // Journal of the American Ceramic Society. 1990. Т. 73. No 10. С. 2828–2833.
7. **Kisi E. H.** Influence of Hydrostatic Pressure on the t to Transformation in Mg-PSZ Studied by In Situ Neutron Diffraction // Journal of the American Ceramic Society. 1998. Т. 81. No 3. С. 741–745.
8. **Böscke T.S., Müller J., Bräuhäus D. [и др.]** Ferroelectricity in hafnium oxide thin films // Applied Physics Letters. 2011. Т. 99. No 10. С. 102903.
9. **Min Hyuk Park, Young Hwan Lee, Han Joon Kim [и др.]** Ferroelectricity and Antiferroelectricity of Doped Thin HfO_2 -Based Films // Advanced Materials. 2015. Т. 27. No 11. С. 1811–1831.
10. **Min Hyuk Park, Han Joon Kim, Yu Jin Kim [и др.]** Evolution of phases and ferroelectric properties of thin $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ films according to the thickness and annealing temperature // Applied Physics Letters. 2013. Т. 102. No 24. С. 242905.
11. **Ландау Л. Д., Лившиц Е. М.** Теоретическая физика: Учеб. пособ.: Для вузов. В 10 т. Т. V. Статистическая физика. Ч. I – 5-е изд., стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002. 616 с. – ISBN5-921-0054-8 (Т. V).
12. **Giannozzi P., Baroni S., Bonini N. [и др.]** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // Journal of physics: Condensed matter. 2009. Т. 21. No 39. С. 395502.
13. **Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.** Generalized gradient approximation made simple // Physical review letters. 1996. Т. 77. № 18. С. 3865.
14. **Hartwigsen C., Goedecker S., Hutter J.** Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // Physical Review B. 1998. Т. 58. № 7. С. 3641.
15. **Monkhorst H.J., Pack J.D.** Special points for Brillouin-zone integrations // Physical review B. 1976. Т. 13. № 12. С. 5188.
16. **Anubhav Jain, Shyue Ping Ong, Geoffroy Hautier [и др.]** The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Materials. 2013. Т. 1. No 1. С. 011002.
17. **Kumar N. et al.** A novel approach to low-temperature synthesis of cubic HfO_2 nanostructures

- and their cytotoxicity // Scientific reports. 2017. Т. 7. № 1. С. 9351.
18. **Batra R. et al.** Factors favoring ferroelectricity in hafnia: A first-principles computational study // The Journal of Physical Chemistry C. 2017. Т. 121. № 8. С. 4139-4145.
 19. **Zeng Q. et al.** Evolutionary search for new high-k dielectric materials: methodology and applications to hafnia-based oxides // Acta Crystallographica Section C: Structural Chemistry. 2014. Т. 70. № 2. С. 76-84.
 20. **Kresse G., Furthmüller J.** Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // Computational materials science. 1996. Т. 6. № 1. С. 15-50.
 21. **Muller J. et al.** Ferroelectricity in simple binary ZrO_2 and HfO_2 // Nano letters. 2012. Т. 12. № 8. С. 4318-4323.
 22. **Jaffe J.E., Bachorz R.A., Gutowski M.** Low-temperature polymorphs of ZrO_2 and HfO_2 : A density-functional theory study // Physical Review B. 2005. Т. 72. № 14. С. 144107.
 23. **Blöchl P.E.** Projector augmented-wave method // Physical review B. 1994. Т. 50. № 24. С. 17953.
 24. **Lowther J.E. et al.** Relative stability of ZrO_2 and HfO_2 structural phases // Physical Review B. 1999. Т. 60. № 21. С. 14485.
 25. **Böscke T.S., Müller J., Bräuhaus D. [и др.]** Ferroelectricity in hafnium oxide: CMOS compatible ferroelectric field effect transistors // Electron Devices Meeting (IEDM), 2011 IEEE International/IEEE. 2011. С. 24-5.
 26. **Min Hyuk Park, Han Joon Kim, Yu Jin Kim [и др.]** The effects of crystallographic orientation and strain of thin $Hf_{0.5}Zr_{0.5}O_2$ film on its ferroelectricity // Applied Physics Letters. 2014. Т. 104. No 7. С. 072901.
 27. **Park M.H. et al.** Understanding the formation of the metastable ferroelectric phase in hafnia-zirconia solid solution thin films // Nanoscale. 2018. Т. 10. № 2. С. 716-725.

Анализ клеточно-автоматных алгоритмов решения задач размещения и трассировки

► С. В. Гаврилов, М. А. Заплетина
ИППМ РАН

В статье предпринята попытка систематизировать и адаптировать к топологическому проектированию СБИС, в частности с программируемой логикой, современный исследовательский опыт, касающийся классических и неклассических клеточно-автоматных моделей, разработанных для решения задач поиска кратчайшего пути и размещения логических элементов. Особое внимание уделено рассмотрению клеточно-автоматной формализации алгоритмов поиска кратчайшего пути с семантикой мультиагентности. Приведен подробный разбор модели решения задачи размещения логических элементов на базе систолической структуры. Обозначены основные сложности и возможные проблемы переформулировки существующих и создания новых клеточно-автоматных моделей и алгоритмов для двух центральных задач топологического проектирования.

The Analysis of Cellular Automata Algorithms for Placement and Routing Tasks

S. V. Gavrilov, M. A. Zapletina

IPPM RAS

The paper makes an attempt to systematize and adapt to layout design of VLSI, in particular with programmable logic, the modern research experience regarding classical and non-classical cellular automata models to solve the problems of searching the shortest paths and placement. The special attention is paid to the consideration of cellular automata formalization of shortest path search algorithms by means of the multiagency semantics. A detailed analysis of the model for solving the problem of the logical elements placement based on a systolic structure is given. The main difficulties and possible problems of a reformulation of existing and a creation of the new cellular automata models and algorithms for two central problems of layout design are discussed.

ВВЕДЕНИЕ

Размещение логических элементов и трассировка межсоединений являются центральными задачами этапа физического проектирования интегральных микросхем. От результатов, полученных на выходе этих операций, напрямую зависит работоспособность и быстродействие конечного устройства. С увеличением степени интеграции в современной микроэлектронике стандартные требования, предъявляемые к алгоритмам размещения и трассировки, усложняются растущей размерностью вычислительной задачи, при этом время, выделяемое на весь цикл разработки, сокращается под давлением экономических факторов. Основным недостатком стандартных алгоритмов в этой области (например, [1–2]) становится слишком большая длитель-

ность работы по поиску решения. Ввиду этого, так велика важность создания и применения на этом этапе высокоэффективных новых алгоритмов либо адаптаций существующих.

Одним из перспективных подходов, получивших распространение в последнее десятилетие, является клеточно-автоматный, представляющий собой новый способ решения различных задач микроэлектроники: от моделирования физико-химических и технологических процессов, помехо- и отказоустойчивости до функционально-логического и физического проектирования СБИС [3–4]. Вследствие естественной внутренней возможности распараллеливания, классические синхронные клеточные автоматы (КА) могут быть положены в основу как эффективных универсальных вычислителей [5],

так и узконаправленных алгоритмов. Большие перспективы представляет обращение и к неклассическим КА, в том числе эволюционирующим (evolving CA, [3]), а также КА, ориентированным на применение мультиагентного подхода [6].

Целью статьи является анализ предполагаемых возможностей и современного опыта использования клеточно-автоматной формализации, в том числе с семантикой мультиагентности, для решения задач размещения логических элементов и трассировки межсоединений в рамках топологического проектирования СБИС. В качестве опорного материала нами были использованы работы данной и смежных с ней областей.

Значительный пласт современных исследовательских работ по КА ориентирован на решение задачи поиска кратчайшего пути как в самом общем виде, так и для конкретных типов условий (S^3DSP , S^3P , $A2A$ и др. – подробнее в разделе 2). Из них наибольший интерес для физического проектирования СБИС имеет группа специализированных методов для проблем S^3P и $SDSP$. Идея применения систолической структуры, по смыслу близкой к клеточно-автоматной, для параллельной адаптации алгоритма имитации отжига присутствует в лекциях по автоматизации проектирования профессора Андре ДеХона [7] из Калифорнийского технологического института (одного из известнейших современных специалистов в области реконфигурируемых и программируемых интегральных микросхем), а также в виде самостоятельной публикации [8] и патента на изобретение [9].

КЛЕТЧНО-АВТОМАТНЫЕ МОДЕЛИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ПОИСКА КРАТЧАЙШЕГО ПУТИ

Известен ряд научных работ, посвященных решению проблемы поиска кратчайшего пути на базе идеи клеточных автоматов. Одними из первых исследований по реализации алгоритмов для взвешенного графа на структуре, в динамике имитирующей КА стали исследования Ву, Розенфельда [10] и группы индийских ученых [11]. Рассмотренный авторами [10] графовый клеточный автомат (ГКА) представляет собой синхронно функционирующую сеть взаимодействующих между собой конечных автоматов, соответствующих вершинам исходного графа. В [11] описана усовершенствованная составная модификация ГКА, введен дополнительный тип конечных автоматов для отображения ребер исходного графа. Ввиду этого усложнения, функция перехода разбивается на две стадии, в ходе кото-

рых происходит обмен информацией между автоматами одного типа. Описанная модель обнаруживает сильную связь с клеточными автоматами, в особенности с идеей взаимодействующих КА [12] и интерпретацией локальной функции перехода как набора последовательно выполняемых инструкций [13] (также автомат Марголуса [14]), хотя и отличается от их классической формулировки.

Справедливо будет отметить, что значительная часть клеточно-автоматных алгоритмов, решающих проблему поиска кратчайшего пути, является в той или иной степени улучшенной версией классического алгоритма Дейкстры [15], попыткой создать на его основе метод, более совершенный по части быстродействия и качества находимых путей.

Негибридные клеточно-автоматные модели

Алгоритм, параллельная реализация на ПЛИС и анализ быстродействия которого представлен в [16], основан на идее волнового поиска кратчайшего пути с распространением двух волн от источника и приемника сигнала навстречу друг другу. При одновременном прибытии в клетку двух волн приоритет отдается сигналам в следующем порядке: сверху, снизу, слева, справа. Множество состояний S включает следующие элементы: (*source*) источник, (*wave_1*) волна_источника, (*target*) приемник, (*wave_2*) волна_приемника, (*blocked*) блокировка, (*semi_blocked*) полублокировка, (*free*) свободно. Каждая клетка КА к концу первой фазы трассировки хранит в своей памяти информацию о том, откуда в нее пришла волна сигнала. Распространение волн завершается при условии, когда появляются клетки, имеющие в своей окрестности соседей, принадлежащих разным волнам. Следом за этим в обратном волнам направлении распространяется состояние полублокировки клеток, аналогичное обратному проходу волнового алгоритма. Препятствиям соответствует перманентное заблокированное состояние. Локальная функция перехода (ЛФП) представлена следующими правилами, для которых произведем некоторую формализацию:

1. все *свободные* клетки из окрестности *источника* переходят в состояние *волна_источника*:
 $s_i^t = free, \exists s_j^t = source, j \in N, S, W, E: s_i^{t+1} = wave_1$;
2. аналогично, все *свободные* клетки из окрестности *приемника* переходят в состояние *волна_приемника*:
 $s_i^t = free, \exists s_j^t = target, j \in N, S, W, E: s_i^{t+1} = wave_2$;
3. все *свободные* клетки в окрестности *клеток волна_источника, волна_приемника* принимают аналогичные состояния; если *свобод-*

ная клетка оказалась между волнами, приоритет отдается волне от источника:

$$s_i^t = free, \exists s_j^t = wave_1, j \in N, S, W, E: s_i^{t+1} = wave_1;$$

$$s_i^t = free, \exists s_j^t = wave_2, \forall s_j^t \neq wave_1, j \in N, S, W, E:$$

$$s_i^{t+1} = wave_2;$$

4. все заблокированные клетки не изменяют своего состояния: $s_i^t = blocked = s_i^{t+1} = const$;
5. клетка по направлению, хранящемуся в памяти соседней полублокированной клетки, также переходит в состояние полублокировки:

$$s_i^t = wave_1 || wave_2, \exists s_j^t = semi_blocked, s_j.dir = i,$$

$$j \in N, S, W, E:$$

$$s_i^{t+1} = semi_blocked;$$

6. если в соседях клетки, принадлежащей волне источника, содержатся клетки волны приемника, ее состояние становится полублокированным, аналогично обратное:

$$s_i^t = wave_1, \exists s_j^t = wave_2, j \in N, S, W, E:$$

$$s_i^{t+1} = semi_blocked;$$

$$s_i^t = wave_2, \exists s_j^t = wave_1, j \in N, S, W, E:$$

$$s_i^{t+1} = semi_blocked.$$

Приведенные в [16] результаты вычислительных экспериментов говорят в пользу высокой эффективности клеточно-автоматного параллельного решения задачи по сравнению с классическими последовательностными вариантами. Однако такой тривиальный подход обладает существенным недостатком – отсутствием обработки перегрузок. В условиях ограниченности объема и расположения трассировочных ресурсов на кристалле они возникают неизбежно, когда задача касается программируемой логики.

