

# МАССОПЕРЕНОС АКТИВНЫХ ЧАСТИЦ В ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОМ РЕАКТОРЕ ТРАВЛЕНИЯ \*

Ю.Н. ГРИГОРЬЕВ, А.Г. ГОРОБЧУК

*Институт вычислительных технологий СО РАН*

e-mail: al@ict.nsc.ru

В рамках гидродинамического приближения исследуется влияние двумерной структуры ВЧ-разряда на производство и массообмен активных частиц в плазмохимическом реакторе травления. Показано, что однородность травления образцов существенно зависит от изменения электронной плотности в радиальном направлении.

## Введение

Плазмохимические реакторы травления являются важнейшим технологическим устройством в производстве микросхем. Травление поверхности обрабатываемого материала производится химически активными частицами, генерируемыми в низкотемпературной плазме высокочастотного разряда. Скорости объемных процессов ионизации, генерации и рекомбинации частиц, участвующих в обработке полупроводниковых материалов, определяются внутренними характеристиками ВЧ-разряда – концентрациями и функциями распределения электронов и ионов по энергиям, а также сечениями соответствующих реакций. Изменение концентраций электронов и ионов в разряде может существенно повлиять на скорость и однородность травления образцов. Поэтому в расчетах плазмохимических реакторов, особенно оптимизационных, необходимо учитывать пространственное распределение плотности первичных электронов разрядной плазмы, а также ионного тока. В этой связи приобретают особую значимость численные расчеты ВЧ-разряда в двумерной постановке. С вычислительной точки зрения исследование физики ВЧ-разряда является сложной и трудоемкой задачей, особенно при использовании кинетического подхода. В зависимости от давления и состава газа основными механизмами потери электронов являются диффузия, рекомбинация или реакции присоединения. Поэтому часто предполагается, что ВЧ-разряд соответствует диффузионо-дрейфовому режиму разряда, который рассчитывается в гидродинамическом приближении для реакторов с плоскопараллельной конфигурацией электродов [1]-[3]. К преимуществам гидродинамического подхода, который однако обладает более узкой областью применения по сравнению с кинетическим подходом, можно отнести возможность использования традиционных численных схем, позволяющих достигать сравнительно небольшого времени расчета до выхода ВЧ-разряда на периодический режим, особенно при учете большого количества процессов взаимодействия частиц.

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект №11-01-00064-а) и президентской программы поддержки ведущих научных школ РФ (проект №НШ-6068.2010.9).

## Физико-математическая модель

Математическое моделирование структуры ВЧ-разряда является сложной многопараметрической задачей. В работе рассчитывается аксиально-симметричный ВЧ-разряд в трехмоментном приближении для рабочих давлениях 0.1-1.0 торр [1]-[3]. Для нахождения внутренних характеристик плазмы решались уравнения непрерывности для электронов и положительных ионов. Введем безразмерные переменные:

$$\xi = \frac{r}{R}, \quad \zeta = \frac{z}{L}, \quad \rho_l = \frac{n_l}{\bar{n}_{e0}}, \quad \tilde{\mu}_l = \frac{\mu_l}{\mu_{l0}}, \quad \tilde{D}_l = \frac{D_l}{D_{l0}},$$

$$\vartheta_e = \frac{T_e}{T_{e0}}, \quad \tilde{\varphi} = \frac{\varphi}{\varphi_{RF}}, \quad \tau = ft, \quad A = \frac{L}{R}, \quad l = e, p;$$

тогда уравнения непрерывности принимают вид:

$$\beta_l T \frac{\partial \rho_l}{\partial \tau} + A^2 \left( \frac{\partial J_l^\xi}{\partial \xi} + \frac{J_l^\xi}{\xi} \right) + \frac{\partial J_l^\zeta}{\partial \zeta} = \beta_l S_l, \quad (1)$$

