

文章编号: 1004-0609(2004)02-0291-07

2-氨基-5-巯基-1, 3, 4-噻二唑缓蚀剂 结构的密度泛函计算^①

宋晓岚¹, 邱冠周¹, 王海波¹, 吴雪兰¹, 曲选辉^{1, 2}

(1. 中南大学 资源加工与生物工程学院, 长沙 410083;

2. 北京科技大学 材料科学与工程学院, 北京 100083)

摘 要: 采用密度泛函量子化学计算方法, 获得了在 B3LYP/6-311+ + G(2d) (5D, 7F) 理论水平上 2-氨基-5-巯基-1, 3, 4-噻二唑(简称 AMT) 4 种互变异构体的平衡几何构型、能量和电荷分布, 证实了 4 种互变异构体的所有原子处于同一平面, 且有一种异构体最稳定。研究结果表明: AMT 4 种异构体中的环骨架具有芳香性, AMTc 与 Cu 形成的缓蚀膜层是 Cu(I) 与 AMTc 中的 7N 和 2S 原子分别形成共价键和配位键相互交错而成。计算了 AMT 4 种异构体的谐振频率和红外光谱强度。

关键词: CMP 抛光液; AMT; 缓蚀剂; 密度泛函计算; 从头计算

中图分类号: O 641.12⁺ 1; TN 305.2

文献标识码: A

Density function theory calculation on structure of 2-aminino-5-mercato-1, 3, 4-thiadizole inhibitor

SONG Xiao-lan¹, QIU Guan-zhou¹, WANG Hai-bo¹, WU Xue-lan¹, QU Xuan-hui²

(1. School of Mineral Processing and Bioengineering,

Central South University, Changsha 410083, China;

2. School of Materials Science and Engineering,

University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

Abstract: Density function theory (DFT) calculation at the level of B3LYP/6-311+ + G(2d) (5D, 7F) were done to predict the geometry structures, total energy and net charges of the four dynamic isomers of 2-aminino-5-mercato-1, 3, 4-thiadizole (AMT). The facts that the atoms in AMT are lying in a plane and one kind of AMT is the most stable one have been approved. The results also indicate that the cycle frameworks in the four dynamic isomers are aroma, and the corrosion mitigation film of AMTc and Cu is formed by the covalent bond of Cu(I) with 7N atom in AMTc and the coordinate bond of Cu with 2S atom in AMTc. The intensity of intrared light are calculated for the four dynamic isomer of AMT, and shown in the IR spectrum.

Key words: CMP slurry; AMT; Inhibitor; density function theory; ab initio

甚大规模集成电路 (ULSI) 多层布线中的金属正由传统的 Al 向 Cu 转化。Cu 的化学机械抛光 (CMP) 技术作为 ULSI 制备中的核心技术之一, 主要用于形成铜互连结构^[1-3], 世界各国都在进行研究。但因其涉及的学科多、技术难度大, 相关机理

还待进一步深入研究, 所以该技术还处于攻关阶段。

CMP 技术的核心之一是抛光液。抛光液中往往加入缓蚀剂, 如 BTA 或 AMT, 其作用是在 Cu 表面形成一层表面膜来阻止腐蚀的进行, 以提高抛

① 基金项目: 国家教育部高等学校骨干教师资助项目资助(2000 年 6 月)

收稿日期: 2003-03-20; 修订日期: 2003-10-15 作者简介: 宋晓岚(1964-), 女, 副教授, 博士研究生。

通讯作者: 宋晓岚, 副教授; 电话: 0731-8877203; E-mail: xlsong@hnu.net.cn

光选择性^[4~6]。因此,研究缓蚀剂的结构和性质的关系,进而研究表面膜形成的机理及其性质,对 CMP 抛光液的研究开发有积极意义。

2-氨基-5-巯基-1,3,4-噻二唑(2-aminino-5-mercapt-1,3,4-thiadizole 或 2-aminino-5-thio-1,3,4-thiadizole,简称 AMT)是一种新型的铜及铜合金的缓蚀剂。1988 年 Ganorkar 等^[7]首次报导了 AMT 能去除粉状锈,并在铜表面上形成抗腐蚀的保护膜。此后科学工作者对 AMT 的缓蚀性能进行了系统的研究。