Авторы [17], совершенствуя работу своих предшественников [18], предлагают вариант клеточно-автоматного алгоритма с уменьшенным необходимым количеством итераций. Им удалось сократить множество состояний ячейки модели [18] и изменить локальную функцию перехода таким образом, чтобы сделать возможным многолучевой поиск кратчайшего пути. Рассмотрим этот подход подробнее.

Множество состояний S КА представлено совокупностью трех элементов: ($null$) пустое состояние;

клетка в фазе роста ($growth$); клетка в состоянии зрелости ($mature$).

За начальное состояние клетки-источника сигнала принимается $s_{source}^0 = mature$, для остальных клеток $s_{\neq source}^0 = null$. Локальная функция перехода задана следующим образом:

1. $s_i^t = mature = s_i^{t+1} = const$;

2. если текущее состояние клетки $s_i^t = null$, то переход в следующее состояние зависит от клеток ее окрестности:

- $\exists s_j^t = mature, j \in N, S, W, E: s_i^{t+1} = growth$; величина $R(i)$, равная весу ребра $w(i, j)$, соединяющего вершины i и j в начальном взвешенном графе, обновляет свое значение; в памяти клетки i сохраняется номер клетки j , из которой пришел сигнал роста;

- в противном случае из окрестности клетки i , $s_i^t = null$, выбирается клетка j , для которой выполнено условие $w(i, j) + R(j) \leq R(i)$, при наличии нескольких подходящих клеток все они будут зафиксированы в памяти клетки i в качестве источников сигнала;

3. если текущее состояние клетки $s_i^t = growth$:

- если центральная клетка окрестности обладает наименьшим накопленным весом, она переходит в состояние $s_i^{t+1} = mature$;

- иначе ищется клетка j с наименьшим накопленным весом, удовлетворяющая условию $w(i, j) + R(j) \leq R(i)$, обновляется значение $R(i)$, индекс j записывается в память клетки i ;

- в случае, когда оба предшествующих условия не могут быть выполнены, состояние клетки остается без изменений.

Рассмотренная модель позволяет путем применения параллелизма добиться значительного повышения производительности по сравнению с классическим алгоритмом Дейкстры. Здесь асимптотическая вычислительная сложность $T = O(n^2 / p)$ против $T = O(n^2)$, где n – число вершин графа, а p – доступное количество процессорных элементов. Кроме того, она позволяет избежать вариантов неверного выбора следующей вершины пути в случае его неоднозначности.

Следует отметить, что классическая идея клеточных автоматов реализована в этой модели не в полной мере. В частности, отсутствует упоминание о выборе размера поля КА и методе отображения вершин графа на конкретные клетки автомата. Этот момент, являясь чрезвычайно важным в случае имплементации рассматриваемых алгоритмов на реальном вычислителе, часто опускается в работах по КА в данной предметной области. Между

тем, отсутствие прозрачных и четких принципов загрузки начальных данных в матрицу (поле) клеточного автомата искажает семантическую связь между практически значимой исходной информацией и программно-математической структурой КА и влечет за собой срыв моделирования.

Идея динамического программирования, исполненная с применением КА, нашла отражение в работе [19]. Задача поиска кратчайшего пути между парой вершин решается для ориентированного взвешенного графа с n вершинами и положительными, отрицательными и нулевыми весами ребер при условии, что сумма весов ребер в любом из его циклов не должна быть отрицательной. Проблема рассматривается с точки зрения минимизации значения рекурсивной функции стоимости суммарного перехода от клетки i к j : $f(i, j) = \min_{i \rightarrow k \rightarrow j} (f(i, k) + f(k, j))$, где под k подразумевается каждая из клеток пути. По итогу работы алгоритма становится известна минимальная возможная длина пути, а для определения последовательности его вершин необходима дополнительная операция. Используемый автомат состоит из $n(n-1)/2$ клеток. Авторы вводят два вида клеток на треугольном регулярном поле автомата: процессорные и вспомогательные буферные. Вторые используются для замедления передачи сигнала между процессорными клетками на один временной шаг. Шаблон окрестности представлен двумя соседями. Для процессорной клетки с координатами (i, j) – это клетки $(i-1, j)$ и $(i, j+1)$, с которыми она соединена двумя разноскоростными связями, прямой и буферизованной. Основной принцип функционирования полученной модели состоит в отслеживании номера итерации КА с помощью глобального счетчика и смены фазы передачи сигнала от клетки к соседям с «быстрой» на «медленную» в зависимости от ее координат и номера текущего глобального временного шага. В качестве замены глобальному тактовому сигналу авторы предлагают введение дополнительного регистра в каждую процессорную клетку, на каждом такте по медленным связям принимающего управляющий сигнал извне, что свидетельствует об открытости рассматриваемой модели. Локальная функция переходов, в данном случае состоящая из правила расчета накопленного веса клетки и условий передачи сигнала в соседние клетки окрестности, специфицирована особым образом для граничных клеток, не имеющих соседей, генерирующих сигнал. Конечная сложность алгоритма для нахождения кратчайшего пути между всеми парами вершин – $O(n \log n)$, где n – число вершин исходного графа.

Мультиагентный подход на базе клеточных автоматов

Обратимся теперь к модификациям КА, связанным с мультиагентностью. Вопрос о том, сводима ли в общем случае мультиагентная система к определению классического КА, оставим за рамками данной статьи. Поиск кратчайшего пути с помощью мультиагентной системы на клеточно-автоматной сети Таваколи [20] и Эдигера, Хоффмана и Дезерабле [21–27] представляет собой одну из частых методик, построенных на основе КА.

В работе [20] была рассмотрена задача централизованно управляемого мультиагентного поиска кратчайшего пути от нескольких источников к одному приемнику (SDSP – *single destination shortest path*) на прямоугольной сетке, где клетке КА соответствует пара координат (i, j) . Множество состояний однородного КА определяется четырьмя вариантами: агент, препятствие, приемник сигнала, пустая клетка. Число агентов n подчиняется условию $n < N$, где N – суммарное число клеток поля КА. В процессе работы КА агент может перемещаться в одну из восьми соседних клеток при условии, что она свободна. Стоит отметить, что горизонтальные/вертикальные и диагональные перемещения агента неравноценны: последние оцениваются в $v(\text{diagonal}) = 14$ условных единиц расстояния против 10 для ортогональных направлений.

Каждый из агентов, находящихся на поле и еще не дошедших до приемника сигнала, состоит в списке А агентов, не закончивших работу, который разделяется на два других списка: Б (движущиеся агенты) и В (прибывшие агенты); в четвертый список Г записываются агенты, дошедшие до клетки-приемника. Локальное правило перехода клеточного автомата выполнено по традиции жадных алгоритмов и выглядит следующим образом:

$$q_{i,j}^{t+1} = \begin{cases} 1 ; q_{i,j}^t = 1 \text{ (препятствие)} \\ \min \left\{ \begin{array}{l} q_{i,j}^t, q_{i-1,j-1}^t + 14, q_{i-1,j}^t + 10, \\ q_{i-1,j+1}^t + 14, q_{i,j-1}^t + 10, \\ q_{i,j+1}^t + 10, q_{i+1,j-1}^t + 14, \\ q_{i+1,j}^t + 10, q_{i+1,j+1}^t + 14 \end{array} \right\} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \forall q_{i+r,j+s}^t \neq 1; \\ r = -1, 0, 1. \\ s = -1, 0, 1. \end{array}$$

Остановка работы КА происходит с прекращением каких-либо изменений на его поле. Для преодоления одного из главных недостатков жадных алгоритмов – «застревания» в локальных минимумах – переходом агентов управляет центральный планировщик, действующий по поисковой эвристике.

Следующее направление агента определяется в соответствии с оценочной функцией стоимости:

$$\text{Cost}(i, j, \text{direction}) = v(\text{direction}) + V(i, j, \text{direction}) + h \times \text{collisions}(i, j, \text{direction}),$$

где (i, j) – текущее положение агента, direction – возможное направление, $v(\text{direction})$ – стоимость перехода агента в выбранную клетку (равная 10 или 14), $V(i, j, \text{direction})$ – минимальное расстояние от оцениваемой клетки до клетки-приемника, $\text{collisions}(i, j, \text{direction})$ – число возможных коллизий агентов, исходя из предположения об их «жадном» движении к цели, рассчитанное заранее до начала работы КА. Подстроечный параметр h имеет смысл количества временных шагов, в течение которых агент вынужден ожидать, пока выбранная клетка освободится от других агентов. Если его величина равна 0, то процесс поиска пути эквивалентен работе алгоритма A^* [28], а с ростом числа агентов на поле КА, ограничением на прохождение их путей и, соответственно, с увеличением числа коллизий h также следует увеличивать.

В сравнении с классическим A^* , значительно теряющим эффективность с увеличением числа источников (приемников) сигнала, рассмотренный гибридный алгоритм при корректно подобранном значении параметра h позволяет в среднем выполнить трассировку быстрее, избежать долгого простаивания агентов в очередях коллизий (конфликтов, перегрузок) и при достаточном объеме трассировочных ресурсов гарантирует полную разводку пути для всех источников за $O(n^3N^2)$.

Иная задача отражена в работах Эдигера и Хоффмана [21–22, 29–30], где для поиска пути между всеми двумя точками ($A2A$, *all-to-all*) был выбран неоднородный (*non-uniform*) синхронный клеточный автомат на однородной прямоугольной сетке с альтернативой локального правила перехода в зависимости от типа клетки $\text{Type} = \{\text{Agent}, \text{Empty}\}$ – агентного или пустого. В зависимости от условия замкнутости или открытости границ поля КА, возможно наличие третьего типа клеток – «препятствие» или «граница». Перед началом работы КА агенты помещаются во все клетки-источники сигнала, причем каждая из них одновременно может являться приемником сигнала. Агенты обладают направлением движения, которое может принимать одно из четырех значений по сторонам света: N (вверх), E (вправо), S (вниз), W (влево). При движении между клетками агенты способны не только перемещаться в вакант-

ные клетки, но и меняться местами друг с другом, находясь в соседних клетках [21, 29–30], а также поворачиваться. При достижении целевой клетки агент устраняется с поля КА.

При возникновении конфликта [21–23, 30], когда на одну позицию претендуют несколько агентов, перегруженная клетка оценивает обстановку и принимает одного агента в соответствии с циклически чередующимися схемами приоритетов (для случая NESW-окрестности таких схем $4! = 24$) или случайным образом, в зависимости от выбранной ЛФП. Направление перемещения агента на каждой итерации КА определяется конечным автоматом из девяти возможных (рис. 1), причем три из них – назад, назад вверх и назад вниз могут иметь одинаковый статус для уменьшения сложности задачи.

