

04; 12

© 1990 г.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОГО РЕАКТОРА ПЛАНАРНОГО ТИПА В РЕЖИМЕ РАДИКАЛЬНОГО ТРАВЛЕНИЯ

В. В. Бойко, А. Т. Рахимов, Н. В. Суетин

В гидродинамическом приближении проведены численные исследования ВЧ разряда мегагерцового диапазона в электроотрицательном газе (Cl_2) низкого давления (0.3—1.0 Тор). Рассматривались две самосогласованные модели: локальная и нелокальная. Проведено сравнение полученных результатов по обоим моделям. Установлена граница применимости локальной модели. На основе полученных характеристик ВЧ разряда (пространственно-временных распределений концентраций заряженных частиц и электрического поля в межэлектродном зазоре) определены энергетический спектр потока ионов (Cl_2^+) на электрод и концентрация атомарного хлора в разряде. Последние две характеристики являются определяющими для процессов травления материалов. Полученные результаты вполне удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Введение

Одним из наиболее интенсивно развивающихся направлений микротехнологии является технология плазменного или «сухого» травления. Ее активно используют для создания топологических структур микронных и субмикронных размеров на поверхности полупроводников. Именно благодаря плазменной технологии удалось достичь высоких скоростей, а главное анизотропии травления [1, 2]. Для проведения процесса травления широко используются планарные реакторы с высокочастотным возбуждением (ВЧ), который представляет собой два соосно расположенных электрода, на один из них подается ВЧ напряжение (иногда роль заземленного электрода выполняют стенки камеры), обрабатываемая пластина располагается непосредственно на электроде. В зависимости от целей технологической операции в межэлектродном зазоре осуществляется проток рабочих газов типа SF_6 , CF_4 , O_2 , различных видов хладонов и фреонов или их смесей, в частности с благородными газами. Подобного типа реакторы используются и для плазменного осаждения материалов. В этом случае в качестве рабочих газов используются газообразные соединения осаждаемых материалов, например SiH_4 , WF_6 и т. д.

Для проведения оптимизации процессов травления и осаждения необходимо детальное понимание физических явлений, происходящих в плазме таких реакторов, а также на поверхности обрабатываемых материалов.

Одним из подходов к решению поставленной задачи может служить создание различного рода математических моделей реакторов. При этом возникает проблема описания комплекса плазмохимических процессов, протекающих в многокомпонентной плазме реально используемых газов, а также на обрабатываемых поверхностях. Такое описание осложнено также сильно нелинейным характером электродинамических явлений в приэлектродных слоях.

В настоящее время большие усилия прилагаются для создания адекватной модели ВЧ разряда планарного типа [3-17]. По-видимому, первой попыткой описания планарного плазменного реактора, используемого для осаждения кремния из SiH_4 , была работа [15]. В ней электронные кинетические коэффициенты рассчитывались с использованием метода Монте—Карло, а затем исполь-

зовались для моделирования плазмохимических реакций в плазме SiH_4 . Однако модель [15] не является самосогласованной в том смысле, что не учитывается влияние плазмохимических процессов на электродинамику плазмы, профиль электрического поля не рассчитывался.

В настоящей работе изложена самосогласованная модель ВЧ плазмохимического реактора планарного типа, работающего в режиме радикального травления. В качестве рабочего газа выбран Cl_2 , так как он широко используется в технологии, а кроме того, плазма Cl_2 достаточно проста по своему составу.

Конечной целью математической модели должен быть расчет наиболее важных характеристик реактора, таких как скорость травления или осаждения, анизотропия и селективность процесса, а также количество привнесенных дефектов, на основании известных или легко измеряемых параметров реактора (величина межэлектродного зазора, частота изменения поля, потребляемой мощности, площадь электродов, вид обрабатываемой поверхности) и сорта газа, а также скорости его прокачки. В настоящее время элементарные процессы, протекающие на поверхности большинства веществ с участием ионов и химически активных частиц (ХАЧ), известны слабо, поэтому трудно создать полностью замкнутую модель реактора. Вместе с тем очень часто лимитирующей стадией процесса является перенос ХАЧ и ионов к поверхности образца, что вызывает интерес к определению потоков этих частиц и его оптимизации. Для расчета этих потоков необходимо знать скорость и пространственное распределение источников их рождения и гибели, распределение электрических полей, а также коэффициенты диффузии и подвижности соответствующих частиц.