AMT 存在 4 种互变异构体,即氨基-硫赶式(AMTa)、亚氨基-硫赶式(AMTb)、氨基-硫酮式(AMTc)和亚氨基-硫酮式(AMTd)^[8,9]。这 4 种异构体的分子结构如图 1 所示。

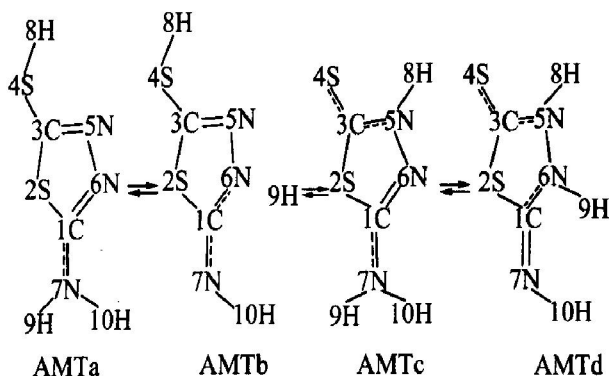


图 1 AMT 4 种互变异构体的分子结构

Fig. 1 Structures of four dynamic isomers of AMT

研究表明,该分子几乎是平面的,具有芳香性,且氨基-硫酮式(AMTc)占有很大的优势^[10~12]。

本文作者采用目前流行的密度泛函理论(DFT)^[13]中的 B3LYP 方法配合 6-311+ + G(2d)

(5D, 7F) 基组,优化出 AMT 气体分子的几何构型,计算了分子的能量及电荷分布。

1 计算方法

用 B3LYP 方法,取标准的 6-311G^{**} 基组,全空间优化计算 AMT 的气体分子几何构型,讨论其电子结构性质。几何构型的优化采用 Berny 能量梯度法,该方法是一种计算体系能量最低的最优化方法^[14]。

电荷采用 Mulliken 布居。Mulliken 布居表示电荷在各组成原子之间分布情况的方法^[15]。所有的计算均用 Gaussian98 软件^[16]在 SGI1450 工作站上完成。

2 计算结果和讨论

2.1 平衡几何构型

表 1~3 列出了 6-311G^{**} 水平下的全优几何参数。表 4 给出了对最高和最低轨道能贡献最大的电子轨道能量。

在计算精度内,4 种异构体分子中的环骨架原子二面角 $D(1, 2, 3, 5)$ 、 $D(2, 3, 5, 6)$ 、 $D(1, 3, 5, 6)$ 、 $D(1, 2, 5, 6)$ 和 $D(1, 2, 3, 6)$ 均为 0,表明 AMT 的环骨架原子位于同一平面上。根据其它二面角数据可知:AMT 4 种异构体的所有原子与环骨架原子位于同一平面上,即取平面构型,这与已有的实测晶体结构相符合^[8]。

环骨架形成的键角 $A(1, 2, 3)$ 、 $A(2, 3, 5)$ 、

表 1 优化所得 AMT 的键长 R

Table 1 Optimized bond length R of AMT(nm)

Isomer	$R(1, 2)$	$R(1, 6)$	$R(1, 7)$	$R(2, 3)$	$R(3, 4)$	$R(3, 5)$
AMTa	0.176 6	0.129 7	0.135 6	0.176 7	0.176 4	0.128 6
AMTb	0.179 9	0.138 0	0.126 6	0.176 8	0.176 2	0.128 1
AMTc	0.176 7	0.129 3	0.135 5	0.178 9	0.165 1	0.134 5
AMTd	0.179 6	0.137 7	0.126 5	0.177 9	0.164 9	0.134 2
Isomer	$R(4, 8)$	$R(5, 6)$	$R(5, 8)$	$R(6, 9)$	$R(7, 9)$	$R(4, 8)$
AMTa	0.135 4	0.137 5			0.100 3	0.135 4
AMTb	0.135 4	0.137 2		0.100 8		0.135 4
AMTc		0.137 4	0.101 0		0.100 3	
AMTd		0.139 2	0.101 0	0.100 7		