Состояние клетки представлено шестью компонентами: тип; направление; расстояние от клетки, на которую указывает агент, до клетки-приемника; контрольное состояние. Особым способом определяется шаблон окрестности: для агентного типа соседство составляют клетки внутри Манхэттенского радиуса, равного двум или трем; для пустой клетки используется классическая для КА окрестность фон Неймана – «крест». Для отслеживания динамики поиска пути с каждым агентом ассоциирован битовый вектор длины, равной начальному числу агентов на поле КА. Изначально лишь один бит, стоящий на позиции, совпадающей с порядковым номером самого агента, выставлен в единицу. При взаимодействии агентов друг с другом их битовые вектора складываются по правилу логического ИЛИ.

Неформально локальную функцию перехода КА можно записать следующим образом:

1. если клетка *пустая*, необходимо определить, у какой из четырех соседних клеток агентного типа наивысший приоритет. Если такой агент существует, скопировать в текущую клетку его контрольное состояние, направление и информацию о приемнике и, используя собственные данные клетки, определить необходимость поворота агента. В завершении, сменить тип клетки на *агентный* и обновить величину расстояния до клетки-приемника.
2. Если тип клетки *агентный*, проверить возможность перехода агента в клетку по его текущему направлению с учетом возможности к взаимной перестановке двух агентов и в согласии со списком приоритетов

планируемой клетки (рис. 2). Если переход возможен, выполнить его и сменить тип клетки на *пустой*.

Для нахождения наиболее оптимальной стратегии поведения агентов (иными словами, конфигурации управляющих ими конечных автоматов Мили) в работе [22] был применен генетический алгоритм на островной модели. Правила функционирования конечного автомата для удобства были заданы таблицей логических переходов. Их эволюция позволила найти локальные правила перехода для агентных клеток, которые наиболее эффективны на широком спектре начальных условий (размере поля, расположении и количестве агентов и их приемников) и обеспечивают полную разводимость и наименьшую длину итоговых путей за ограниченное число итераций трассировки и самого генетического алгоритма. Помимо быстродействия, в качестве преимущества своей работы (в частности, по сравнению с классическим алгоритмом A*) авторы отмечают решение проблемы тупиковых путей и перегрузок посредством введения случайности в работу управляющего конечного автомата.

Исследование [23] тех же авторов, построенное с ссылкой к работе [20], помимо поиска оптимального алгоритма управления поведением агентов для решения задачи S^3DSP (*single source single destination shortest path* – от одного источника к одному приемнику) на прямоугольной сетке, было посвящено анализу влияния количества свободных клеток поля КА на эффективность работы эволюционирующих ЛФП, количество возникающих коллизий и качество находимых путей. Для высокого процента трассируемости и обеспечения наименьших длин путей оказалось достаточно обеспечить от двух до трех свободных клеток на каждого агента (т.е. на пару «источник-приемник»), что по порядку соответствует практическим задачам трассировки наиболее разветвленных цепей (например, питания, установки/сброса, синхронизации). Однако недостатком работы [23], несмотря на оперирование большим объемом статистических данных, является отсутствие описания наилучших найденных ЛФП, что несколько уменьшает его прикладную значимость.

Особый интерес представляет изучение влияния топологии двумерного поля клеточного автомата (его размерности, типа границ, конфигурации узлов для размещения клеток – прямоугольной [21–25, 29–30], треугольной [24–25] или гексагональной решетки [26]) на результат применения различных локальных правил перехода. В частности, авторы отмечают преимущество треугольной одно-

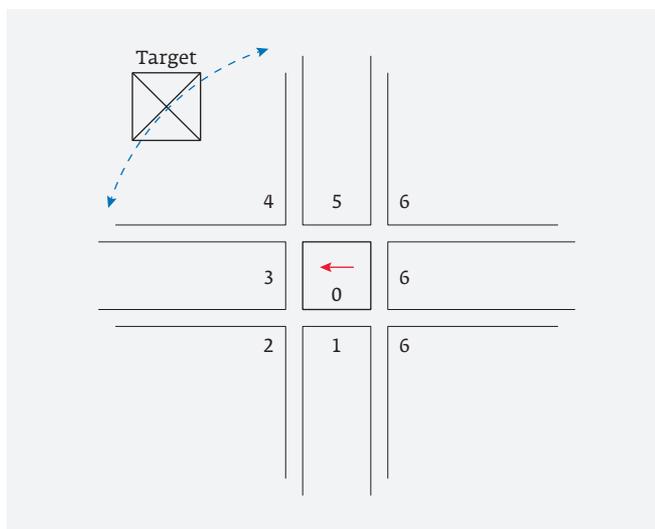


Рис. 1. Пример окрестности клетки автомата [23] с точки зрения выбора следующего направления находящегося в ней агента

родной сетки над прямоугольной в вопросе сравнения вычислительной эффективности (например, по числу итераций, необходимому для построения всех заданных путей на поле).

ПРОБЛЕМА ПРОЕКЦИИ ГРАФА ТРАССИРОВКИ НА ПОЛЕ КЛЕТЧНОГО АВТОМАТА

Задача корректного отображения ресурсов кристалла, представленных в форме связного графа, на поле клеточного автомата (регулярную структуру) требует отдельного рассмотрения ввиду своей нетривиальности. В работах, приведенных выше, как правило, она либо затрагивается косвенно [11–12], либо упускается из внимания [18–19, 24], либо решается для простейшего случая (вершины графа расположены регулярным образом в узлах прямоугольной [31–33] или треугольной [32] сетки).

Согласно [33], граф, обладающий информацией о геометрических координатах своих вершин, может быть представлен в виде набора соприкасающихся полигонов (треугольников, в частности) при условии, что он является планарным. Эту операцию можно рассматривать как первую стадию при переходе к клеточно-автоматному представлению. Затем, путем разбиения полученных полигонов на более мелкие, вплоть до однородных, можно получить регулярную сетку, в узлах которой могут быть размещены клетки автомата.

Важно отметить, что при такой последовательности действий некоторым клеткам КА не будут соот-

Δx	Δy	Reduced input	
<0	<0	0	0
<0	=0	1	3
<0	>0	2	6
=0	<0	3	1
=0	=0	4	4
=0	>0	5	7
>0	<0	6	2
>0	=0	7	5
>0	>0	8	8

Рис. 2. Определение приоритетов клеток с учетом изменения расстояний (Δx , Δy) от центральной клетки, содержащей агента, до приёмника при переносе агента в каждую из клеток окрестности. Нулевой приоритет – самый высокий, поскольку расстояние до клетки-приемника уменьшится по обоим направлениям ($\Delta x < 0$, $\Delta y < 0$)

ветствовать реальные вершины (или ребра) начального графа. Это приводит к необходимости ввода специального типа клеток (*dummy*, подход [11]) либо особого состояния клетки, имеющего смысл «препятствия» [21–22, 29–30] или «пустоты». Первый вариант предпочтительнее, поскольку ввод нового состояния требует увеличения регистровой памяти, связанной с каждой из клеток поля КА, что при больших размерах поля станет причиной значительного перерасхода памяти.

КЛЕТочно-АВТОМАТНАЯ ФОРМАЛИЗАЦИЯ КЛАССИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА ИМИТАЦИИ ОТЖИГА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ РАЗМЕЩЕНИЯ

Задача размещения логических элементов (ЛЭ) заключается в нахождении соответствия между их множеством, представляющим проектную электрическую схему, и свободными областями СБИС (незанятыми логическими ячейками в случае ПЛИС). При этом должен быть соблюден ряд основных требований: минимизирована использованная площадь кристалла, итоговые длины и, соответственно, задержки межсоединений, а также получены оптимальные тепловые рабочие свойства проектируемой интегральной микросхемы. На практике четкому контролю подвергается плотность распределения логических элементов на кристалле и длина межсоединений (нередко суммарная либо критических путей).

Одним из известных и часто применяемых методов размещения в рамках физического проектиро-

вания, как для коммерческих, так и академических целей, является алгоритм имитации отжига [1], идея которого заключается в следующем. На каждой последовательной итерации происходит перестановка случайной пары логических элементов с последующим расчетом значения изменившейся оценочной функции размещения. Перестановки, ведущие к улучшению ситуации, принимаются безоговорочно, а остальные могут быть приняты с вероятностью, уменьшающейся экспоненциально в зависимости от текущих «температуры» отжига (уменьшающейся со временем) и прироста значения оценочной функции. Подбор последней и задание более высокой начальной «температуры» позволяет более значительным образом повысить качество итогового размещения. Недостаток метода состоит в его последовательном характере, что с увеличением размера проектируемой схемы ведет к быстрому росту количества времени, необходимого для выполнения процедуры размещения.

Логичным способом нивелировать этот недостаток является создание параллельных версий алгоритма имитации отжига. Так, подход к этой задаче, близкий к клеточно-автоматному, был применен в работах ДеХона и Райтона [7–9]. Авторы разработали систолическую структуру, копирующую конфигурацию логических ячеек ПЛИС и позволяющую выполнить параллельный вариант алгоритма имитации отжига посредством локальных взаимодействий элементов этой структуры.

Рассмотрим предложенное аппаратное решение [8] более подробно. Каждой возможной позиции логического элемента проектной схемы на кристалле ставится в соответствие вычислительный элемент (ВЭ) систолической структуры. ВЭ хранит данные о своей позиции на кристалле, размещенном на ней ЛЭ и его связях с другими ЛЭ. Вклад каждого вычислительного элемента в глобальную функцию оценки размещения определяется суммой Манхэттенских расстояний от его внутреннего ЛЭ до всех иных, с которыми он должен быть соединен в соответствии с проектной электрической схемой. Через весь систолический массив проходит цепь синхронизации состояний, необходимая не только для переноса информации о перестановках ЛЭ в ходе работы алгоритма, но и для загрузки начального и выгрузки найденного размещения. Если систолический массив имеет размеры $N \times W$ (рис. 3), цепь синхронизации обновляется каждые $N \times W$ тактовых сигнала, и столько же необходимо, чтобы каждый вычислительный элемент считал из нее данные о текущем размещении.

Схематичный алгоритм аппаратного поиска оптимального размещения.

1. Загрузить случайно сформированное размещение в систолический массив.
2. Увеличивать температуру отжига от 0 до T_{\max} :
 - а. для каждого ВЭ в параллели:
 - i. циклически обновить позиции всех связанных ЛЭ;
 - ii. выполнить фиксированное количество перестановок, рассматривая 4 соседние клетки;
 - iii. принять возможные перестановки, исходя из вероятностной функции оценки.
3. Вернуть полученное размещение.

Правила перестановки ЛЭ между вычислительными элементами едины, исключение составляют крайние ячейки, имеющие неполную соседнюю окрестность. Во избежание возможных коллизий, поле систолического массива разбивается на непесекающиеся пары, исходя из четности номера столбца и строки рассматриваемой ячейки.

Ориентируясь на достижение производительности, превосходящей существующие программные средства решения задачи размещения, авторы [8–9] предпочли аппаратную реализацию своего подхода на ПЛИС Xilinx Virtex2. Для каждого вычислительного элемента систолического массива понадобилось около 400 логических ячеек ПЛИС. На представленном наборе тестовых проектных схем средней емкости (от 1 до 10 тыс. ЛЭ) разработанное аппаратное решение показало значительное ускорение в сравнении с пакетом VPR [34].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Идея применения КА моделей для решения задачи размещения логических элементов на интегральной микросхеме, в частности на ПЛИС, лежит на поверхности, однако в настоящее время она недостаточно хорошо развита. Клеточно-автоматный подход для решения задачи размещения отличается удобством с точки зрения естественности описания процесса движения логических элементов между клетками поля КА, как их «диффузии» из областей с большей плотностью в области с меньшей, с учетом их связности друг с другом. Кроме того, потенциальная высокая вычислительная эффективность делает клеточно-автоматные модели привлекательными и с точки зрения производительности.