В свою очередь для описания как электродинамических, так и плазмохимических процессов необходимо знать электронные кинетические коэффициенты, такие как скорость дрейфа v_e , коэффициент диффузии D_e , константы скоростей различных процессов, протекающих при столкновении электронов с молекулами и ионами. Наиболее аккуратно эти коэффициенты могут быть рассчитаны с использованием метода Монте—Карло, однако большие затраты машинного времени не позволяют использовать этот метод для самосогласованных расчетов. В связи с этим получили развитие приближенные подходы. Одним из наиболее простых среди них является подход, основанный на предположении о пространственно-временной локальности функции распределения электронов по энергиям. Такое приближение оправдано только в случае, когда частота изменения электрического поля $\omega = 2\pi f$ и его градиенты удовлетворяют соотношениям

$$\omega \ll \nu_n, \quad l_e \gg \frac{v_e}{\nu_n}, \quad (1)$$

где ν_n — характерная частота релаксации энергии электронов, v_e — средняя скорость направленного движения электронов, $l_e^{-1} = (1/E) (\partial E / \partial x)$, E — напряженность электрического поля.

Для широко используемой частоты $f = 13.56$ МГц и большинства рабочих газов условия (1) могут быть выполнены при давлении газа около 1 Тор, что обычно соответствует режиму радикального травления [1].

Система уравнений, описывающих ВЧ разряд

Модель ВЧ разряда в Cl_2 при сделанных выше предположениях была рассмотрена в [12–14]. Согласно проведенному в этих работах рассмотрению, можно ограничиться следующими плазмохимическими процессами: ионизация молекулярного хлора электронным ударом, диссоциативное прилипание электронов к молекулам хлора, электрон-ионная и ион-ионная рекомбинации, а также диссоциация и возбуждение молекул Cl_2 электронным ударом. Константы скоростей этих процессов выбирались такими же, как и в [6], и зависели от локального значения параметра E/N , где N — концентрация газа. Для удобства расчетов рассматривался режим заданного тока, который, как предполагалось, равномерно распределен вдоль электродов и имеет плотность $j = j_0 \sin(\omega t)$ (решалась одномерная задача).

В этом случае временно́е и пространственное поведение концентрации электронов n_e и различных сортов положительно и отрицательно заряженных ионов n_p и n_n можно описать следующей системой уравнений:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial j_e}{\partial x} = \nu_i n_e N - \nu_a n_e N - \beta_e n_e n_p, \quad j_e = -n_e \mu_e E - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} + \frac{\partial j_p}{\partial x} = \nu_i n_e N - \beta_n n_n n_p N - \beta_p n_e n_p, \quad j_p = n_p \mu_p E - D_p \frac{\partial n_p}{\partial x}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} + \frac{\partial j_n}{\partial x} = \nu_a n_e N - \beta_n n_n n_p, \quad j_n = -n_n \mu_n E - D_n \frac{\partial n_n}{\partial x} \quad (4)$$

Здесь $j_{e,p,n}$; $\mu_{e,p,n}$; $D_{e,p,n}$ — плотность потока, подвижность и коэффициент диффузии соответствующих частиц; ν_i , ν_a — константы скоростей ионизации и прилипания электрона к молекулам Cl_2 ; β_e , β_n — коэффициенты электрон-ионной и ион-ионной рекомбинации.