表 2 优化所得 AMT 的键角 A

Table 2 Optimized bond angle A of AMT(°)

Isomer	A (1, 2, 3)	A (1, 2, 6)	A (1, 2, 7)	A (1, 5, 6)	A (1, 6, 7)	A (1, 6, 9)	A (1, 7, 9)	A (1, 7, 10)
AMTa	85.4	114.0	122.2	113.0	123.8		122.7	118.6
AMTb	89.0	105.4	122.5	119.6	132.1	123.4		113.2
AMTc	89.4	114.7	122.1	109.3	123.2		122.0	119.3
AMTd	93.1	106.7	122.5	115.4	130.8	125.4		113.7

Isomer	A (2, 3, 4)	A (2, 3, 5)	A (3, 4, 5)	A (3, 4, 8)	A (3, 5, 6)	A (3, 5, 8)	A (5, 6, 9)
AMTa	120.3	114.0	125.7	93.2	113.6		
AMTb	119.9	115.7	124.4	93.9	110.3		117.0
AMTc	126.3	105.2	128.5		121.3	121.3	
AMTd	126.2	107.6	126.2		117.2	122.8	119.2

表 3 优化所得 AMT 的二面角 D

Table 3 Optimized dihedrals D of AMT(°)

Isomer	D (1, 2, 3, 4)	D (1, 2, 3, 5)	D (1, 2, 3, 6)	D (1, 2, 3, 7)	D (1, 2, 5, 6)	D (1, 2, 6, 9)	D (1, 2, 7, 9)	D (1, 2, 7, 10)	D (1, 5, 6, 7)	D (1, 6, 7, 9)
AMTa	180	0	0	180	0		0	- 180	180	180
AMTb	180	0	0	180	0	180		180	- 180	0
AMTc	180	0	0	180	0		0	180	180	180
AMTd	180	0	0	180	0	180			180	0

Isomer	D (1, 6, 7, 10)	D (2, 3, 4, 8)	D (2, 3, 5, 6)	D (2, 3, 5, 8)	D (2, 3, 7, 10)	D (3, 4, 5, 6)	D (3, 4, 5, 8)	D (3, 5, 6, 1)	D (3, 5, 6, 9)
AMTa	0	180	0			180	0	0	
AMTb	0	180	0			180	0	0	180
AMTc	0		0	180		180	0	0	
AMTd	0		0	180	180	180	0	0	180

$A(3, 5, 6)$ 、 $A(1, 5, 6)$ 和 $A(1, 2, 6)$ 在 $85.4^{\circ}\sim 121.3^{\circ}$ 间变化, 偏离 120.0° (正常 sp^2 杂化) 而接近正五边形的内角 108° 。五个环内角与 120.0° 最大的偏差达 34.6° (AMTa 中的 $A(1, 2, 3)$), 这表明 AMT 五元环存在一定的张力。

通常孤立的 N—N 单、双键的键长分别为 0.144 9 和 0.125 2 nm, C—N 单、双键的键长分别为 0.147 1 和 0.127 3 nm^[17]。由表 1 可见: AMT 4 种异构体中的 N—N 键长 ($R(5, 6)$) 在 0.137 2 (AMTb) 和 0.139 2 nm (AMTd) 间, 即 N—N 键长介于 N—N 单、双键之间; 在 AMT 4 种异构体中的 C—N 键 ($R(3, 5)$ 和 $R(1, 6)$) 长度在 0.128 1 (AMTb 的 $R(3, 5)$) 和 0.138 0 nm (AMTb 的 $R(1, 6)$) 间, 即 C—N 键长介于 C—N 单、双键之间。这表明 AMT 4 种异构体中的环骨架具有芳香性, 与实测结果一致^[11]。在非环骨架上, 1C 和 7N 原子间

的键长在 0.126 5 (AMTd) 和 0.135 6 nm (AMTa) 间, 也介于 C—N 单、双键之间, 因此, 7N 原子将与环骨架形成一个稳定结构, 有利于 9H 或 10H 的电离。