где потоки электронов и ионов определяются формулами:

$$J_l^\xi = -s_l \text{Pe}_l \tilde{\mu}_l \rho_l \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} - \frac{\partial \tilde{D}_l \rho_l}{\partial \xi}, \quad J_l^\zeta = -s_l \text{Pe}_l \tilde{\mu}_l \rho_l \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \zeta} - \frac{\partial \tilde{D}_l \rho_l}{\partial \zeta}, \quad s_l = \begin{cases} -1, & l = e \\ 1, & l = p \end{cases}.$$

Индекс  $l$  обозначает электроны и положительные ионы, верхние (надстрочные) индексы  $\xi$  и  $\zeta$  относятся к направлениям радиальной или аксиальной координат. Числа Пекле и Дамкелера вычислялись как:

$$\text{Pe}_l = \frac{\mu_{l0} \varphi_{RF}}{D_{l0}}, \quad \text{Da} = \frac{L^2}{D_{e0}} N k_{i0} \exp(-E_i/kT_{e0}).$$

Параметр  $\beta_l T$  имеет значение безразмерного времени:

$$\beta_l T = \beta_l \frac{f L^2}{D_{e0}}.$$

Источниковый член определялся по формуле:

$$S_l = \begin{cases} \rho_e (\text{Da} R - R_a), & l = e \\ \rho_e \text{Da} R, & l = p \end{cases}, \quad R = \exp[(1 - 1/\vartheta_e) E_i/kT_{e0}], \quad R_a = \frac{\nu_a L^2}{D_{e0}}.$$

Здесь  $n_e, n_p$  - плотности электронов и ионов, соответственно;  $\mu_e, \mu_p, D_e, D_p$  - подвижности и коэффициенты диффузии электронов и положительных ионов, соответственно;  $\varphi$  - потенциал;  $\varphi_{RF}$  - ВЧ напряжение на электродах;  $T_e$  - электронная температура;  $f$  - частота активации;  $t$  - время;  $N$  - объемная плотность газа;  $k_{i0}$  - коэффициент скорости ионизации (предэкспоненциальный множитель);  $E_i$  - энергия активации процесса ионизации;  $\nu_a$  - частота прилипания;  $k$  - постоянная Больцмана.  $\beta$  выбиралось равным 1 для электронов и  $D_e/D_p$  для положительных ионов;  $s_l$  полагалось равным  $-1$  для электронов и  $1$  для положительных ионов.  $\text{Pe}_l$  обозначает число Пекле для частиц сорта  $l$ , и отражает соотношение между процессами переноса и диффузии. Другие обозначения:  $\bar{n}_{e0}$  - средняя плотность электронов;  $\mu_{l0}, D_{l0}$  - характерные величины подвижностей и коэффициентов

диффузии электронов и положительных ионов в ВЧ-разряде;  $T_{e0}$  - характерная электронная температура. Источниковый член  $S_l$  включал число Дамкелера  $Da$ , пропорциональное отношению интенсивности ионизации к диффузии. Характерные размеры расчетной области:  $R$  - радиус цилиндра,  $L$  - межэлектродное расстояние.

Электронная температура находилась из уравнения баланса энергии электронов, в котором учитывается процесс электронной теплопроводности:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{5}T \frac{\partial}{\partial \tau} (\rho_e \vartheta_e) + A^2 \left( \frac{\partial J_e^\xi \vartheta_e}{\partial \xi} + \frac{J_e^\xi \vartheta_e}{\xi} \right) + \frac{\partial J_e^\zeta \vartheta_e}{\partial \zeta} \\ & - \frac{K_{e0} T_{e0}}{D_{e0} \bar{n}_{e0} h_{e0}} \left( \rho_e \vartheta_e \Delta \vartheta_e + A^2 \frac{\partial \vartheta_e}{\partial \xi} \frac{\partial \rho_e \vartheta_e}{\partial \xi} + \frac{\partial \vartheta_e}{\partial \zeta} \frac{\partial \rho_e \vartheta_e}{\partial \zeta} \right) \\ & - \chi \left( A^2 J_e^\xi \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} + J_e^\zeta \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \zeta} \right) + \Theta \rho_e Da R = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

$$\Theta = \frac{H_i}{h_{e0}}, \quad \chi = \frac{e\varphi_{RF}}{h_{e0}}, \quad h_{e0} = \frac{5}{2}kT_{e0},$$

где  $H_i$  - потери энергии при ионизации столкновением,  $K_{e0}$  - электронная теплопроводность при  $n_e = \bar{n}_{e0}$  и  $T_e = T_{e0}$ ,  $e$  - элементарный заряд,  $h_{e0}$  - тепловая энергия электронов. Приведенный безразмерный параметр  $\Theta$  отвечает за потери энергии при ионизации столкновением. Параметр  $\chi$  характеризует соотношение между ВЧ потенциалом и тепловой электронной энергией.