Зачастую модели, представляющие трассировочные ресурсы и логические элементы СБИС (и ПЛИС, в частности), не содержат информации о геометрии

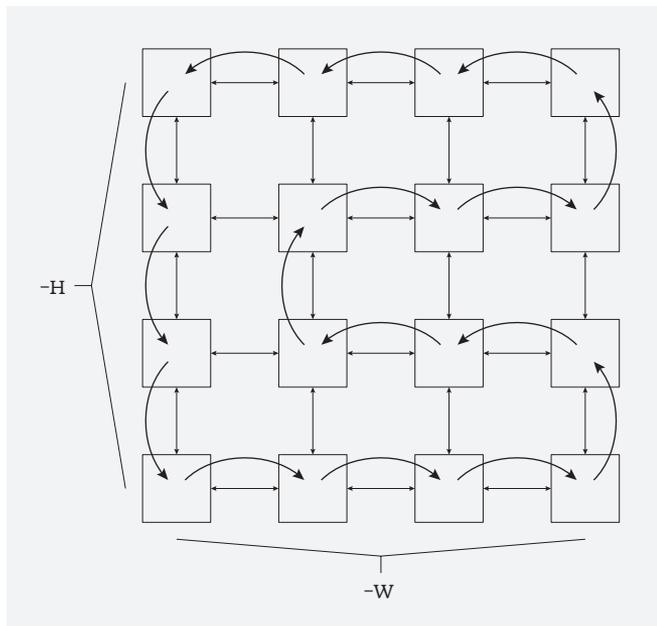


Рис. 3. Схема локальных взаимодействий (прямые двусторонние стрелки) и цепи синхронизации (дуговые стрелки) для систолического массива [8]

кристалла. Этот факт значительно усложняет процедуру проекции исходных данных на поле клеточного автомата и делает невозможным применение большинства известных в настоящий момент клеточно-автоматных методов решения задачи поиска кратчайшего пути. Кроме того, в отличие от маршрута заказного проектирования, эта проблема, исходя из специфики ПЛИС, должна решаться в условиях жестких ограничений на количество трассировочных ресурсов и логических элементов и конфигурацию их фиксированного расположения на кристалле.

Особенность задачи трассировки в маршруте топологического синтеза на основе ПЛИС заключается в необходимости одновременного конкурентного решения задач класса S^3P и $SDSP$ для всего списка межсоединений проектной схемы для достижения их полной разводимости. Наиболее близко к решению этой проблемы удалось подойти лишь авторам [29], представившим алгоритм для нахождения кратчайшего пути между всеми парами вершин.

ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований: грант РФФИ № 17-07-00570. Авторы благодарят к.ф.-м.н. И.В. Матюшкина за ценные координационные замечания при подборе материала статьи.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Kirkpatrick S., Gelatt C.D. Jr., Vecchi M.P.** Optimization by simulated annealing // Science, Washington, DC, U. S., 1983. Vol. 220, № 4598. PP. 671–680.
2. **McMurchie L., Ebeling C.** PathFinder: a negotiation-based performance-driven router for FPGAs // Proceedings of the 3rd International ACM Symposium on FPGAs, Napa Valley, CA, 1995. PP.111–117.
3. **Матюшкин И. В., Заплетина М. А.** Обзор по тематике клеточных автоматов на базе современных отечественных публикаций // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11(1). С. 9–57.
4. **Zhuang Ya., Li W.-Y., Wang H., Hong S., Wang H.** A bibliographic Review of Cellular Automaton Publications in the Last 50 Years // Journal of Cellular Automata, 2017. Vol. 12. PP. 475–492.
5. **Gavrilov S.V., Matyushkin I.V., Stempkovsky A.L.** Computability via Cellular Automata // Sci. Tech. Inf. Proc., 2017. Vol. 44. Is.5. PP. 314–328.
6. **Yamaguchi D., Hassan Y.F. M., Tazaki E.** New Model Based on Cellular Automata and Multiagent Techniques // Cybernetics and Systems. 2007. Vol.38(1). PP. 47–82.
7. **DeHon A.** CS137: Electronic Design Automation. Day 8: January 27, 2006. Cellular Placement // CALTECH, 2006. 9 p.
8. **Wrighton M.G., DeHon A.M.** Hardware-Assisted Simulated Annealing with Application for Fast FPGA Placement // Proceedings of the 2003 ACM/SIGDA eleventh international symposium on Field programmable gate arrays. 2003. PP.33–42.
9. **DeHon et al.** United States Patent № US7210112 B2. Apr 24, 2007.
10. **Wu A., Rosenfeld A.** Cellular Graph Automata I, II // Information and Control, 1979. Vol. 42. PP. 305–329, 330–353.
11. **Venkatasubramanian S., Krithivasan K., Rangan C.P.** Algorithms for weighted graph automaton // Theoret. Inform. Appl. 1989. Vol. 23. PP.251–279.
12. **Матюшкин И.В., Коробов С.В., Михайлов А.Н., Гусейнов Д.В.** Ионно-пролетная модель имплантации, сформулированная на языке клеточных автоматов // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника. 2014. № 1(156). С. 59–67.
13. **Резванов А.А., Матюшкин И.В., Гуцин О.П.** Клеточно-автоматная модель воздействия O_2 плазмы на интегральные свойства SiOCH low-k диэлектрика // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника. 2016. № 3 (163). С. 63–78.
14. **Тоффоли Т., Марголуз Н.** Машины клеточных автоматов // М.: Мир, 1991. 283 с.
15. **Dijkstra E.N.** A note on two problems in connection with graphs // Numerische Mathematik, 1959. Vol. 1. PP. 269–271.
16. **Saurabh Sh., Lin K.-W., Li Y.-L.** Cellular Automata Based Hardware Accelerator for Parallel Maze Routing // Proceedings of the IEEE International Conference on Advanced Materials for Science and Engineering IEEE-ICAMSE2016. 2016. PP. 680–683.
17. **Wang M., Qian Y., Guang X.** Improved calculation method of shortest path with cellular automata model // Kybernetes. 2012. Vol. 41. Is. 3. PP. 508–517.
18. **Wu X.J., Xue H.F.** Shortest path algorithm based on cellular automata extend model // Computer Applications. 2004. Vol. 24. No. 5. PP. 92–93.
19. **Akl S.G.** Computing Shortest Paths with Cellular automata // Shortest Path Solvers. From Software to Wetware, 2018. PP. 181–198.
20. **Tavakoli Ya., Javadi H.H. S., Adabi S.** A Cellular Automata Based Algorithm for Path Planning in Multi-Agent Systems with a Common Goal // IJCSNS International Journal of Computer Science and Network Security. 2008. Vol. 8. No. 7. PP. 119–123.
21. **Ediger P., Hoffmann R.** Combining Genetic Algorithm with Time-Shuffling in Order to Evolve Agent Systems More Efficiently // 2009 IEEE International Symposium on Parallel & Distributed Processing, Rome. 2009. PP. 1–8.
22. **Ediger P., Hoffmann R.** All-to-All Communication with CA Agents by Active Coloring and Acknowledging // ACRI 2010, LNCS6350, 2010. PP. 24–34.
23. **Ediger P., Hoffmann R.** Routing Based on Evolved Agents // PARS2010, Feb 21, Hannover. 38 p.
24. **Ediger P., Hoffmann R., Désérable D.** Rectangular vs triangular routing with evolved agents // 2011 International Conference on High Performance Computing & Simulation, Istanbul, 2011. PP. 787–793.
25. **Hoffmann R., Deserable D.** Efficient Minimal Routing in the Triangular Grid with Six Channels // Parallel Computing Technologies, PaCT 2011. LNCS, Vol. 6873. PP. 152–165.

26. **Hoffmann R., Deserale D.** All-to-all communication with cellular automata agents in 2d grids: topologies, streets and performances // The Journal of Supercomputing. 2014. Vol. 68. Is. 1. PP. 70-80.
27. **Deserale D., Hoffmann R.** Hexagonal Bravais-Miller Routing by Cellular Automata Agents // Proceedings of the 13th International Conference on Parallel Computing Technologies. 2015. Vol. 9251. PP. 164-178.
28. **Sharma A., Hauck S.** Accelerating FPGA routing using architecture-adaptive A* techniques // Proc. Field-Programmable Technology. 2005. PP. 225-232.
29. **Ediger P., Hoffmann R.** Optimizing the creature`s rule for all-to-all communication // Automata-2008: Theory and Applications of Cellular Automata. PP. 398-412.
30. **Ediger P., Hoffmann R.** CA Models for Target Searching Agents // Electronic Notes in Theoretical Computer Science. 2009. Vol. 252. PP. 41-54.
31. **Hoffmann R., Deserale D.** Line Patterns Formed by Cellular Automata Agents // ACRI 2016. 2016. LNCS9863. PP. 424-434.
32. **Adamatzky A. I.** Computation of Shortest Path in Cellular Automata // Mathl. Comput. Modelling. 1996. Vol. 23. No. 4. PP. 105-113.
33. **de Fraysseix H., de Mendez P. O., Rosenstiehl P.** On triangle contact graphs // Combinatorics, Probability and Computing. 1994. Vol. 3. Is. 02. PP. 233-246.
34. **Betz V., Rose J.** VPR: A new Packing, Placement and Routing Tool for FPGA Research // 1997 International Workshop on Field Programmable Logic and Applications. 1997. PP. 213-222.

Проблемы и задачи развития системы менеджмента качества процессов проектирования СБИС

► В. Н. Панасюк, Д. С. Шипицин, А. Л. Панкратов, А. Н. Королева
АО «НИИМЭ»

В статье рассмотрены особенности процессов верификации цифровых оригиналов СБИС на основании практического опыта реализации базовых технологий на отечественной производственной площадке. Приведен статистический анализ результатов DRC-верификации проектов, их классификация. Сформулированы ключевые направления развития системы менеджмента качества для повышения результативности процессов проектирования.

Problems and Tasks of Development of the System of Management of Quality of Processes of Designing VLSI

V. N. Panasyuk, D. S. Shipitsin, A. L. Pankratov, A. N. Koroleva

MERIS SC

The article discusses the features of the verification processes of VLSI digital originals based on practical experience in the implementation of basic technologies at a domestic production site. A statistical analysis of the results of DRC verification of projects, their classification. The key directions of the development of the quality management system are formulated to increase the effectiveness of design processes.