从表 2 可见: AMT 4 种异构体中的环骨架中 5 个原子均取 sp^2 杂化, 构成 5 原子 6 电子共轭体系。并且, 环骨架中的 5 个原子均取 p_x 和 p_y 与 s 轨道杂化, 即环骨架处于同一平面。

对于具有稳定结构的 AMTa 分子, 5 个原子的杂化程度不一样。2s 的 HOMO 和 LUMO 基本上是 12s 轨道, 呈球形对称; 1C 和 2C 则不一样, sp^2 杂化程度大, 尽管 5s 占相当大的比例, $5p_x$ 与 $5p_y$ 也占一定比例; 5N 和 6N 原子有明显的差异; 对于 HOMO 轨道, 5N 原子中 p_x 与 p_y 占的比例大; 而对于 LUMO 轨道, 6N 原子中 p_x 与 p_y 占的比例大, 这主要是由于 5N 原子上连接着 8H 原子所致。

表 4 对最高和最低轨道能贡献最大的电子轨道能量

Table 4 Most important atomic orbit energy contribute to HOMO and LUMO orbit(eV)

Atom	Atomic orbit	AMTa		AMTb		AMTc		AMTd	
		HOMO	LUMO	HOMO	LUMO	HOMO	LUMO	HOMO	LUMO
1C	5s	- 1.044	0.619	- 0.756	0	- 2.080	- 0.755	0	- 2.070
	5p _x	0.446	- 0.232	0.133	0	0.982	0.356	0	1.187
	5p _y	- 1.825	0.279	- 0.447	0	- 1.602	- 0.960	0	- 1.521
2S	12s	- 0.394	- 0.469	0.202	0	3.037	2.648	0	4.137
	12 p _x	- 0.196	- 0.130	0.073	0	0.494	0.005	0	0.513
	12 p _y	- 0.419	0.223	- 0.300	0	- 0.176	0.434	0	0.140
3C	5s	2.922	2.681	- 1.720	0	- 1.823	- 1.935	0	- 3.853
	5 p _x	0.099	- 0.313	0.272	0	0.527	1.618	0	1.867
	5 p _y	- 1.322	0.964	- 1.026	0	- 0.594	- 1.046	0	- 2.238
5N	5s	0.176	- 0.155	0.111	0	- 0.641	- 1.475	0	- 1.453
	5 p _x	0.169	0.048	0.076	0	- 0.882	- 0.084	0	- 0.516
	5 p _y	- 0.311	- 0.198	0.120	0	- 0.725	0.128	0	- 0.032
6N	5s	- 0.137	- 0.125	0.340	0	- 0.456	0.305	0	0.710
	5 p _x	- 0.097	- 0.010	- 0.037	0	0.064	0.157	0	0.575
	5 p _y	- 0.253	- 0.031	- 0.176	0	0.277	0.649	0	0.222

2.2 HOMO 和 LUMO 能量等参数

文献[18]报道了 Vosta 和 Eliasek 等利用 Huckel 分子轨道理论研究了 9 种苯胺类衍生物对铁在 5% 盐酸中的缓蚀作用。结果表明腐蚀速率与缓蚀剂分子的多种量化参数存在依赖关系。这些参数包括 HOMO 能量、LUMO 能量、自由价 F 和电荷密度等。缓蚀剂分子 HOMO 能量越高, 则其能级与金属最低空轨道的能级越接近, 二者之间作用能亦越大。用 DFT/B3LYP 方法计算了 AMT 4 种异构极矩(μ)、总能量(E)、HOMO 能量(E_{HOMO})和 LUMO 能量(E_{LUMO}), 结果见表 5。

表 5 DFT/B3LYP 优化所得 AMT 参数

Table 5 Optimized parameters of AMT molecular by using DFT/B3LYP

Isomer	μ/LDebye	$E/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$E_{\text{HOMO}}/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$	$E_{\text{LUMO}}/(\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1})$
AMTa	3.417 7	- 2 727 170.1	- 11.263 2	4.069 5
AMTb	3.129 7	- 2 727 144.1	- 6.511 1	25.283 2
AMTc	5.539 3	- 2 727 222.8	- 3.938 2	36.808 9
AMTd	5.879 4	- 2 727 117.8	- 15.621 5	31.925 6