Распределение электрического потенциала рассчитывалось из уравнения Пуассона:

$$A^2 \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \zeta^2} = \Gamma (\rho_e - \rho_p). \quad (3)$$

Безразмерный параметр  $\Gamma$  характеризует напряженность электрического поля и выражается через электронную дебаевскую длину  $\lambda_D$ :

$$\Gamma = \frac{L^2 e \bar{n}_{e0}}{\epsilon \varphi_{RF}} = \frac{2}{5\chi} \cdot \left( \frac{L}{\lambda_D} \right)^2, \quad \lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon k T_{e0}}{e^2 \bar{n}_{e0}}},$$

где  $\epsilon$  - диэлектрическая постоянная в вакууме.

На границах расчетной области ставились краевые условия. На поверхности анода и катода электронный поток полагался равным потоку вторичной электронной эмиссии с учетом процесса рекомбинации электронов на проводящих поверхностях. Краевые условия для положительных ионов записывались как потоки к электродам, возникающие из-за дрейфа ионов. Это позволяет избежать численных трудностей связанных с моделированием очень тонкого диффузионного слоя ионов, появляющегося на границах. Потенциалы на электродах предполагались заданными. Электронная температура на аноде и катоде, а также боковой стенке реактора полагалась постоянной. На оси симметрии задавались условия симметрии. На боковой стенке реактора (выходной кромке) для потенциала использовались мягкие краевые условия.

Решение уравнений (1)-(3) является трудной вычислительной задачей из-за высокой нелинейности и сильной взаимосвязи уравнений. Уравнения (1), (2) аппроксимировались неявной экспоненциальной разностной схемой, предложенной Шарфеттером и Гуммелем [4], [5]. Предполагается, что потоки частиц, скорости дрейфа и коэффициенты диффузии постоянны между узлами разностной сетки. За счет выбора специальной аппроксимации

потоков схема обеспечивает численно стабильные оценки потоков частиц при больших и малых напряжениях между соседними узлами сетки. Выражение для плотности потока, полученное Шарфеттером и Гуммелем для уравнений непрерывности, обобщается для уравнения электронной энергии [5]. Такая схема, хотя и не является достаточно точной при решении двумерных задач, гарантирует получение решения при больших числах Пекле, сохраняя положительные значения электронной температуры и концентраций плазменных компонент. Данная численная схема успешно использовалась при моделировании одномерного и двумерного ВЧ-разряда. Для решения уравнения Пуассона (3) использовалась конечно-разностная схема типа крест, где для построения разностных операторов во внутренних узлах сетки использовались формулы второго порядка аппроксимации производных по пространственным переменным. Численная дискретизация уравнений (1)-(3) приводит к пяти-диагональным системам линейных уравнений, которые решались стандартными прямыми методами.

Двумерная математическая модель неизотермического реактора, описывающая течение газовой смеси, процессы теплопереноса и особенности плазменной кинетики в ВЧ-разряде использовалась для моделирования реактора радиальной схемы [6]. Течение газовой смеси описывалось уравнениями многокомпонентной гидродинамики. Распределения концентраций частиц находились из системы уравнений конвективно-диффузионного переноса. Расчеты ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении позволили учесть особенности электронно-молекулярных взаимодействий в рабочей смеси. Исследовался процесс плазмохимического травления кремния в плазме  $CF_4/O_2$ . Плазмохимическая кинетика включала 16 газофазных реакций диссоциации и рекомбинации и 8 гетерогенных реакций на подложке, в которых принимают участие 12 реагентов -  $F$ ,  $F_2$ ,  $CF_2$ ,  $CF_3$ ,  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $O$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $COF$ ,  $COF_2$ . Основными кинетическими процессами принимались – диссоциация компонент исходной газовой смеси электронным ударом с образованием активной компоненты (атомов фтора) и рекомбинация атомов и радикалов с участием третьего тела. На поверхности образца рассматривались процессы адсорбции радикалов  $CF_2$ ,  $CF_3$  и хемосорбции кислорода. Настоящие реакции описывают наиболее вероятные каналы химических реакций в плазме ВЧ-разряда. Основные уравнения решались численно с использованием итерационной конечно-разностной схемы со стабилизирующей поправкой.