Проектирование СБИС на современном уровне представляет собой сложный многоступенчатый итерационный процесс, который, по совокупности его составляющих, в полной мере позволяет отнести его к понятию сложная система. И не просто система, а система киберфизическая (в терминологии «Индустрии 4.0»). Современные возможности программного обеспечения (ПО) предоставляют достаточно высокую точность моделирования при разработке технологических процессов производства и проектирования сверхбольших интегральных схем (СБИС) на их основе. В сущности, можно сказать, что проектирование СБИС представляет собой не что иное, как создание «цифрового оригинала» (ЦО) СБИС, который потом получает «физического двойника» в кремнии. Следует отметить, что именно высокий уровень моделирования является фундаментальной основой создания современных СБИС в рамках бизнес-модели взаимоотношений по типу fabless-foundry [1, 2]. Практическая применимость этой бизнес-модели для условий российской Федерации до настоящего времени является вопросом дискуссионным и неопределенным, о чем свидетельствует Госпрограмма

«Развитие электронной и радиоэлектронной промышленности на 2013–2025 годы» [2]. В последнее время, в публикациях все чаще употребляется термин «отечественный foundry» [1, 2, 4], что вызывает необходимость понимания его основных особенностей, вызванных влиянием как внешней (экономической), так и внутренней среды, а именно:

- отсутствие адекватной загрузки производства вследствие малого объема внутреннего рынка, что приводит к необходимости мелкосерийного производства. Для обеспечения экономической эффективности такого типа производства в микроэлектронике требуется расширение управляющих воздействий для поддержания воспроизводимости технологии;
- необходимость поиска возможностей перехода на отечественные материалы и оборудование, что также связано с риском потери воспроизводимости технологии;
- применение MPW-пластин осуществляется в нескольких исполнениях, часто с разветвлением технологического маршрута, в целях экономии на производстве фотошаблонов, что вызывает необходимость управления измене-

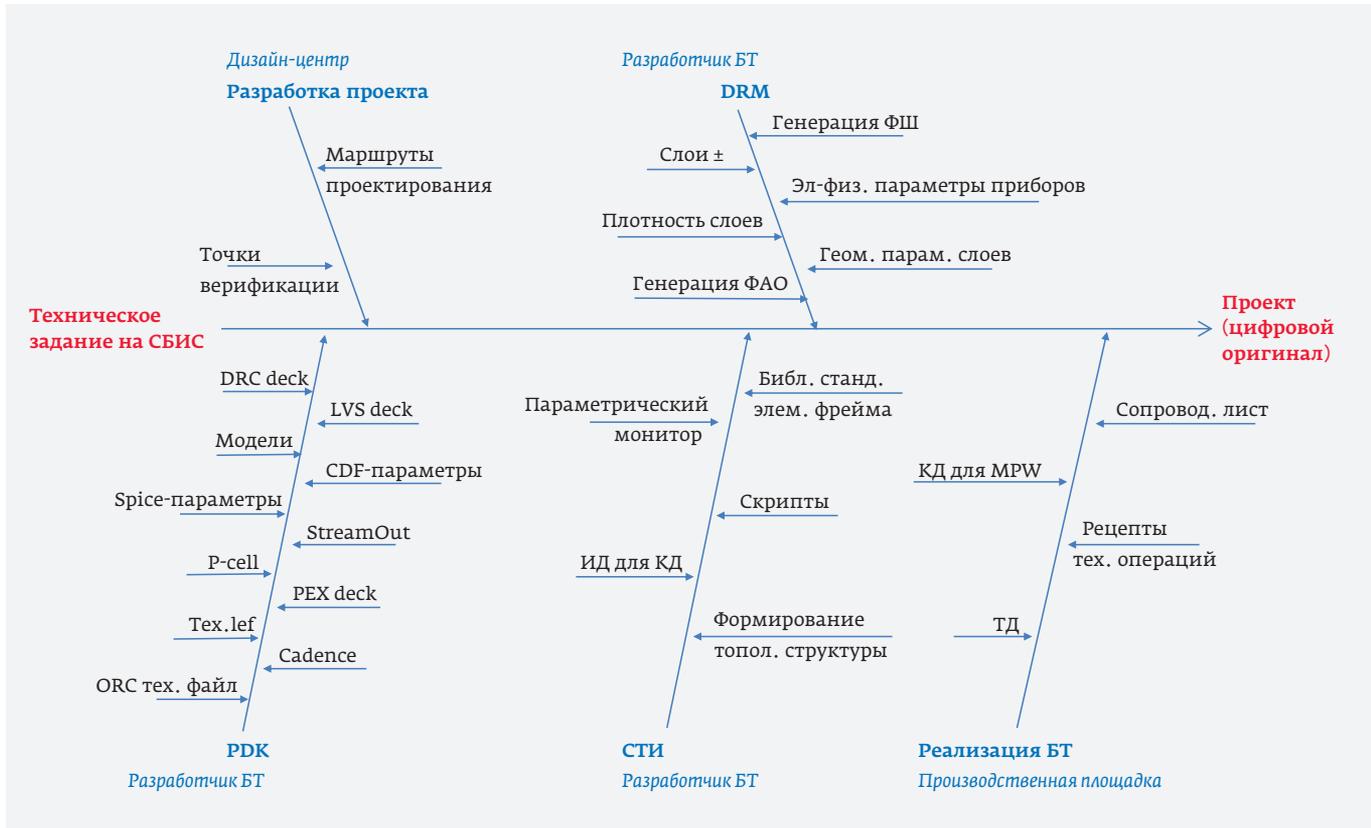


Рис. 1. Диаграмма Исикава для процесса проектирования и производства СБИС

ниями через создание специального комплекта документации на MPW;

- необходимость аутсорсинга процессов проектирования и поддержания актуальности комплекта средств проектирования (PDK).

Вышеперечисленные факторы приводят к тому, что существует большое количество точек, которые могут настраиваться и исполняться различными участниками процесса по-разному. Для наглядности на рис. 1, в форме диаграммы Исикава, представлены изменяемые составляющие процесса проектирования и производства.

Изменения управляемых условий проектирования проходят этап внедрения в формате релизов, которые выпускаются уже после аттестации базовой технологии. Частота, сложность и объем вносимых изменений определяются факторами не однородной загрузки, когда на одной производственной линейке, в рамках одной базовой технологии, производятся серийно изготавливаемые коммерческие изделия, ОКР в составе MPW и пластины с кристаллами заказанных элементов. Как показывает практический опыт применения нескольких базовых технологий в период 2015–2019 годов, цели измене-

ний различные и заказчиками изменений могут выступать:

- технологи производственной площадки – в целях повышения процента выхода годных и добавления дополнительных точек контроля техпроцесса;
- главные конструктора ОКР, сторонние дизайн-центры – в целях расширения возможностей базовой технологии (добавление опций или уменьшения количество слоев), корректировка технических ошибок;
- разработчики служебной технологической информации для параметрического монитора – для выполнения новых требований DRM;
- разработчики DRM, PDK – для соответствия комплекта средств проектирования реализуемой базовой технологии на площадке.

Экономическая эффективность проектирования имеет прямую связь с минимизацией количества запусков, связанных с корректировками проектов. Современный САПР дает большие возможности для сокращения количества корректировок. Это становится возможным благодаря, в частности, непрерывному возрастанию доли процессов верифика-

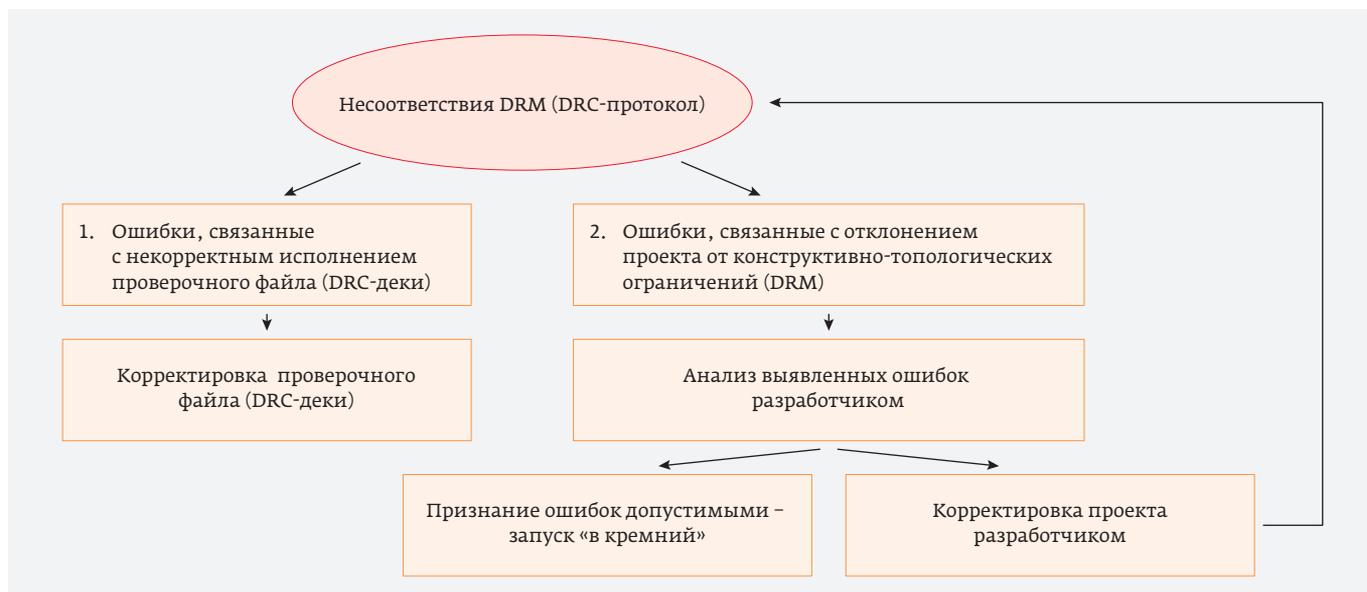


Рис. 2. Несоответствия DRM (DRC-протокол)

ции в общем процессе проектирования, но основным способом конечной верификации остается подтверждение «в кремнии» соответствия требованиям, заданным в техническом задании. При отклонении «в кремнии» от заданных параметров дизайн-центр должен проанализировать отклонения и провести корректировку цифрового оригинала СБИС (иногда несколько раз).

Одними из основных методов верификации ЦО СБИС перед запуском являются: LVS (соответ-

ствие топологии проекта схеме электрической принципиальной) и DRC (соответствие топологии конструктивно-топологическим ограничениям). DRC-проверки проводятся, как правило, в автоматизированном режиме в формате единых требований к верификации топологии проектов, как внешних так и внутренних [4]. Накопленная База данных дает возможность проведения количественного и качественного анализа DRC-несоответствий, количества итераций проектов в привязке к дизайн-центрам, технологиям, версиям PDK, датам выпуска и т. п.

Проектирование и изготовление пластин с кристаллами заказанных элементов создает возможность проведения сравнительного анализа результативности проектирования по проектам различных дизайн-центров.

Все несоответствия DRM и действия с ними можно условно разделить на две большие группы (рис. 2).

При этом в рамках одной базовой технологии могут реализовываться проекты, созданные по разным версиям PDK и, как следствие, с отличными условиями проектирования. Результаты статистического анализа, на при-

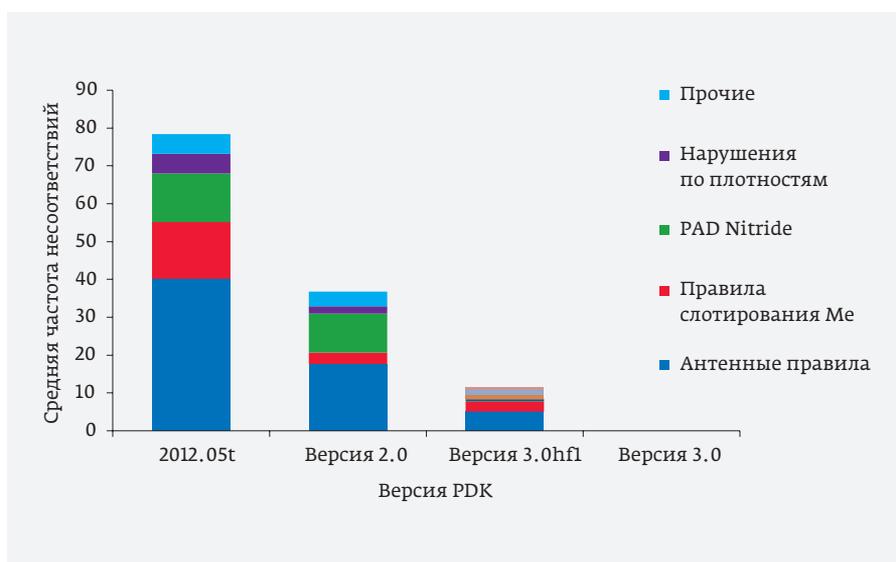


Рис. 3. Распределение средней частоты и типов несоответствий DRM по версиям PDK технологии БТ-1

мере двух базовых технологий (БТ-1 и БТ-2), количество несоответствий DRM в зависимости от версии PDK представлены на рис. 3 и 4.

Изменения PDK, связанные с изменением или ужесточением конструктивно-технологических ограничений DRM и связанных с ними проверочных файлов (DRC-deck), влекут за собой возрастание количества несоответствий (рис. 4), что, в условиях ограниченных временных ресурсов приводит к затруднению проведения полного исправления всех несоответствий, поэтому они ранжируются разработчиком совместно с ведущим технологом как «допустимые».