由表 5 可见, AMT 4 种异构体的总能量有明显的差异, AMTc 的总能量分别比 AMTa、AMTb 和 AMTd 低 52.7、78.7 和 105.0 kJ/mol。因此, AMT 4 种异构体的稳定程度顺序为: AMTc > AMTa > AMTb > AMTd, 其中 AMTc 最稳定, 占很大优势, 与文献

[11, 12, 19] 的报道一致。从 AMTc 的 HOMO 能量也可以看出 AMTc 缓蚀效果最佳。

2.3 电荷分布

表 6 列出了 AMT 4 种异构体原子上的净电荷。由表 6 可见, 在 AMT 4 种异构体中的 AMTb、AMTc 和 AMTd 上 2S 原子的净电荷几乎为零, 作为吸附中心与 Cu 吸附的可能性不大。而 4 种异构体的 7N 原子的净电荷都大, 一般而言, 原子上负电荷越多、亲核性越强, 其与金属成键形成配合物的能力亦越强, 因此, AMTa 和 AMTc 的 7N-9H 和 7N-10H 以及 AMTb 和 AMTd 的 7N-10H 键将有可能与 Cu 形成新键。由表 4 还可知, AMTc 分子中 4S 原子的净电荷大, 同时 AMTc 中 7N-2S 和 2S-4S 间的距离分别为 0.290 1, 0.307 0 nm, Cu(100) 面上 Cu 原子间的距离为 0.361 5 nm, 有理由认为 AMTc 有两个位置将与 Cu 成键, 即 7N 和 2S 原子。所以, AMTc 与 Cu 形成的缓蚀膜层是 Cu(I) 与 AMT 的 7N 和 2S 原子分别形成共价键和配位键相互交错沉积而成。其中, 共价键已被红外实验所证实^[20], 配位键被 XPS 证实^[21]。

2.4 分子红外光谱

表 7 列出了计算的 AMT 4 种异构体的谐振频率和红外光谱强度, 其红外图谱分别示于图 2、3、4、5。

表 6 AMT 原子净电荷

Table 6 Atom net charges of AMT

Atom	Net charge of atom/eV				Atom	Net charge of atom/eV			
	AMTa	AMTb	AMTc	AMTd		AMTa	AMTb	AMTc	AMTd
1C	0.317 2	0.178 8	0.276 4	0.132 9	6N	- 0.300 6	- 0.335 5	- 0.306 2	- 0.368 7
2S	- 0.179 2	- 0.088 6	- 0.024 9	0.047 1	7N	- 0.662 9	- 0.528 4	- 0.668 4	- 0.493 6
3C	0.645 3	0.629 6	0.473 6	0.520 7	8H	0.238 8	0.230 7	0.430 2	0.414 5
4S	- 0.675 6	- 0.618 4	- 0.765 9	- 0.749 9	9H	0.390 2	0.412 7	0.394 3	0.398 2
5N	- 0.175 2	- 0.206 1	- 0.206 8	- 0.226 1	10H	0.402 0	0.325 2	0.397 7	0.325 0