## Результаты и их обсуждение

В расчетах ВЧ-разряда брались следующие значения параметров: давление  $p = 0.5$  торр, плотность газа  $N = 3 \cdot 10^{16}$  см<sup>-3</sup>, частота активации  $f = 13.56$  МГц, средняя плотность электронов  $\bar{n}_{e0} = 6 \cdot 10^9$  см<sup>-3</sup>, ВЧ напряжение  $\varphi_{RF} = 110$  В, межэлектродное расстояние  $L = 3,5$  см, радиус электродов  $R = 30$  см. Электронная температура на электродах и боковой поверхности реакционной камеры (выходной кромке) полагалась равной  $T_{es} = 0.5$  эВ. В качестве среднего значения электронной температуры бралось  $T_{e0} = 6$  эВ. Другие размерные величины выбирались на основе [1]-[3] для исследуемого режима ВЧ-разряда и соответствующих рабочих газов, близких к исследуемому. Коэффициент электронной теплопроводности полагался равным  $K_e = 3/2kD_e n_e$  [2].

Рабочие режимы изменялись в следующих пределах: расход газа  $Q = 200-800$  см<sup>3</sup>/мин; температура электродов  $T_s = 300$  К; добавка  $O_2$  в смеси  $CF_4/O_2$  - 10-90% [6]. Использовалось базовое значение параметра  $\alpha_s = 0.311$ , показывающее интенсивность хемосорбции кислорода на кремний.

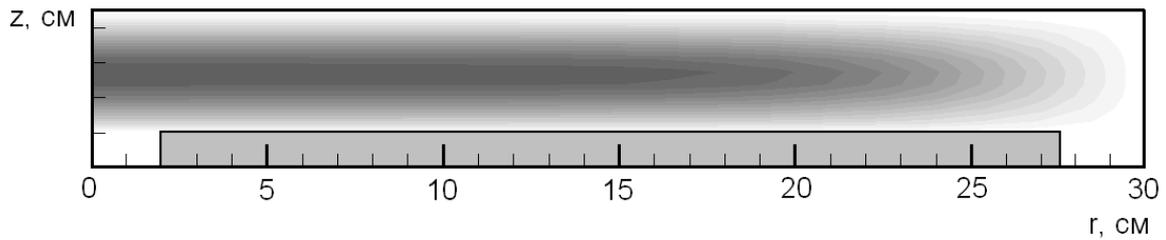


Рис. 1. Распределение электронной плотности в радиальном плазмохимическом реакторе.

На рис. 1 представлено распределение электронной плотности в плазме ВЧ-разряда. Электронная плотность максимальна в центре реактора и монотонно спадает до нуля с приближением к границам плазменной области. Различие безразмерных времен для электронов и положительных ионов  $\beta_i T$  составляет  $10^4$ , что приводит к тому, что электроны двигаются значительно быстрее ионов и откликаются на более высокие частоты электрического поля. Сравнение расчетной электронной плотности в различные моменты периода показали, что изменение концентрации электронов в объеме реактора мало, и становится заметным только в близи электродов. Распределение ионной плотности практически повторяет структуру электронной плотности и не реагируют высокочастотное поле.

Среднее значение электронной температуры в ВЧ-разряде близко к 5-6 эВ. Исключение составляют приэлектродные слои, где электронная температура достаточно резко меняется. Сравнение электронной температуры в различные моменты времени по периоду показали, что электронная температура изменяется под действием высокочастотного поля в основном в приэлектродных слоях и практически постоянна в плазменном объеме ВЧ-разряда. Влияние электронной теплопроводности на распределение концентрации электронов мало и может не учитываться в дальнейших расчетах.