Как видно из представленных графиков, основными областями, в которых несоответствия DRM признаются допустимыми, являются:

- группа антенных правил (проверка обязательна для финализации топологии). Нарушение антенных правил критично проявлением антенного эффекта в ходе плазмо-химического травления и, как следствие, возможного пробоя подзатворного окисла;
- группа правил слотирования металлов для широких шин (проверка является рекомендуемой для финализации топологии). Нарушение правил слотирования широких шин металлизации может привести к возникновению механических напряжений в металле и возможности его отслаивания;
- группа правил Pad Nitride (пассивация);
- незначительные нарушения по плотностям в слоях металлизации и активных областях (проверка обязательна для финализации топологии). Грубые нарушения по плотностям приводят к невозможности линейных размеров по площади кристалла, а также в особых случаях к возможности изменения геометрии пластин.

Принятие решения о пропуске в производство ЦО СБИС с несоответствиями принимается разработчиком и ведущим технологом, а принятие связанных с ними рисков остается за разработчиком СБИС.

Интерес представляют количественные данные о несоответствиях DRM, признанными разработчиками допустимыми в разрезе различных дизайн-

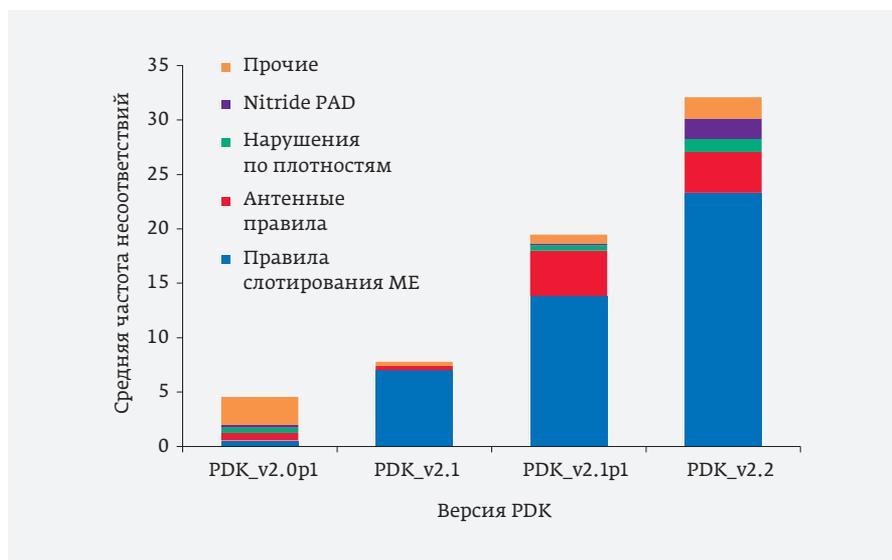


Рис. 4. Распределение средней частоты выявленных несоответствий DRM в проектах по версиям PDK технологии БТ-2

центров. Как показывает анализ на примере двух базовых технологий БТ-1 и БТ-2, наблюдается большой разброс – от «0» до десятков отклонений от требований DRM (рис. 6), а также разброс в количестве повторных запусков (рис. 7).

В ходе анализа также выявлена закономерность, показывающая стабильность разброса количества несоответствий на один проект по дизайн-центрам, что позволяет сделать выводы об едином методологическом подходе к маршрутам проектирования внутри предприятий-разработчиков, иначе говоря о «культуре проектирования». Как показывает статистика (рис. 6), существуют дизайн-центры, кото-

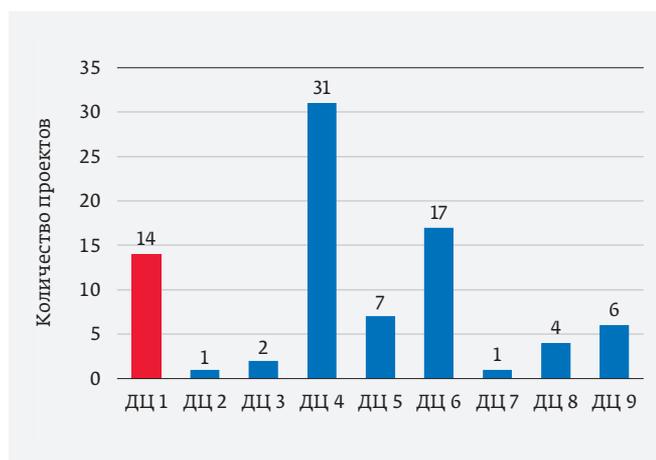


Рис. 5. Распределение количества проектов по дизайн-центрам, выполненных по технологии БТ-1

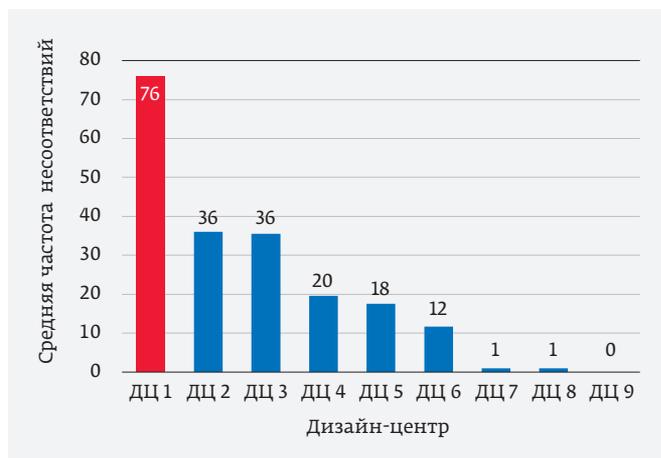


Рис. 6. Распределение средней частоты несоответствий DRM, признанных допустимыми по дизайн-центрам по базовой технологии БТ-1

рые на протяжении многих лет, проектируя изделия под различные технологии, предоставляют проекты с нулевым количеством несоответствий DRM (ДЦ 9 на рис. 6).

Статистический анализ DRC-протоколов, количества корректировок проектов и количества повторных запусков по различным дизайн-центрам позволил выдвинуть гипотезу о корреляционной зависимости количества перезапусков от количества несоответствий DRM. Для проверки этой гипотезы, при расчете корреляционной зависимости для технологий БТ-1 и БТ-2, был применен непараметрический метод ранговой корреляции Спирмена (1), где в роли независимых переменных выступает частота появления несоответствий в проектах, а в роли зависимой переменной – количество повторных запусков по этим проектам.

$$\rho = 1 - \frac{6 \cdot \sum d^2}{n(n^2 - 1)}, \quad (1)$$

где d – разность рангов; n – количество измерений.

Результаты расчетов для технологий приведены в табл. 1.

Таблица 1. Результаты расчетов для технологий

	БТ-1	БТ-2
Коэффициент ранговой корреляции Спирмена	0,411	0,303
t-критерий Стьюдента	4,256	2,602
Критическое значение t-критерия Стьюдента	1,99	1,997

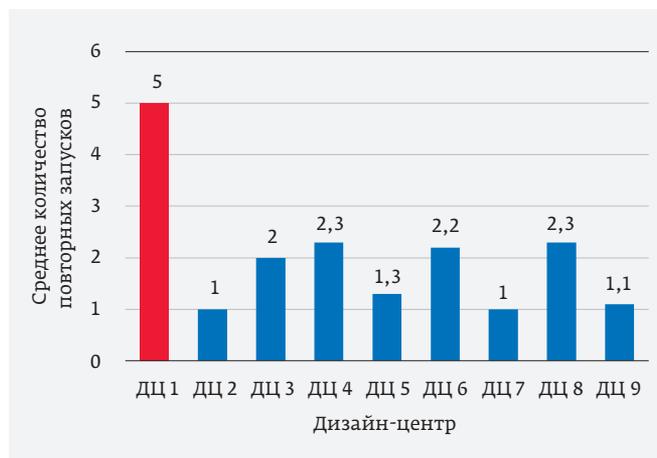


Рис. 7. Распределение среднего количества повторных запусков дизайн-центрами по базовой технологии БТ-1

Данные, представленные в таблице 1, показывают наличие прямой связи между количеством повторных запусков и количеством несоответствий DRM, пропущенных в кремний. Сила связи по шкале Чеддока – умеренная, значение t-критерия Стьюдента указывает на статистическую значимость зависимости признаков ($p = 0,01$).

В приведенных данных рассмотрено влияние только одной точки верификации (DRC) на результативность процесса проектирования, современный САПР обладает значительно более широкими возможностями для проведения верификации «цифрового оригинала» СБИС, и их влияние представляет интерес для дальнейшего исследования.

Представленный анализ изменений условий проектирования, характерных несоответствий позволяет сделать вывод о важности разработки системных документов, закрепляющих требования из лучшей практики проектирования для уменьшения стоимости доли разработки в общей цене продукта. Поскольку «сложная система требует осознанного ограничения разнообразия» [3], для снижения случайных энтропий необходим минимально-достаточный комплект процедур системы менеджмента качества, позволяющий про-

слеживать и фиксировать фактические условия процесса проектирования в целом, а также анализировать влияние фактических условий проектирования на его результативность. В качестве такого комплекта могут

быть предложены следующие документы и процедуры:

- маршруты проектирования СБИС под базовые технологии;
- управление правилами проектирования (DRM);
- обеспечения управляемых условий проектирования (PDK);
- порядок разработки технологических опций;
- порядок идентификации файлов, базовых технологий и опций.

Разработка и успешное введение в действие перечисленных документов требует от руководителей ключевых направлений (владельцев процессов) позитивного взаимодействия для достижения общей поставленной цели.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Представленные данные не содержат конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Красников Г. Я.** В западных санкциях есть и положительные стороны. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://iz.ru/819472/anna-urmantceva/v-zapadnykh-sanktsiakh-esti-polozhitelnye-storony> (дата обращения 20.09.2019).
2. **Матюшин И. М.** Развитие бизнес-моделей электроники. Зарубежный опыт и актуальность для России. Часть 2 // ЭЛЕКТРОНИКА: Наука, Технология, Бизнес. 2017. № 5. С. 82–96.
3. **Горнев Е. С.** Промышленная технология микроэлектроники // Электронная техника. Серия 3. Микроэлектроника. 2019. № 2. С. 41–52.
4. **Иванов В. В., Панкратов А. Л., Рябинин А. Д.** Автоматизация работы с дизайн-центрами при заказе пластин на российской фаундри // «Микроэлектроника-2017»: Тезисы докладов научной конференции форума. – Алушта, 2017. С. 296–298.

ВЛИЯНИЕ ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТОНКИХ ПЛЕНОК Al_2O_3

Были изучены диэлектрические характеристики тонких пленок Al_2O_3 после облучения гамма-квантами от цезиевых источников с энергией 661,7 кэВ. Максимальные поглощенные дозы для исследуемых образцов составили $\sim 10^8$ рад. Тонкие диэлектрические пленки Al_2O_3 толщиной 27 ± 3 нм были получены посредством метода атомно-слоевого осаждения. Исследована динамика изменений диэлектрической проницаемости и тангенса диэлектрических потерь. При дозах облучения до 10^8 рад включительно диэлектрическая проницаемость Al_2O_3 остается практически неизменной. При дозах 10^8 рад тангенс диэлектрических потерь возрастает для измерений, выполненных на частоте 1 000 кГц. В работе проанализированы процессы, происходящие при облучении гамма-квантами и влияющие на значение диэлектрической проницаемости и изменения тангенса диэлектрических потерь.