表 7 AMT 的谐振频率和红外光谱强度

Table 7 Harmonic frequency(ν) and IR intensity(I) of AMT

AMTa		AMTb		AMTc		AMTd	
ν/cm^{-1}	I	ν/cm^{-1}	I	ν/cm^{-1}	I	ν/cm^{-1}	I
131	2.3	139	16.6	113	0.7		
175	15.5	186	17.6	234	0.2	153	61.5
215	7.4	220	0.6	279	9.8	241	2.5
293	17.3	336	25.5	363	4.1	283	14.3
367	0.1	392	3.9	378	3.4	402	9.9
374	3.1	419	9.8	436	4.3	432	3.4
412	3.0	551	1.0	518	73.6	521	2.5
570	0.0	585	20.7	547	6.7	566	15.6
583	3.5	592	2.7	601	27.4	608	49.5
614	0.5	643	87.7	601	5.9	649	45.3
639	9.2	706	85.3	654	4.9	719	74.7
750	23.6	729	6.7	748	62.0	728	3.5
907	27.1	902	40.4	1 012	22.9	1 004	37.9
1 016	15.4	1 037	43.3	1 057	147.2	1 068	166.1
1 064	74.5	1 074	62.1	1 190	22.4	1 126	206.7
1 147	10.2	1 129	96.6	1 274	96.0	1 220	127.7
1 321	80.5	1 261	113.7	1 350	296.2	1 346	30.2
1 475	66.7	1 413	3.7	1 482	172.0	1 416	50.2
1 552	200.2	1 586	31.2	1 607	52.8	1 520	202.6
1 646	259.1	1 682	595.6	1 658	315.3	1 698	498.3
2 605	2.8	2 605	1.7	593	100.0	3 468	5.6
3 598	108.3	3 473	9.3	3 609	78.5	3 603	58.3
3 734	64.3	3 627	60.3	3 728	68.3	3 631	87.2

根据文献[21]报道的关于 AMT 的红外光谱测试结果, 在 3 121, 1 607, 1 553, 1 474, 1 059, 1 031, 752 cm^{-1} 等处有较强的吸收峰, 如表 7 和图 2 ~ 5 所示, 实验中的计算值分别为: 3 468~ 3 598,

1 646~ 1 698, 1 520~ 1 607, 1 413~ 1 475, 1 057 ~ 1 068, 1 004~ 1 016, 728~ 750 cm^{-1} , 计算值与实验值吻合得较好。

