Математические структуры и моделирование 2025. № 1 (73). С. 70–80

УДК 533.9:53.09 DOI 10.24147/2222-8772.2025.1.70-80

МНОГОФАКТОРНЫЙ РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА ГРАДИЕНТНОГО СПУСКА ПРИ АНАЛИЗЕ ПЛЁНОК НИТРИДА АЛЮМИНИЯ, СФОРМИРОВАННЫХ МАГНЕТРОННЫМ РАЗРЯДОМ

А.А. Потехин^{1,2}

инженер, e-mail: potekhinaleksandr.0101@gmail.com **В.И. Струнин**^{1,2} д.ф.-м.н., профессор, e-mail: StruninVI@omsu.ru **Л.В. Баранова**^{1,2} к.т.н., доцент, e-mail: BaranovaLV@omsu.ru **Н.А. Чириков**² младший научный сотрудник, e-mail: nikita.chir@mail.ru

¹Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, Омск, Россия ²Институт радиофизики и физической электроники ОНЦ СО РАН, Омск, Россия

Аннотация. Плёнки нитрида алюминия находят применение при конструировании устройств селекции и генерации сигналов в СВЧ диапазоне на продольных акустических волнах. На качество тонких плёнок нитрида алюминия при магнетронном формировании влияют следующие технологические параметры: давление в вакуумной камере, температура подложки, мощность, подаваемая на мишень, соотношение газовых потоков аргона и азота. Большое количество технологических параметров неоднозначно влияет на качество поверхности и свойства плёнок. Для определения оптимальных технологических режимов был проведён многофакторный регрессионный анализ.

Ключевые слова: плёнки нитрида алюминия, регрессионный анализ, метод градиентного спуска, стехиометрический состав плёнок, коэффициент пьезомодуля, шероховатость, коэффициент детерминации.

Введение

В последнее время наблюдается значительный интерес к плёнкам нитрида алюминия (AlN) из-за их оптических, электрических, диэлектрических и акустических свойств, кроме того, плёнки нитрида алюминия находят применение при конструировании устройств селекции и генерации сигналов в СВЧ-диапазоне на объёмных акустических волнах (BAW) вследствие высокого значения коэффициента электромеханической связи, характеризующей пьезоэлектрические свойства плёнки и высокой скорости продольной акустической волны (до 11000 м/с).

Значение коэффициента электромеханической связи определяется продольным пьезомодулем d_{3_3} , определяемым ориентацией кристаллитов и структурой ячеек в

плёнках AlN. Таким образом, изучение зависимости свойств плёнок AlN от технологических режимов имеет ключевое значение для создания высокоэффективных микроэлектронных устройств [1].

В процессе формирования плёнок нитрида алюминия магнетронным напылением необходимо создать и контролировать такие условия осаждения, чтобы текстура выращенной плёнки имела определённую ориентацию кристаллитов, а именно перпендикулярную к поверхности подложки, с характерной для материала гексагональной сингонией [2].

В процессе магнетронного распыления алюминия в атмосфере аргон – азота необходимо установить оптимальные значения технологических параметров разряда: давления в камере, температуры подложки, мощности, подаваемой на мишень, соотношения газовых потоков аргона и азота и др. Выбор конкретных значений осложняется тем, что связь каждого из перечисленных выше параметров со свойством растущей плёнки неоднозначна, поэтому необходимо провести регрессионный анализ полученных экспериментальных данных параметров формируемой плёнки с технологическими параметрами магнетронного распыления. Это даст возможность установить наиболее оптимальные режимы осаждения и получать плёнки AlN требуемого качества.

Цель данной работы – выявление с помощью регрессионного анализа оптимальных условий формирования тонких плёнок нитрида алюминия с использованием метода градиентного спуска. Понимание этой зависимости играет ключевую роль в оптимизации производственного процесса и повышении качества конечной продукции.