Ключевые слова: гамма-облучение, high-k-диэлектрики, оксид алюминия (Al_2O_3), тонкие пленки, диэлектрические характеристики

Сведения об авторах:

Долженко Дмитрий Игоревич, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, 195251, e-mail: ddi.dev.94@gmail.com;

Романов Николай Михайлович, кандидат физико-математических наук, Акционерное общество «Светлана-Полупроводники», Россия, Санкт-Петербург, пр. Энгельса, д.27, 194156, e-mail: nikromanov.90@gmail.com;

Капралова Виктория Маратовна, кандидат физико-математических наук, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, 195251, e-mail: kapralova@spbstu.ru;

Сударь Николай Тобисович, доктор физико-математических наук, профессор, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Россия, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, 195251, e-mail: sudar_nt@spbstu.ru

ФОРМА КОНЦЕНТРАТОРОВ МЕХАНИЧЕСКИХ НАПРЯЖЕНИЙ В ЗАДАЧЕ ПО РАСЧЕТУ СОБСТВЕННОЙ ЧАСТОТЫ МЭМС-РЕЗОНАТОРА

Проведено исследование резонатора МЭМС-датчика в условиях его топологической модификации – создания в его конструкции участков с механическими концентраторами напряжений различной формы. Приводятся результаты моделирования как самих напряженных состояний, созданных концентраторами, так и расчет собственной частоты резонатора в зависимости от формы и геометрических размеров концентраторов. Среди представленных форм концентраторов напряжений был выявлен тип, который наиболее эффективен для прецизионного управления частотой резонатора без изменения габаритных размеров его исходной конструкции.

Ключевые слова: кремний, микросистемная техника, микрорезонатор, концентратор механических напряжений, собственная частота.

Сведения об авторах:

Волкова Екатерина Ивановна, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

EFFECT OF GAMMA RADIATION ON DIELECTRIC CHARACTERISTICS OF Al_2O_3 THIN FILMS

Dielectric characteristics of Al_2O_3 thin films after irradiation with gamma quanta from cesium sources with an energy of 661,7 keV were studied. The maximum absorbed doses for the studied samples were $\sim 10^8$ Rad. Dielectric Al_2O_3 thin films with a thickness of 27 ± 3 nm were obtained by atomic layer deposition. The dynamics of changes in dielectric constant and dielectric loss tangent are investigated. With doses up to 10^8 Rad inclusively, the dielectric constant of Al_2O_3 remains almost unchanged. At doses of 10^8 Rad, the dielectric loss tangent increases for measurements performed at a frequency of 1000 kHz. The paper analyzes the processes occurring during irradiation with gamma quanta and affecting the value of dielectric constant and changes in the tangent of dielectric loss.

Keywords: gamma irradiation, high-k dielectrics, aluminum oxide (Al_2O_3), thin films, dielectric characteristics

Data of authors:

Dolzhenko Dmitry Igorevich, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29, Polytechnicheskaya, St. Petersburg, Russia, 195251, e-mail: ddi.dev.94@gmail.com;

Romanov Nikolai Mikhailovich, PhD in Physical and Mathematical Sciences, Joint-Stock Company Svetlana-Semiconductors, 27, Engels Ave., St. Petersburg, 194156, e-mail: nikromanov.90@gmail.com;

Kapralova Victoria Maratovna, PhD in Physical and Mathematical Sciences, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29, Polytechnicheskaya, St. Petersburg, Russia, 195251, e-mail: kapralova@spbstu.ru;

Sudar Nikolay Tobisovich, PhD in Physical and Mathematical Sciences, Professor, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, 29, Polytechnicheskaya, St. Petersburg, Russia, 195251, e-mail: sudar_nt@spbstu.ru

SHAPE OF MECHANICAL STRESS CONCENTRATORS IN THE PROBLEM OF CALCULATION MEMS-RESONATOR EIGENFREQUENCY

A study of the MEMS-sensor resonator under the conditions of its topological modification – the creation in its design areas with mechanical stress concentrators of different shapes. The result of modeling both the stress states created by the concentrators and the calculation of the resonator eigenfrequency depending on the shape and geometric dimensions of the concentrators are presented. Among the presented forms of stress concentrators, the type that is most effective for precision control of the resonator frequency without changing the overall dimensions of its original design was identified.

Keywords: silicon, microsystem technology, microresonator, mechanical stress concentrator, eigenfrequency.

Data of authors:

Volkova Catherine Ivanovna; Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod; Branch of Federal State Unitary Enterprise "Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental

«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», Филиал Федерального государственного унитарного предприятия «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» «Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова», 603137, г. Нижний Новгород, ул. Тропинина, д. 13А, кв. 73, e-mail: kattykat@inbox.ru;

Гусейнов Давуд Вадимович; кандидат физико-математических наук; Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского», 603950, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23, e-mail: davud.guseinov@gmail.com;

Попков Сергей Алексеевич; кандидат физико-математических наук; Филиал Федерального государственного унитарного предприятия «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» «Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова», 603137, г. Нижний Новгород, ул. Тропинина, д. 13А, кв. 73, e-mail: popkov@phys.unn.ru;

Сафонов Алексей Владимирович; кандидат физико-математических наук; Филиал Федерального государственного унитарного предприятия «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» «Научно-исследовательский институт измерительных систем им. Ю.Е. Седакова», 603137, г. Нижний Новгород, ул. Тропинина, д. 13А, кв. 73, e-mail: safalex@mail.ru.

АРХИТЕКТУРА ВСТРОЕННЫХ СРЕДСТВ САМОТЕСТИРОВАНИЯ МИКРОСХЕМ ПАМЯТИ СТАТИЧЕСКОГО ТИПА

Предложены принципы построения архитектуры встроенных средств самотестирования микросхем памяти статического типа. Генерация программ обеспечивается алгоритмическим генератором, занимающим небольшую площадь кристалла микросхемы. Предлагаются форматы команд и микроопераций, сокращающие объем памяти, необходимой для хранения программ тестов. Применение алгоритмического генератора повышает диагностические свойства формируемых тестов за счет их выполнения без пропусков тактов обращения к тестируемой микросхеме.

Ключевые слова: алгоритмический генератор, запоминающие устройства, самотестирование

Сведения об авторах:

Волобуев Сергей Васильевич, Волгоградский государственный аграрный университет, Российская Федерация, 400002, Южный федеральный округ, Волгоградская обл., г. Волгоград, пр. Университетский, д. 26, e-mail: sergey-aspir14@yandex.ru;

Рябцев Владимир Григорьевич, доктор технических наук, профессор, Волгоградский государственный аграрный университет, Российская Федерация, 400002, Южный федеральный округ, Волгоградская обл., г. Волгоград, пр. Университетский, д. 26, e-mail: akim.onoke@mail.ru.

Physics” “Research Institute of Measuring Systems named after Yu.Ye. Sedakov”, Nizhny Novgorod, Russia, 13A-73, Tropinina street, Nizhni Novgorod, 603137, e-mail: kattykat@inbox.ru;

Guseinov Davud Vadimovich; candidate of physical and mathematical sciences; Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod, 23, Prospekt Gagarina (Gagarin Avenue), Nizhny Novgorod, Russia, 603950 davud.guseinov@gmail.com;

Popkov Sergey Alekseevich; candidate of physical and mathematical sciences; Branch of Federal State Unitary Enterprise “Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics” “Research Institute of Measuring Systems named after Yu.Ye. Sedakov”, Nizhny Novgorod, Russia, 13A-73, Tropinina street, Nizhni Novgorod, 603137, e-mail: popkov@phys.unn.ru;

Safonov Alexey Vladimirovich; candidate of physical and mathematical sciences; Branch of Federal State Unitary Enterprise “Russian Federal Nuclear Center – All-Russian Research Institute of Experimental Physics” “Research Institute of Measuring Systems named after Yu.Ye. Sedakov”, Nizhny Novgorod, Russia, 13A-73, Tropinina street, Nizhni Novgorod, 603137, e-mail: safalex@mail.ru.

ARCHITECTURE BUILT-IN SELF TEST MEMORY CHIPS OF STATIC TYPE

The principles of construction of architecture of built-in means of self-testing of memory chips of static type are offered. Program generation is provided by an algorithmic generator, which occupies a small area of the chip. Command and micro-operation formats are proposed that reduce the amount of memory required to store test programs. The use of an algorithmic generator increases the diagnostic properties of the generated tests due to their execution without missing cycles of access to the tested chip.

Keywords: algorithmic generator, storage devices, self-testing

Data of authors:

Volobuev Sergey Vasilievich, Volgograd State Agrarian University, pr. Universitetsky, 26, pr. Universitetsky, Volgograd, Volgograd Region, Southern Federal District, Russian Federation, 400002, e-mail: sergey-aspir14@yandex.ru;

Ryabtsev Vladimir Grigorievich, doctor of technical sciences, professor, Volgograd State Agrarian University, pr. Universitetsky, 26., pr. Universitetsky, Volgograd, Volgograd Region, Southern Federal District, Russian Federation, 400002, e-mail: akim.onoke@mail.ru.

НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ДЛЯ SCA BLINDED KEY RSA РЕАЛИЗАЦИИ

В рамках работы оценивается эффективность методов машинного обучения, применительно к анализу электромагнитного побочного канала защищенных микросхем.

Ключевые слова: Классификация временных рядов; сверточная нейронная сеть, смарт-карты, RSA

Сведения об авторах:

Благодатов Виталий Витальевич, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: vblagodatov@niime.ru;

Кравцов Александр Сергеевич, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: akravtsov@niime.ru;

Нуйкин Андрей Валерьевич, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: anuykin@niime.ru.

ПОЛУЧЕНИЕ КОНЦЕНТРАТА ТЕТРАМЕТИЛАММОНИЯ ГИДРОКСИДА МЕМБРАННЫМ ЭЛЕКТРОЛИЗОМ РАСТВОРА ХЛОРИДА ТЕТРАМЕТИЛАММОНИЯ

Для разработки технологии получения концентрата тетраметиламмония гидроксида выбрано направление исследований, заключающееся в мембранном электролизе водного раствора хлорида тетраметиламмония, правильность выбора которого подтверждается экспериментальными данными, полученными в лабораторных условиях и в опытно-промышленном масштабе. На основании полученных результатов оптимизированы параметры электросинтеза концентрата тетраметиламмония гидроксида и определены его технико-экономические показатели.

Ключевые слова: концентрат тетраметиламмония гидроксида, мембранный электролиз, раствор хлорида тетраметиламмония

Сведения об авторах:

Конарев Александр Андреевич, доктор технических наук, Научно-исследовательский институт полупродуктов и красителей, 141701, г. Долгопрудный Московской области, Лихачевский проезд, д. 7, e-mail: lab32@niopik.ru;

Варламов Денис Александрович, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: dvarlamov@niime.ru;

Грибов Борис Георгиевич, доктор химических наук, профессор, член-корреспондент РАН, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1.

NEURAL NETWORK IN SCA BLINDED KEY RSA IMPLEMENTATION

The article assesses the effectiveness of Machine Learning for Side Channel Analysis of the Secured Chips.

Keywords: time series classification; convolutional neural network; smart cards, RSA

Data of authors:

Blagodatov Vitaly Vitalyevich, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: vblagodatov@niime.ru;

Kravtsov Aleksandr Sergeevich, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: akravtsov@niime.ru;

Nuykin Andrey Valerievich, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: anuykin@niime.ru.

PRODUCTION OF TETRAMETHYLAMMONIUM HYDROXIDE CONCENTRATE BY MEANS OF MEMBRANE ELECTROLYSIS OF TETRAMETHYLAMMONIUM CHLORIDE SOLUTION

To develop a technology for producing a tetramethylammonium hydroxide concentrate, one direction of research is chosen. The research includes a membrane electrolysis of an aqueous solution of the tetramethylammonium chloride, the correctness of which is confirmed by experimental data acquired in laboratories and in industrial experiments. On the basis of the gained results, parameters of electrosynthesis of the tetramethylammonium hydroxide concentrate are optimized and its technical and economic indices are determined.