这些结果为以后的热力学分析奠定了基础。

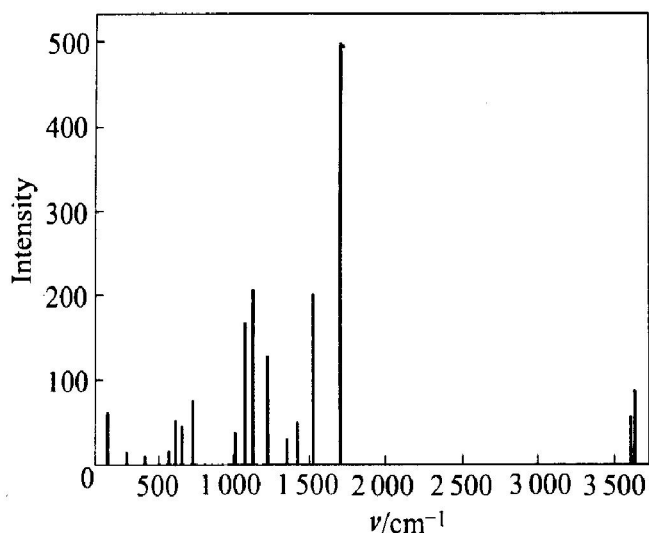


图 2 AMTa 红外光谱计算图谱

Fig. 2 AMTa IR spectrum by calculation

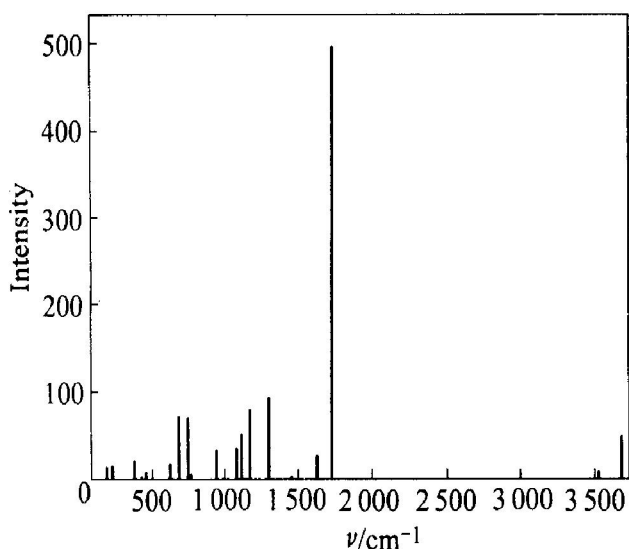


图 3 AMTb 红外光谱计算图谱

Fig. 3 AMTb IR spectrum by calculation

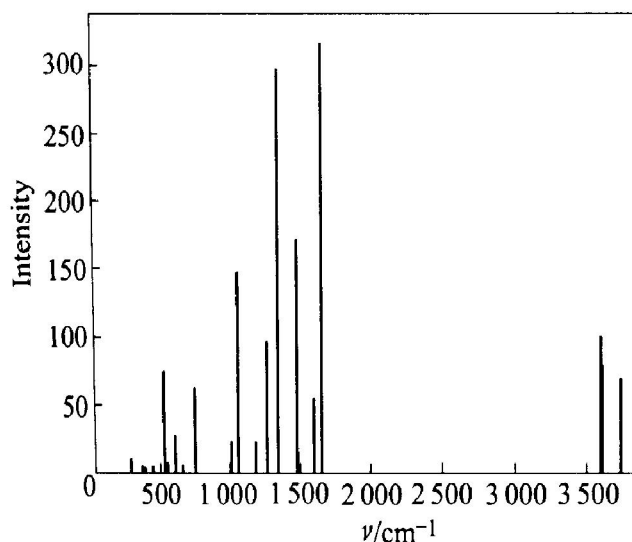


图 4 AMTc 红外光谱计算图谱

Fig. 4 AMTc IR spectrum by calculation

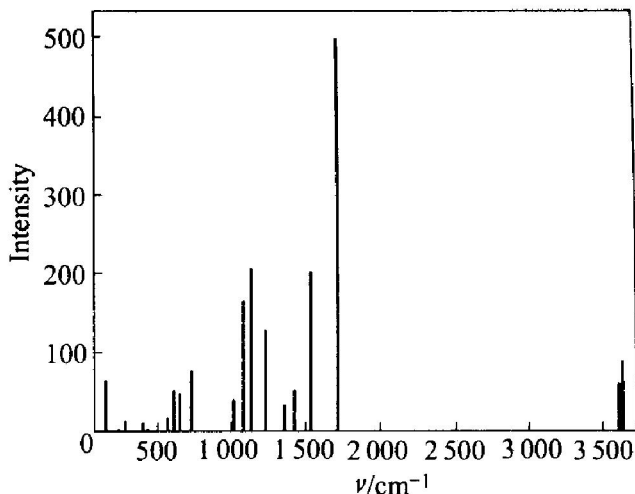


图 5 AMTd 红外光谱计算图谱

Fig. 5 AMTd IR spectrum by calculation

4 结论

1) 根据二面角数据可知 AMT 4 种异构体的所有原子与环骨架原子位于同一平面上, 即取平面构型; 且 4 种异构体中的环骨架具有芳香性, 其中有一种异构体最稳定。

2) AMTc 与 Cu 形成的缓蚀膜层是 Cu(I) 与 AMT 的 7N 和 2S 原子分别形成共价键和配位键相互交错沉积而成。

REFERENCES

- [1] Zeidler D, Stavreva Z, Plötner M, et al. Characterization of Cu chemical mechanical polishing by electrochemical investigations[J]. Microelectronic Engineering, 1997, 33(3): 259 - 265.
- [2] Timothy W E, Lee L, Rudy W. Copper: emerging material for wire bond assembly[J]. Solid State Technology, 2000, 43(4): 71 - 77.
- [3] Tadahiro O. Advanced copper metallization technology for ULSI interconnects[J]. Solid State Technology, 1992, 35(4): 47 - 52.
- [4] Wang M T, Tsai M S, Liu C, et al. Effects of corrosion environments on the surface finishing of copper chemical mechanical polishing[J]. Thin Solid Films, 1997, 308 - 309: 518 - 522.
- [5] Roonald C, Janos F, Rahul J. Initial study on copper CMP slurry chemistries[J]. Thin Solid Films, 1995, 266: 238 - 244.
- [6] Jan N M, Shyam G R, Murarka P. The addition of surfactant to slurry for polymer CMP: effects on polymer surface, removal rate and underlying Cu[J]. Thin