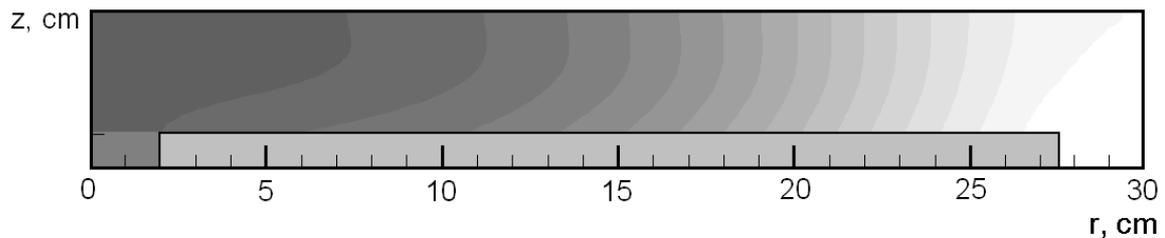


Рис. 2. Распределение концентрации фтора. Параметры режима:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К, 30% доли  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ . Направление течения - к центру реактора.

На рисунке 2 показано характерное распределение концентрации фтора, которая монотонно возрастает в направлении движения смеси. Максимум концентрации фтора достигается в центре реактора, где степень диссоциации молекул исходной газовой смеси максимальна, и дополнительно увеличивается за счет конвективного переноса. Это объясняется распределением электронной плотности, которое монотонно падает к границам плазменной области.

Скорость спонтанного травления монотонно понижается вдоль радиуса образца. Максимальное значение скорости травления совпадает с максимумом электронной плотно-

сти. Профиль скорости травления становится существенно неоднородным. С увеличением добавки кислорода  $O_2$  скорость травления значительно возрастает вблизи внутренней кромки образца. Различие между зависимостями средних скоростей травления от добавки кислорода  $O_2$  при однородном и неоднородном распределениях электронной плотности не превышает 5%. Положение максимума средней скорости травления сохраняется и определяется только интенсивностью хемосорбции кислорода на кремнии (параметр  $\alpha_s$ ) [6]. Сравнение скоростей травления при однородном и неоднородном распределениях электронной плотности позволяет сделать следующий вывод. Относительно однородное распределение электронной плотности обеспечивает лучшую однородность травления образцов.

На основе двумерной гидродинамической модели ВЧ-разряда рассчитана электронная концентрация в плазмохимическом реакторе травления радиальной схемы. Исследовано влияние структуры ВЧ-разряда на скорость и однородность травления кремния в  $CF_4/O_2$ . Показано, что однородность травления образцов существенно зависит от изменения электронной плотности в радиальном направлении, которым часто пренебрегают, рассчитывая разряд в одномерной постановке.

## Список литературы

- [1] GRAVES D.B., JENSEN K.F. A continuum model of DC and RF discharges // IEEE Transactions on plasma science. 1986. Vol. PS-14. P. 78–91.
- [2] LYMBEROPOULOS D.P., ECONOMOU D.J. Fluid simulation of glow discharges: effect of metastable atoms in argon // Journal of applied physics. 1993. Vol. 73, P. 3668–3679.
- [3] ШВЕЙГЕРТ В.А. Высокочастотный разряд низкого давления в электроотрицательных газах. Новосибирск, 1990 (Препр. РАН. Сиб. отд-ние. ИТПМ. №8-90)
- [4] SCHARFETTER D.L., GUMMEL H.K. Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator // IEEE Transactions on electron devices. 1969. Vol. ED-16, P. 64–77.
- [5] TING WEI TANG Extension of the Scharfetter-Gummel algorithm to the energy balance equation // IEEE Transactions on electron devices. 1984. Vol. ED-31, P. 1912–1914.
- [6] Micro Electronic and Mechanical Systems. Ed. by Kenichi Takahata. In-Tech Education and Publishing. 2009.