Для определения напряженности электрического поля использовалось уравнение непрерывности полного тока

$$\frac{1}{4\pi} \frac{\partial E}{\partial t} + e(j_p - j_e - j_n) = j_0 \sin(\omega t), \quad (5)$$

В отличие от [12-14, 16, 17] мы не полагали концентрацию заряженных частиц на электродах равной нулю, а ставили граничные условия Маршака, т. е. на потоки заряженных частиц от поверхности и к поверхности J_{\pm} с учетом их отражения от электродов. Для электронов граничные условия имеют следующий вид:

$$J_{\pm} = -R_e J_{\mp} - \gamma j_p |_{x=0, L}, \quad (6)$$

где

$$J_+ = n_e \frac{\bar{v}_e}{4} + \frac{1}{2} \left(n_e v_e - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \right),$$

$$J_- = -n_e \frac{\bar{v}_e}{4} + \frac{1}{2} \left(n_e v_e - D_e \frac{\partial n_e}{\partial x} \right). \quad (7)$$

Здесь $\bar{v}_e = [2\varepsilon/m_e]^{0.5}$ и v_e — тепловая и дрейфовая скорости электронов, ε — их средняя энергия, R_e — коэффициент отражения, γ — коэффициент вторичной эмиссии электронов с поверхности электрода за счет ионной бомбардировки. Оба эти коэффициента зависят от материала электрода и энергии бомбардирующей частицы. Заметное влияние на поток вторичных электронов может оказать фотоэмиссия электронов с поверхности электродов, вызванная излучением плазмы. Мы эффективно учитывали роль этих процессов, варьируя параметр γ .

Для положительно заряженных ионов на границах полагалось

$$J_{\pm} = -R_i J_{\mp} \text{ при } E|_{x=0} < 0 \text{ или } E|_{x=L} > 0, \\ n_i|_{x=0, L} = 0 \text{ при } E|_{x=0} > 0 \text{ или } E|_{x=L} < 0. \quad (8)$$

Для отрицательных ионов эти условия меняются местами. Давление нейтрального газа считалось постоянным. Для учета изменения концентрации Cl_2 за счет джоулева нагрева и вытеснения газа использовались нестационарное уравнение теплопроводности с источником

$$c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) = \langle (j_p - j_n) E \rangle \quad (9)$$

и уравнение состояния идеального газа $N = P_0 / (k_B T)$. Здесь T , ρ , c_p и κ — температура, плотность, теплоемкость и коэффициент теплопроводности. Мы пренебрегли вкладом в нагрев электронной составляющей тока, сравнимой по величине с ионными составляющими, так как энергия электронов в основном идет на ионизацию, диссоциацию и возбуждение молекул, а кинетика релаксации возбужденных частиц в объеме весьма сложна и частично подавлена релаксацией возбуждений на электродах. Угловые скобки означают усреднение энерго-

вклада за период колебаний тока. Это оправдано из-за $\tau_r \gg \tau_e \gg 1/f$, где τ_r — характерное газодинамическое время, τ_e — характерное время изменения температуры. В (9) пренебрежено также конвективным охлаждением за счет прокачки газа. Если интерес представляет стационарное распределение температур, то первым членом в (9) можно пренебречь. В качестве граничных условий к (9) задавалась температура на электродах, которая, как правило, выше комнатной даже при охлаждаемых электродах. Мы полагали $T_0 = 350$ К. Уравнение (9) решалось совместно с уравнениями (2)–(8).

Процедура численного решения уравнений (2)–(9) и возникающие при этом трудности подробно описаны в работах [12, 13].

Если условия (1) выполнены, то электронные кинетические коэффициенты являются только функцией локального значения параметра E/N . В случае

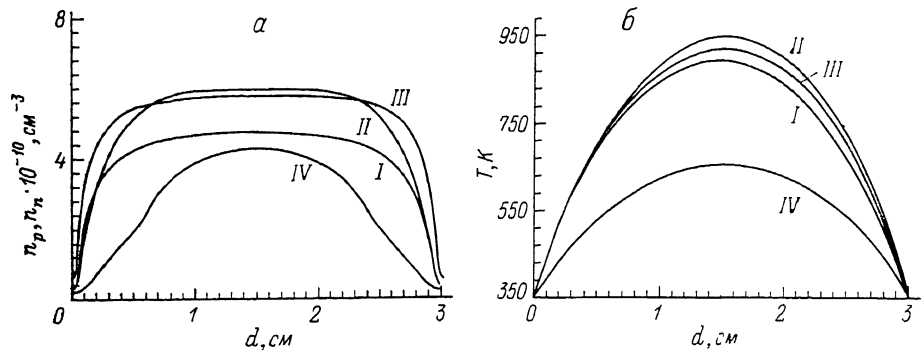


Рис. 1. Концентрация положительных и отрицательных ионов (а) и температура нейтрального газа Cl_2 (б) в межэлектродном зазоре в режимах I–IV.