Keywords: a tetramethylammonium hydroxide concentrate, membrane electrolysis, tetramethylammonium chloride solution

Data of authors:

Konarev Alexandr Andreevich, doctor of technical sciences, Science and Research institute of Organic Intermediates and Dyes, 7, Likhachevsky proezd, Moscow region, Dolgoprudny, 141701, e-mail: lab32@niopik.ru;

Varlamov Denis Alexandrovich, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: dvarlamov@niime.ru;

Gribov Boris Georgievich, doctor of chemical Sciences, Professor, Corresponding Member of the RAS, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460.

ФОРМИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ ГИДРАТОВ ФОСФОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПРИ АНИЗОТРОПНОМ ТРАВЛЕНИИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ В ГАЛОГЕНСОДЕРЖАЩЕЙ ПЛАЗМЕ

Выявлен эффект образования кристаллов гидратов фосфониевых соединений после анизотропного травления поликристаллического или эпитаксиального кремния в галогенсодержащей плазме. Эффект наблюдается на пластинах до проведения обработки в жидких средах. В случае последующего использования маски, с помощью которой плазменным травлением создавался топологический рисунок в кремнии, для последующих операций ионного легирования структур существует фатальный риск снижения процента выхода годных и уровня надежности полупроводниковых приборов. Выявлены условия проявления эффекта, его развитие во времени и механизм формирования кристаллов на поверхности. Предложены меры по исключению рисков появления кристаллов гидратов фосфониевых соединений.

Ключевые слова: фосфоний, надежность, плазменное травление кремния

Сведения об авторе:

Янович Сергей Игоревич, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: syanovich@niime.ru.

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЫ В ОКСИДЕ ГАФНИЯ В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ И ДАВЛЕНИЯ

В работе представлены результаты теоретических расчетов термодинамических потенциалов полярной орторомбической, моноклинной и тетрагональной фаз оксида гафния. Вычисления выполнены методами расчетов из первых принципов в недеформированных ячейках и в напряженных структурах, в которых изотропное давление изменялось в диапазоне от 5 до 40 ГПа. Потенциалы рассчитывались при абсолютной температуре до 2000 К. Показано, что орторомбическая фаза стабилизируется при давлении 30 ГПа и температуре до 600 К. Учет тепловых флуктуаций атомов сдвигает режимы стабилизации орторомбической фазы в область меньших давлений и температур. Установлено, что зависимость термодинамического стимула ΔF_{ft} перехода $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ имеет немонотонный характер и по температуре, и по давлению. Давление способствует переходу $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ вплоть до значений 20 ГПа. Дальнейший рост давления приводит к уменьшению термодинамического стимула ΔF_{ft} , и при давлении, большем 35 ГПа, ΔF_{ft} становится отрицательным. В условиях давления до 3,6 ГПа возрастание температуры уменьшает стимул перехода, при большем – увеличивает его. Кроме того, зависимости $\Delta F_{ft}(T)$ при давлениях 5 и 10 ГПа имеют ярко выраженные минимумы в области комнатных температур.

Ключевые слова: оксид гафния; фазовые переходы; расчеты из первых принципов; свободная энергия Гельмгольца

Сведения об авторах:

Итальянцев Александр Георгиевич, доктор физико-математических наук, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: aitalyantsev@niime.ru;
Константинов Вячеслав Сергеевич, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: vkonstantinov@niime.ru.

PHOSPHONIUS HYDRATES CRYSTALS GROWTH AFTER ANISOTROPIC HALOGEN CONTAINING PLASMA ETCHING OF POLYCRYSTALLINE SILICON

An effect of phosphonium hydrates crystals growth after anisotropic halogen containing plasma etching of epitaxial or polycrystalline silicon was discovered. Effect was observed before wafer wet clean processing. In case of consequent use of residual resist mask for next process steps like ion implant there is a risk of drastic device yield and reliability drop. Phosphonium hydrates crystals growth conditions were studied and their development on wafer surface within post-operation time frame as well. Preventive measures for phosphonium hydrates crystals growth total elimination is proposed.

Keywords: Phosphonium, reliability, silicon dry etch

Data of the author:

Yanovich Sergey Igorevich, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: syanovich@niime.ru.

CALCULATIONS OF TEMPERATURE AND PRESSURE DEPENDENCES OF THERMODYNAMICAL POTENTIALS OF ORTHORHOMBIC PHASE IN HAFNIA

The results of theoretical calculations of thermodynamical potentials of polar orthorhombic, monoclinic, and tetragonal phase of hafnium oxide are presented. The abinitio calculations were carried out for the unstrained structures and the strained ones under an isotropic pressure varying from 5 until 40 GPa. The potentials were calculated at absolute temperatures until 2000 K. It is shown that orthorhombic phase is stabilized at a pressure of 30 GPa and temperatures until 600 K. The regimes of the stabilizations of orthorhombic phase shift to lower temperatures and pressures if one takes in account atomic thermal fluctuations. The dependences of the thermodynamical potential ΔF_{ft} of the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ transition are ascertained to be nonmonotonic both on pressure and temperature. Pressure favours the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ transition until the value of 20 GPa. The further growth of pressure results in a decrease of ΔF_{ft} and the potential ΔF_{ft} becomes negative at pressures greater than 35 GPa. At pressures lower than 3.6 GPa, a temperature growth reduces the $t\text{-HfO}_2 \rightarrow f\text{-HfO}_2$ stimuli and enhances it otherwise. Moreover, it is discovered that the $\Delta F_{ft}(T)$ curves at 5 and 10 GPa have strong minima at room temperatures.

Keywords: hafnium oxide; phase transitions; abinitio calculations; Helmholtz free energy

Data of authors:

Italyantsev Aleksandr Georgievich, doctor of physical and mathematical Sciences, "Molecular Electronics Research Institute", Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: aitalyantsev@niime.ru;
Konstantinov Viacheslav Sergeevich, Molecular Electronics Research Institute, Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: vkonstantinov@niime.ru.

АНАЛИЗ КЛЕТОЧНО-АВТОМАТНЫХ АЛГОРИТМОВ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ РАЗМЕЩЕНИЯ И ТРАССИРОВКИ

В статье предпринята попытка систематизировать и адаптировать к топологическому проектированию СБИС, в частности с программируемой логикой, современный исследовательский опыт, касающийся классических и неклассических клеточно-автоматных моделей, разработанных для решения задач поиска кратчайшего пути и размещения логических элементов. Особое внимание уделено рассмотрению клеточно-автоматной формализации алгоритмов поиска кратчайшего пути с семантикой мультиагентности. Приведен подробный разбор модели решения задачи размещения логических элементов на базе систолической структуры. Обозначены основные сложности и возможные проблемы переформулировки существующих и создания новых клеточно-автоматных моделей и алгоритмов для двух центральных задач топологического проектирования.

Ключевые слова: топологическое проектирование, клеточные автоматы, параллельные алгоритмы, задача поиска кратчайшего пути, размещение

Сведения об авторах:

Гаврилов Сергей Витальевич, доктор технических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем проектирования в микроэлектронике Российской академии наук», г. Зеленоград, г. Москва, 124365, Москва, Зеленоград, ул. Советская, дом 3, e-mail: s.g@ippm.ru;

Заплетина Мария Андреевна, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем проектирования в микроэлектронике Российской академии наук», г. Зеленоград, г. Москва, 124365, Москва, Зеленоград, ул. Советская, дом 3, e-mail: zapletina_m@ippm.ru.

ПРОБЛЕМЫ И ЗАДАЧИ РАЗВИТИЯ СИСТЕМЫ МЕНЕДЖМЕНТА КАЧЕСТВА ПРОЦЕССОВ ПРОЕКТИРОВАНИЯ СБИС

В статье рассмотрены особенности процессов верификации цифровых оригиналов СБИС на основании практического опыта реализации базовых технологий на отечественной производственной площадке. Приведен статистический анализ результатов DRC-верификации проектов, их классификация. Сформулированы ключевые направления развития системы менеджмента качества для повышения результативности процессов проектирования.

Ключевые слова: изменения, PDK, базовая технология, верификация проекта, DRC

Сведения об авторах:

Панасюк Виталий Николаевич, доктор технических наук, профессор, действительный член Академии проблем качества, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: vpanasyuk@niime.ru;

Шипицин Дмитрий Святославович, кандидат физико-математических наук, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: dshipitsin@niime.ru;

Панкратов Александр Львович, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: apankratov@niime.ru;

Королева Анна Николаевна, Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники», 124460, г. Москва, Зеленоград, 1-ый Западный проезд 12, стр. 1, e-mail: akoroleva@niime.ru.

THE ANALYSIS OF CELLULAR AUTOMATA ALGORITHMS FOR PLACEMENT AND ROUTING TASKS

The paper makes an attempt to systematize and adapt to layout design of VLSI, in particular, with programmable logic, the modern research experience regarding classical and non-classical cellular automata models to solve the problems of searching the shortest paths and placement. The special attention is paid to the consideration of cellular automata formalization of shortest path search algorithms by means of the multiagency semantics. A detailed analysis of the model for solving the problem of the logical elements placement based on a systolic structure is given. The main difficulties and possible problems of a reformulation of existing and a creation of the new cellular automata models and algorithms for two central problems of layout design are discussed.

Keywords: layout design, cellular automata, parallel algorithms, shortest path search, placement

Data of authors:

Gavrilov Sergey Vitalievich, doctor of technical sciences, professor, Institute for Design Problems in Microelectronics of Russian Academy of Sciences, 3, Sovetskaya Street, Moscow 124365, Russian Federation, e-mail: s.g@ippm.ru;

Zapletina Maria Andreevna, Institute for Design Problems in Microelectronics of Russian Academy of Sciences, 3, Sovetskaya Street, Moscow 124365, Russian Federation, e-mail: zapletina_m@ippm.ru.

PROBLEMS AND TASKS OF DEVELOPMENT OF THE SYSTEM OF MANAGEMENT OF QUALITY OF PROCESSES OF DESIGNING VLSI

The article discusses the features of the verification processes of VLSI digital originals based on practical experience in the implementation of basic technologies at a domestic production site. A statistical analysis of the results of DRC verification of projects, their classification. The key directions of the development of the quality management system are formulated to increase the effectiveness of design processes.

Keywords: changes, PDK, basic technology, project verification, DRC

Data of authors:

Panasyuk Vitaly Nikolaevich, doctor of technical Sciences, Professor, Molecular Electronics Research Institute, Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: vpanasyuk@niime.ru;

Shipitsin Dmitiry Svyatoslavovich, candidate of physical and mathematical Sciences, Molecular Electronics Research Institute, Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: dshipitsin@niime.ru;

Alexander Lvovich Pankratov, Molecular Electronics Research Institute, Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: apankratov@niime.ru;

Koroleva Anna Nikolaevna, Molecular Electronics Research Institute, Stock Company, 12/1, 1-st Zapadny Proezd, Zelenograd, Moscow, 124460, e-mail: akoroleva@niime.ru.

**ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕХНИКА. Серия 3.
МИКРОЭЛЕКТРОНИКА ©**

Перерегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи и массовых коммуникаций 14 августа 2013 г., ПИ №ФС77-55092.

Журнал издается 4 раза в год с 1965 года.
Подписано в печать 30.09.2019.

Отпечатано в соответствии с предоставленными материалами в ООО «Вива-Стар». № заказа 267682.
✉ 107023, г. Москва, ул. Электrozаводская д. 20

Тираж 500 экз. Цена договорная.

© При перепечатке ссылка на журнал «ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕХНИКА. Серия 3. МИКРОЭЛЕКТРОНИКА» обязательна. Мнение редакции не всегда совпадает с точкой зрения авторов статей. Рукописи рецензируются, но не возвращаются. Срок рассмотрения рукописей – 5 недель.

ИЗДАТЕЛЬ

АО «РИЦ «ТЕХНОСФЕРА»
☎ +7 495 234-01-10 📠 +7 495 956-33-46
✉ journal@electronics.ru
Подготовлено АО «РИЦ «ТЕХНОСФЕРА»

КОРРЕКТОР: А. Лужкова

КОМПЬЮТЕРНАЯ ВЕРСТКА: А. Небольсин