1. Применение регрессионного анализа данных плёнок AlN при формировании в магнетронном распылении

Методы регрессионного анализа позволяют строить математические модели, определяющие взаимосвязи и степень влияния каждой переменной на экспериментальный результат. Цель такого анализа заключается в минимизации ошибок прогнозирования путём подбора оптимальных коэффициентов в уравнении регрессии, что способствует более точному описанию поведения физических систем и позволяет выявлять новые закономерности в различных областях физики. В работе для нахождения экстремума полученной функции путём применения регрессионного анализа использовался метод градиентного спуска, так как этот метод прост в реализации алгоритма нахождения локального минимума функции, даже если она является сложной и нелинейной [3].

Был проведён многофакторный регрессионный анализ данных по морфологии поверхности, элементному составу и пьезосвойствам плёнок нитрида алюминия в зависимости от разных технологических параметров магнетронного распыления. В качестве ключевых предикторов были выбраны среднеквадратичная шероховатость R_a , коэффициент пьезомодуля d_{3_3} , а также стехиометрический состав плёнок AlN. Данные, по которым проводился регрессионный анализ, представлены в табл. 1.

Плёнка AlN	Р, Па	W, Bt	Ts, °C	Ar, sccm	N_2 , sccm	Ra, нм	Rq, нм	<i>d</i> ₃₂ , пм/В
<u>№</u> 15	0,07	700	390	4	10	18,51	23,29	0,343
<u>№</u> 16	0,10	700	390	4	5	19,38	29,68	0,439
№ 18	0,07	500	390	4	5	16,73	21,89	0,192
№ 19	0,07	500	390	4	10	21,28	27,04	0,490
<u>№</u> 24	0,10	700	390	4	10	18,84	26,91	0,922
<u>№</u> 25	0,10	600	390	4	10	17,44	23,44	0,342
<u>№</u> 26	0,10	500	390	4	10	51,86	65,40	0,516
№ 161	0,07	400	350	4	5	20,23	25,77	0,826
№ 188	0,10	650	390	4	10	14,69	20,36	0,932
№ 186	0,10	650	390	4	10	14,79	23,39	0,696
№ 191	0,10	650	390	4	10	18,98	26,46	0,608
№ 192	0,10	650	390	4	10	21,83	29,09	0,703
Nº 201	0,10	650	390	4	10	4,57	6,40	1,618
Nº 208	0,07	650	250	4	6	4,045	5,564	0,764
Nº 209	0,07	650	300	4	6	2,286	2,939	1,343
№ 211	0,07	650	350	4	6	3,301	4,291	1,353
№ 212	0,07	650	400	4	6	3,268	4,385	1,098
<u>№</u> 209	0,07	650	300	4	6	5,736	8,826	1,107
№ 211	0,07	650	350	4	6	10,45	13,98	1,003
№ 212	0,07	650	400	4	6	10,48	16,93	1,065
№ 213	0,07	650	390	4	6	3,244	4,098	0,530
№ 214	0,07	650	390	5	6	2,988	3,754	0,867
<u>№</u> 218	0,07	650	390	6	6	4,446	5,586	0,617
№ 219	0,07	650	390	7	6	2,26	2,97	1,320
<u>№</u> 213	0,07	650	390	4	6	13,547	18,517	0,480
<u>№</u> 214	0,07	650	390	5	6	14,740	22,600	0,531
№ 218	0,07	650	390	6	6	8,57	13,03	0,535
<u>№</u> 219	0,07	650	390	7	6	8,20	10,95	0,817
Nº 220	0,07	500	390	4	6	3,97	5,23	0,748
№ 221	0,07	550	390	4	6	2,88	3,63	1,957
№ 222	0,07	600	390	4	6	3,25	4,31	0,972
№ 21	0,07	650	390	4	6	3,244	4,098	0,530
Nº 223	0,07	700	390	4	6	3,33	4,39	0,710
Nº 220	0,07	500	390	4	6	21,44	28,39	0,641
Nº 221	0,07	550	390	4	6	15,21	21,18	0,770
№ 213	0,07	650	390	4	6	13,547	18,517	0,480

Таблица 1. Результаты измерения

Для выявления функции регрессии необходимо сначала определить вектор оценок коэффициента регрессии *s*. Согласно методу наименьших квадратов, вектор *s* получается из выражения: $s = (X^T X)^{-1} X^T Y$. К матрице с переменными X (давления в камере, температуры подложки, мощности, подаваемой на мишень, соотношения газовых потоков аргона и азота) добавляем единичный столбец:

	1	$0,\!07$	700	390	4	10	
	1	0,1	700	390	4	5	
	1	$0,\!07$	500	390	4	5	
	1	$0,\!07$	500	390	4	10	
	1	0,1	700	390	4	10	
	1	0,1	600	390	4	10	
	1	0,1	500	390	4	10	
	1	$0,\!0$	7400	350	4	5	
	1	0,1	650	390	4	10	
	1	0,1	650	390	4	10	
	1	0,1	650	390	4	10	
	1	0,1	650	390	4	10	
	1	0,1	650	390	4	10	
	1	$0,\!07$	650	250	4	6	
	1	$0,\!07$	650	300	4	6	
	1	$0,\!07$	650	350	4	6	
	1	$0,\!07$	650	400	4	6	
	1	$0,\!07$	650	300	4	6	
=	1	$0,\!07$	650	350	4	6	;
	1	$0,\!07$	650	400	4	6	
	1	$0,\!07$	650	90	4	6	
	1	$0,\!07$	650	390	5	6	
	1	$0,\!07$	650	390	6	6	
	1	$0,\!07$	650	390	7	6	
	1	$0,\!07$	650	390	4	6	
	1	$0,\!07$	650	390	5	6	
	1	$0,\!07$	650	390	6	6	
	1	$0,\!07$	650	390	7	6	
	1	$0,\!07$	500	390	4	6	
	1	$0,\!07$	550	390	4	6	
	1	$0,\!07$	600	390	4	6	
	1	$0,\!07$	650	390	4	6	
	1	$0,\!07$	700	390	4	6	
	1	$0,\!07$	500	390	4	6	
	1	$0,\!07$	550	390	4	6	
	1	$0,\!07$	650	390	4	6	
	1	0	0	0	0	0	

X

(1)

Находим транспонированную матрицу

$$X^{T} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & . & . & . & 1 & 1 & 1 \\ 0,07 & 0,1 & 0,07 & . & . & 0,07 & 0,07 & 0 \\ 700 & 700 & 500 & . & . & 550 & 650 & 0 \\ 390 & 390 & 390 & . & . & 390 & 390 & 0 \\ 4 & 4 & 4 & . & . & 4 & 4 & 0 \\ 10 & 5 & 5 & . & . & 6 & 6 & 0 \end{bmatrix}.$$
(2)

Получаем:

$$\left(X^{T}X\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 37 & 2,79 & 22300 & 13620 & 156 & 253 \\ 2,79 & 0,2223 & 1735,5 & 1058,7 & 12 & 20,26 \\ 22300 & 1733,5 & 1399000 & 8434000 & 97000 & 157200 \\ 13620 & 1058,7 & 843400 & 5188800 & 59160 & 96190 \\ 156 & 120 & 97000 & 59160 & 700 & 1084 \\ 253 & 20,26 & 157200 & 96190 & 1084 & 1903 \end{bmatrix};$$
(3)

$$X^{T}Y = \begin{bmatrix} 423,562\\35,12074\\253125,3\\162679,14\\1769,388\\3296,192 \end{bmatrix}.$$
 (4)

Вектор оценок коэффициентов регрессии равен:

$$Y(X) = (X^T X)^{-1} X^T Y = \begin{bmatrix} 1,6251\\ 308,7005\\ -0,05815\\ 0,03893\\ -0,07142\\ 1,1057 \end{bmatrix}.$$
 (5)

Проводим оценку дисперсии:

$$S_e^2 = (Y - Y(X))^T (Y - Y(X)) = 1649.515$$
(6)

и высчитываем множественный коэффициент корреляции:

$$R = \sqrt{1 - \frac{S_e^2}{\sum (y_i - \bar{y})^2}} = 0.7237.$$
 (7)

Находим коэффициент детерминации как квадрат множественного коэффициента корреляции:

$$R^2 = 0.7237^2 = 0.5238.$$

Уравнение регрессии принимает следующий вид:

 $R_a = 1,6251 + 308,7005P - 0,05815W + 0,03893T - 0,071424.9Ar + 1,1057N_2,$ (8)

где *P* – давление в камере, *T* – температура подложки, *W* – мощность, подаваемая на мишень, Ar/N_2 – соотношение газовых потоков.