если условия (1) нарушаются, необходимо учитывать пространственную и временную нелокальность функции распределения электронов по энергиям. В первом приближении это можно сделать с помощью расчета нелокальной средней энергии электронов, как это было сделано в работах [10, 16, 17]. Уравнение, описывающее пространственное и временное поведение средней энергии электронов ϵ , имеет следующий вид [16]:

$$\frac{\partial (\epsilon n_e)}{\partial t} = \frac{5}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_e n_e \frac{\partial \epsilon}{\partial x} - j_e \epsilon \right) - e j_e E - k(\epsilon) n_e N. \quad (10)$$

Здесь k — коэффициент потерь энергии электронами в упругих и неупругих столкновениях. Граничные условия для уравнения (10) на среднюю энергию электронов ставились аналогично (6), (7)

$$Q_{\pm} = -R_e Q_{\mp} - \gamma j_p \epsilon_{\gamma} |_{x=0, L}, \quad (11)$$

где Q_{\pm} — соответствующие потоки энергии электронов; ϵ_{γ} — средняя энергия вторичных электронов, полагавшаяся равной 1 эВ (как показали расчеты, варьирование величины ϵ_{γ} слабо влияет на результаты расчетов).

При совместном решении уравнений (2)–(11) предполагалось, что электронные кинетические коэффициенты являются функциями только средней энергии электронов, причем зависимость этих коэффициентов от ϵ такая же, как в случае стационарной ФРЭ. Последняя рассчитывалась с использованием набора сечений рассеяния электронов на молекуле Cl_2 , взятого из [6].

При численном решении уравнение (10) аппроксимировалось неявной разностной схемой аналогично уравнению (2) в [12] и было включено в итерационную процедуру, описанную в [12, 13].

Результаты расчетов

Основное внимание в наших расчетах мы уделяли моделированию α -режима [18]. По-видимому, именно этому режиму горения разряда соответствует режим радикального плазмохимического травления [1]. Отметим, что режим

реактивного ионного травления и соответствующий ему γ -режим горения разряда не могут быть описаны в рамках гидродинамического приближения. В расчетах обнаружены режимы, когда в межэлектродном зазоре возникают крупномасштабные колебания [12-14]. Эти колебания возникают как в случае пред-

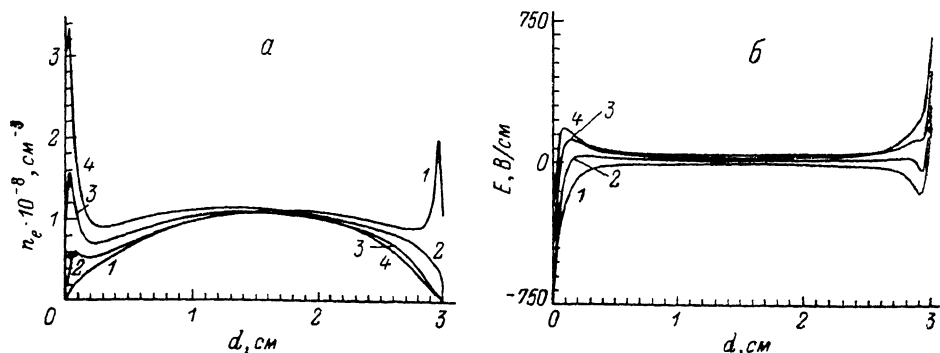


Рис. 2. Концентрация электронов (а) и электрическое поле (б) в различные моменты времени $n, t_n = (n-1)/8f$ в режиме III.

положения полной локальности электронных кинетических коэффициентов, так и в случае учета нелокальности путем решения уравнения для средней энергии электронов. В дальнейшем мы будем рассматривать такие параметры горения разряда, при которых колебания отсутствуют.

