

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Горобчука Алексея Геннадьевича «Математическое моделирование плазмохимических технологий микроэлектроники», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 - «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Учитывая широкое применение плазмохимии в микроэлектронике, общая актуальность диссертационной работы очевидна. Более конкретный вопрос – насколько актуален предлагаемый подход к моделированию процесса плазменной обработки поверхностей с помощью ВЧ-разряда, когда газ, взаимодействующий с подложкой, представляется в виде сплошной среды, а химические реакции описываются на уровне констант скоростей реакций. Вопрос связан с тем, что в последние годы для моделирования взаимодействия низкотемпературной плазмы с твердыми поверхностями стали активно применяться методы молекулярной динамики. Они дают информацию на атомном уровне разрешения, но при этом требуют знания дифференциальных сечений реакций. В принципе, проблему можно решить применяя методы квантовой химии, например, теорию функционала плотности, или используя полуэмпирические потенциалы, если они есть для интересующих реагентов. Однако, для многокомпонентных систем применение таких подходов выливается в вычислительное время, неприемлемое для практических расчетов, так что исследования на атомном уровне разрешения обычно не выходят за рамки отдельных каналов реакции. Поэтому, если ставить целью разработку комплекса вычислительных программ, который можно будет использовать на практике для оптимизации процессов плазмохимического травления, что и является целью диссертационной работы, предлагаемый подход представляется оптимальным, а его формулировка, исследование и реализация – актуальными.

Диссертация построена по классической схеме – введение в предмет работы, описание используемого подхода и результаты, в данном случае – результаты расчетов.

Введение – весьма подробное, дающее хорошее представление о том, в каком направлении надо двигаться, что будет рассматриваться в работе, и какое место полученные результаты займут среди имеющихся.

В методической части (Главы 1 и 2) представлены используемые физико-химическая и гидродинамическая модели плазмы и алгоритмы численного решения задачи. Физико-химическая модель учитывает процессы диссоциации тетрафторида углерода, кислорода, водорода и продуктов реакции электронным ударом, их рекомбинацию, а также гетерогенные реакции на электродах и поверхности кремния. Кроме этого, учитывается тепловое излучение среды и его поглощение в спектральном представлении. Плазма рассматривается как сплошная среда, ее движение описывается

уравнениями Навье-Стокса. Существенно, что при этом дополнительно учитываются эффекты скольжения на твердой поверхности и термодиффузия, что позволяет продвинуться в область низких давлений, характерных для применения ВЧ-разряда для обработки поверхностей. В части численных алгоритмов следует отметить, во-первых, использование эффективного метода регуляризации численной схемы для расчета ВЧ-разряда в виде экспоненциальной подгонки и, во-вторых, распараллеливание вычислений путем расчета различных каналов реакции на отдельных процессорах (ядрах), что очень актуально для таких сложных систем как многокомпонентная плазма.

В последующих главах разработанные методы применяются к конкретным задачам. Сначала, в Главе 3, рассматриваются две практических схемы реакторов – pedestal и stadium. При этом моделирование кинетики осуществляется в рамках бинарной модели, когда все компоненты кроме тетрафторида углерода рассматриваются как одна пассивная компонента. Выяснено влияние диффузии и термодиффузии активной компоненты к поверхности кремния и стенкам реактора на процесс травления; показано, что перенос тепла осуществляется, в основном, теплопроводностью и излучением, а не конвекцией; определены оптимальные размеры протектора для обеспечения равномерности травления образца, Далее, в Главах 4 и 5, рассматривается более простая конструкция – радиальный реактор, но кинетика усложняется - рабочая среда представляет собой плазму тетрафторида углерода в смеси с кислородом или водородом. Здесь же исследуется, как характеристики ВЧ-разряда (плотность электронов и структура разряда) влияют на процесс травления кремниевого образца.

Все исследования выполнены тщательно, на профессиональном уровне. Используемые методы хорошо обоснованы и протестированы, что дает уверенность в достоверности полученных результатов. Диссертация хорошо написана, изложение подробное и ясное. У меня нет замечаний, которые существенно снизили бы оценку работу.

Тем не менее, хотелось бы указать на некоторые недостатки.

1. Наряду с обзором достижений в рамках моделей сплошной среды, приведенном во Введении, был бы полезен краткий обзор результатов, получаемых на атомном уровне разрешения - с помощью методов Монте Карло и молекулярной динамики.

2. Хотя используемые каналы реакций формально описаны, нигде не приведены, и не обсуждаются, зависимости констант скоростей реакций от температуры. В частности, было бы интересно посмотреть, как изменяются результаты при вариации этих зависимостей.

3. Следовало бы сравнить результаты расчетов с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Надо отметить, что эти замечания выходят за рамки специальности, по которой представляется диссертационная работа, и не должны влиять на ее

оценку. В то же время, внесение соответствующих дополнений повысило бы общий уровень работы, и ее можно бы издать в виде монографии.

Результаты работы хорошо опубликованы в журналах, предусмотренных перечнем ВАК. Автореферат верно отражает содержание диссертации. Совокупность полученных в работе результатов можно квалифицировать как крупный вклад в решение научной проблемы, имеющей важное значение для микроэлектроники – создание пакета вычислительных программ для оптимизации процессов плазмохимического травления.

Считаю, что диссертационная работа представляет собой законченное исследование, которое по своей актуальности, новизне и достоверности результатов удовлетворяет требованиям ВАК для докторских диссертаций, а ее автор, Алексей Геннадьевич Горобчук, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.18 - «математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Главный научный сотрудник,  
лаборатория моделирования  
ФГБУН Института теплофизики СО РАН,  
д. ф.-м.н., профессор

Чекмарев Сергей Федорович

20 января 2017г.

ФГБУН Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
630090, Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева 1,  
ИТ СО РАН  
тел. (383)316-50-48  
e-mail: [chekmarev@itp.nsc.ru](mailto:chekmarev@itp.nsc.ru)

Подпись Чекмарева С. Ф. заверяю:

Ученый секретарь  
ФГБУН Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
д.ф.-м.н

Куйбин П. А.