- Solid Films, 1997, 290 - 291: 447 - 452.
- [7] Ganorkar M C, Pandit R V, Gayathri P. Studies in Conservation, 1988, 33(2): 97 - 103.
- [8] Belaj F. Crystal structure of 5-aminor-3-H-1, 3, 4-thiadiazole-2-thione, $C_2H_3N_3S_2$ [J]. Z Kristallogr, 1994, 209(4): 375 - 378.
- [9] Gajendragad M R, Agarwala U. Complexing behavior of 5-aminor-2-thio-1, 3, 4-thiadiazole (part III): Complexes of Cu(I), Zn(II), Ag(I), Cd(II), Tl(I), Pb(II), Pd(0)[J]. Indian J Chem, 1975, 13(12): 1331 - 1339.
- [10] Downie T C, Harrison W. Crystal and molecular structure of 5-amininor-2-mercaptor-1, 3, 4- thiadiazole[J]. Acta Crystallogr Sec B, 1972, 28(5): 1584.
- [11] Downie T C, Harrison W. Crystal and molecular structure of 5-amininor-2-mercaptor-1, 3, 4- thiadiazole[J]. Acta Crystallogr Sec B, 1972, 28(5): 1584.
- [12] Edwards H G M, Jahanson A F, Lawson E E. Structural determination of substituted mercaptothiadiazole using FT-Ramn and FT-IR spectroscopy [J]. Mol Struct, 1995, 351: 51 - 56.
- [13] Seminario J M, Politzer P. Modern Density Functional Thery: A Tool for Chemistry[M]. New York: Elseiv-er, 1995. 35 - 48.
- [14] Schlegel H B. Comparison of geometry optimization with mixed cartesian and internal coordinates[J]. Int J Quant Chem: Quant Chem Symp, 1992, 26(3): 236 - 243.
- [15] 杨 频. 分子中的电荷分布和物性规律[M]. 太原: 山西大学出版社, 1992. 58 - 72.
YANG Pin. Charge Distribution in Molecules and Regularity of Matter Properties[M]. Taiyuan: Shanxi Uni-
- versity Press, 1992. 58 - 72.
- [16] Frisch M J, Truck G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 98[M]. Pittsburgh: Gaussian Inc, 1998. 10 - 32.
- [17] Harmony M D, Laurie V W, Kuczkowski R L. Molecular structures of gas-phase polyatomic molecules determined by spectroscopic methods[J]. J Phys Chem Ref Data, 1979, 8(3): 619 - 625.
- [18] 唐子龙, 宋诗哲. 有机缓蚀剂的量子化学研究[J]. 中国腐蚀与防护学报, 1995, 15(3): 229 - 236.
TANG Zi-tong, SONG Shi-zhe. Some aspects of quantum chemical study on organic inhibitors[J]. Journal of Chinese Society for Corrosion and Protection, 1995, 15(3): 229 - 236.
- [19] 傅海涛, 李 瑛, 魏无际, 等. AMT 在青铜-柠檬酸体系中的缓蚀行为及其机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(7): 604 - 608.
FU Hai-tao, LI Ying, WEI Wu-ji, et al. The inhibition of AMT on Bronze corrosion in 5% citric acid[J]. Acta Physico-Chimica Sinica, 2001, 17(7): 604 - 608.
- [20] 万小山, 朱一帆, 施兵兵, 等. AMT 在青铜/柠檬酸体系中的缓蚀作用的研究[J]. 材料保护, 2000, 33(6): 37 - 39.
WAN Xiao-shan, ZHU Yi-fan, SHI Bing-bing, et al. Corrosion inhibition of ATM in copper-5% cirtric acid system[J]. Materials Protection, 2000, 33(6): 37 - 39.
- [21] Nishi A, Sado M, Miki T. Evaluation of Cu-CMP process by TOF-SIMS and XPS: time dependence of Cu surface adsorbents and oxidation states[J]. Applied Surface Science, 2003, 203 - 204: 407 - 472.

(编辑 龙怀中)