Результаты многофакторного анализа представлены в табл. 2 и 3, корреляционная матрица зависимых переменных – в табл. 4. Эти данные играют ключевую роль в понимании взаимосвязи между различными факторами и их влияния на характеристики плёнок нитрида алюминия.

Таб	Таблица 2. Регрессионная статистика						
	Множественный <i>R</i>	0.7237					
	R^2	0,5238					
	Стандартная ошибка	7,295					

36

Наблюдения

Габлица	3.	Коэффициенты	регрессии
---------	----	--------------	-----------

R_a	1,6251
P	308,7005
W	-0,05815
Ts	0,03893
Ar	-0,071424.9
N_2	1,1057

Таблица 4. Данные по стехиометрическому составу тонких плёнок

Образец	<i>P</i> , Па	W, BT	<i>Ts</i> , °C	Ar, sccm	N_2 , sccm	Al:N	Al, at. %	N, at. %
AIN 233	0,07	90	0 350	4	5	1,11	51,78	46,6
AIN 250	0,1	900	350	4	5	1,06	51,04	48,13
AIN 240	0,07	400	350	4	10	1,0	50,36	46,89
AIN 253	0,07	900	350	4	10	1,05	49,84	47,31
AIN 232	0,07	400	350	4	5	1,08	49,42	45,82
AIN 239	0,07	700	350	4	10	1,09	48,57	44,63
AIN 242	0,1	700	350	4	10	1,04	48,24	46,21
AIN 243	0,1	400	350	4	10	1,02	48,65	47,78
AIN 246	0,1	700	350	4	5	1,11	49,81	44,79
AIN 248	0,1	400	350	4	5	1,08	50,28	46,36
AIN 249	0,1	900	350	4	10	1,04	49,84	47,7
AIN 252	0,07	700	350	4	5	1,06	48,99	46,37

Регрессионная модель выявила линейную связь между шероховатостью поверхности и технологическими режимами формирования плёнок нитрида алюминия. Коэффициент детерминации в этом случае равен 0,52, что говорит о заметной связи шероховатости с условиями формирования тонких плёнок нитрида алюминия, вместе с линейной функцией для установления зависимости рассматривались квадратичные и логарифмические функции. Анализ показал более слабую их зависимость по отношению к линейной функции, коэффициент детерминации в этих случаях был равен 0,47 и 0,48, поэтому в рассмотрении оставили линейную зависимость.

Была найдена зависимость коэффициента электромеханической связи d_{3_3} от среднеквадратичной шероховатости поверхности R_a . На рис. 1 представлены результаты измерений, которые демонстрируют взаимосвязь между этими двумя параметрами.



Рис. 1. Зависимость пьезомодуля d_{3_3} от среднеквадратичной шероховатости поверхности R_a

Как видно из рис. 1, точки имеют сильный разброс. В работе рассматривалась полиномиальная зависимость d_{3_3} от R_a , так как она имеет самый большой коэффициент детерминации, а именно 0,31, а уравнение регрессии имеет следующий вид:

$$d_{3_3} = 1,1728 - 0,0434R_a + 0,0006R_a^2.$$
⁽⁹⁾

Была определена степень влияния мощности, подаваемой на мишень при магнетронном формировании плёнок нитрида алюминия на их стехиометрию. Для этого были взяты плёнки, полученные при следующих условиях: температура подложки 350 °C, соотношение потоков аргона и азота $Ar/N_2 = 4/5$ и 4/10, давление в камере 0,1 и 0,07 Па, мощность 900, 700, 400 Вт (табл. 4).

Регрессионный анализ показал следующие зависимости: Для атомарного азота N коэффициент детерминации равен 0,15:

$$N = 0.44 + 0.18P + 1.1 \cdot 10^{-5}W + 8.33 \cdot 10^{-4}N_2.$$
⁽¹⁰⁾

Для атомов *Al* коэффициент детерминации равен 0,34:

$$Al = 0.50 - 0.05P + 1.5 \cdot 10^{-5}W - 1.93 \cdot 10^{-3}N_2.$$
(11)

Для соотношения Al: N коэффициент детерминации равен 0,47:

$$Al: N = 1.16 - 0.61P + 8. \cdot 10^{-6}W - 6 \cdot 10^{-3}N_2.$$
(12)

Так как давление и соотношение потоков аргона и азота имеют всего по два значения: давление -0,07 и 0,1 Па, соотношение потоков $Ar/N_2 - 4/5$ и 4/10, – то для этих параметров будет нецелесообразным применение регрессионного анализа и метода градиентного спуска.

На рис. 2 представлена зависимость элементного состава плёнок нитрида алюминия от мощности, подаваемой на мишень. Зависимости, полученные для давления P = 0,1 Па, соотношения потоков газов аргона и азота 4/10 имеют схожий характер.



Рис. 2. Элементный состав плёнок от мощности при P = 0,07 Па, аргона и азота 4/5

Оптимальным является режим, при котором стехиометрический состав плёнок нитрида алюминия будет равен Al : N = 1:1. Для полученных функций также были рассчитаны стехиометрические соотношения при заданных значениях давления и потока азота (см. табл. 5).

<i>P</i> , Па	r/N_2	W [Bt]	Al:N
0,07	4/5	900	1,0945
0,07	4/5	700	1,0929
0,07	4/5	400	1,0945
0,1	4/10	900	1,0462
0,1	4/10	700	1,0446
0,1	4/10	400	1,0422
0,1	4/5	900	1,0761
0,1	4/5	700	1,0746
0,1	4/5	400	1,0722
0,07	4/10	900	1,0645
0,07	4/10	700	1,0629
0,07	4/10	400	1,0605

Таблица 5. Данные по стехиометрическому составу тонких плёнок

f(x)	P	W	Т	Ar	N_2
3,00007	0,07	644	313	6	5
3,00011	0,07	698	362	4	6
3,00014	0,07	653	271	7	7
3,00025	0,07	660	334	4	5
3,00027	0,07	696	393	7	5
3,00029	0,07	683	343	6	6
3,00032	0,07	669	292	5	7
3,00036	0,07	692	302	7	8
3,00039	0,07	678	251	6	9
3,00044	0,07	645	315	6	5
3,00047	0,07	632	265	5	6
3,00048	0,07	700	364	4	6
3,00051	0,07	654	274	7	7
3,00057	0,07	695	272	4	9
3,00062	0,07	662	336	4	5
3,00064	0,07	698	396	7	5
3,00066	0,07	684	345	6	6

Таблица 6. Результаты измерения алгоритма

2. Применение метода градиентного спуска к функциям, полученным с помощью регрессионного анализа

В процессе анализа функции среднеквадратичной шероховатости от технологических режимов (см. (8)), проведённого с помощью регрессионного анализа и метода градиентного спуска [5], было выявлено, что она имеет несколько локальных минимумов. Для оптимизации процесса по поиску глобального минимума был взят алгоритм (Global Minima Searcher), который перебирал все возможные минимумы в следующих граничных условиях для мощности от 400 до 700 Вт, для температуры от 250 до 400 °C, для давления в камере 0,07 и 0,1 Па, для соотношения потоков газов от 4/5 до 7/10. Интервалы от мощности и от температуры в камере алгоритм разбивал на 10^6 частей для точного анализа. Для давления камеры и потоков аргона и азота алгоритм перебирал все возможные технологические режимы формирования тонких плёнок (см. табл. 1). После нахождения всех локальных минимумов алгоритм сравнивал их и находил глобальный минимум.

Результаты применения алгоритма представлены в табл. 6.

Алгоритм выдал следующие результаты: минимум шероховатости Ra наблюдается при следующих технологических режимах формирования плёнок AlN: P = 0.07 Па, W = 644 BT, T = 313 °C, Ar = 6 sccm, $N_2 = 5$ sccm.

3. Вывод

Был проведён регрессионный анализ с использованием метода градиентного спуска экспериментальных данных по среднеквадратичной шероховатости, элементному составу и значению пьезокоэффициента d_{3_3} плёнок нитрида алюминия, полученных методом магнетронного распыления.

В результате было выявлено, что среднеквадратичная шероховатость поверхности Ra плёнок нитрида алюминия заметно зависит от технологических режимов $(P, T, W, Ar/N_2)$ формирования плёнок, в этом случае коэффициент детерминации равен 0,52, определены технологические режимы, при которых шероховатость поверхности R_a приминает минимальное значение.

В работе показана связь между значением пьезокоэффициента d_{3_3} и среднеквадратичной шероховатостью поверхности R_a , она выражается полиномиальной функцией с коэффициентом детерминации 0,31.

Выявлена линейная зависимость стехиометрии плёнок нитрида алюминия от технологических режимов ($P, W, Ar/N_2$).

Полученные в результате проведения регрессионного анализа уравнения регрессии позволят теоретически рассчитать значения технологических режимов магнетронного распыления для получения плёнок нитрида алюминия с заданными свойствами.

4. Благодарности

Данная работа была выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-12-20010).

Литература

- Струнин В.И., Козлов А.Г., Давлеткильдеев Н.А., Чириков Н.А., Баранова Л.В., Куклев А.Ю., Байдаков А.Н. Определение пьезомодуля (d₃₃) тонких плёнок нитрида алюминия методом измерения прямого и обратного пьезоэффекта // Радиофизика, фотоника и исследование свойств вещества: тезисы докладов II Российской научной конференции. Омск: ОНИИП, 2022. С. 204-205.
- Тарала В.А., Алтахов А.С., Шевченко М.Ю., Валюхов Д.П., Лисицын С.В., Мартенс В.Я. Выращивание плёнок нитрида алюминия методом плазмоактивированного осаждения с раздельной подачей реагентов // Неорганические материалы. 2015. Т. 51, № 7. С. 795– 802.
- Григорьева Т.А., Шуманский Э.К. Многофакторный корреляционно-регрессионный анализ технологических параметров сушки целлюлозы // Труды Братского государственного университета. Серия: Естественные и инженерные науки. 2016. Т. 2. С. 134– 138.
- Еркович С.П. Применение регрессионного и корреляционного анализа для исследования зависимостей в физическом практикуме: метод. указания / Под ред. К.Б. Павлова. М.: Изд-во МГТУ, 1994. 13 с.
- 5. Гасников А.В. Современные численные методы оптимизации. Метод универсального градиентного спуска: учебное пособие. М.: МЦНМО, 2021. 272 с.

MULTIVARIATE REGRESSION ANALYSIS USING THE GRADIENT DESCENT METHOD IN THE ANALYSIS OF ALUMINUM NITRIDE FILMS FORMED BY MAGNETRON DISCHARGE

A.A. Potekhin^{1,2} Engineer, e-mail: potekhinaleksandr.0101@gmail.com V.I. Strunin^{1,2} Dr.Sc. (Phys.-Math.), Professor, e-mail: StruninVI@omsu.ru L.V. Baranova^{1,2} Ph.D. (Techn.), Associate Professor, e-mail: BaranovaLV@omsu.ru N.A. Chirikov² Junior Scientist Researcher, e-mail: nikita.chir@mail.ru

¹Dostoevsky Omsk State University, Omsk, Russia ²Institute of Radiophysics and Physical Electronics OSC SB RAS, Omsk, Russia

Abstract. Aluminum nitride films are used in the design of devices for selection and generation of signals in the microwave range on longitudinal acoustic waves. The quality of aluminum nitride thin films during magnetron formation is influenced by the following technological parameters: pressure in the vacuum chamber, substrate temperature, power supplied to the target, the ratio of argon and nitrogen gas flows. A large number of technological parameters have an ambiguous effect on the surface quality and properties of films. For A multivariate regression analysis was carried out to determine the optimal technological modes.

Keywords: Aluminum nitride films, regression analysis, gradient descent method, stoichiometric composition of films, piezomodule coefficient, roughness, coefficient of determination.

Дата поступления в редакцию: 12.11.2024