В таблице и на рис. 1—6 представлены результаты различных вариантов расчетов для межэлектродного зазора $d=3$ см при давлении нейтрального газа 1 Тор и $\gamma=0.01$. Номера вариантов соответствуют номерам кривых на рис. 1—4, 6.

На рис. 1 приведены распределения положительных и отрицательных ионов (а), которые практически совпадают друг с другом, и распределение температуры нейтрального газа в зазоре (б).

На рис. 2 показаны пространственные распределения концентрации электронов (а) и электрического поля (б) для локального приближения (режим II). Номера кривых соответствуют моментам времени $t_n = (n-1)/8f$, т. е. отражена динамика электронов и электрического поля за первую половину периода. Во второй половине периода динамика этих величин аналогична.

На рис. 3 представлены изменения средней энергии электронов для режима III в течение периода колебаний заданного ВЧ тока. Номера кривых также

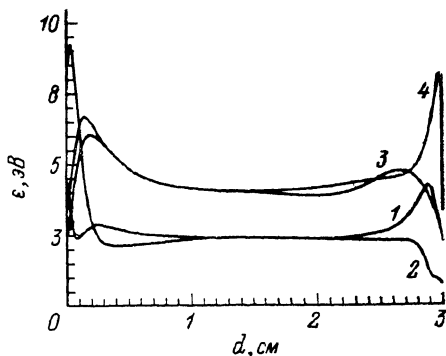


Рис. 3. Средняя энергия электронов в моменты времени t_n в режиме III.

Номер варианта	Величина заданного тока, протекающего через разрядный промежуток, $\text{мА} \cdot \text{см}^{-2}$	Вид приближения	Средняя вкладываемая мощность, $\text{мВт} \cdot \text{см}^{-2}$	Поток ионов Cl^+ на электрод $\times 10^{14}, \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2}$	Поток атомов Cl на электрод $\times 10^{14}, \text{с}^{-1} \cdot \text{см}^{-2}$
I	1.6	Локальное	43	7	31
II	2.0	Локальное	52	16	41
III	2.0	Нелокальное	51	7	41
IV*	2.0	Нелокальное	20	10	43
V	1.1+постоянный ток 0.2	Локальное	32	69	56
VI	1.1+постоянный ток 0.2	Нелокальное	33	14	39

* Давление нейтрального газа 0.3 Тор.

соответствуют моментам времени t_n . Из полученных результатов видно, что характер горения разряда в используемом нами приближении для учета нелокальности остался неизменным при $P=1$ Тор. Более того, основные его количественные характеристики отличаются не более чем на 20 %. Это говорит о применимости для расчетов α -режимов горения разряда локального приближения. Как и следовало ожидать, при снижении давления нейтрального газа локальное приближение неприменимо. Нам удалось просчитать режим IV ($P=0.3$ Тор) только в нелокальном приближении. В этом случае по сравнению

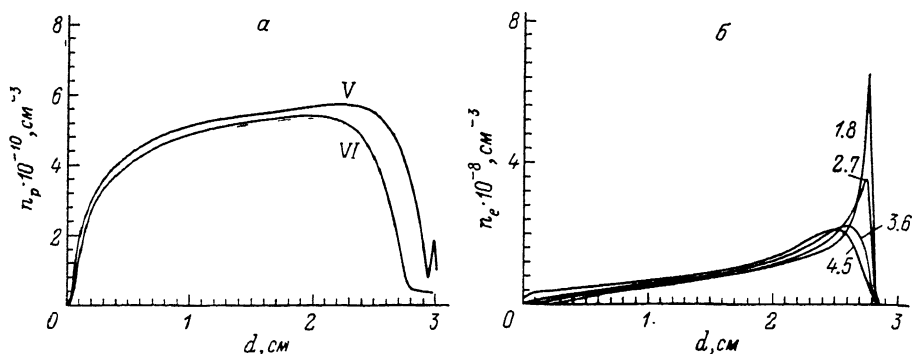


Рис. 4. Концентрация положительных ионов Cl_2^+ в режимах V—VI (а) и электронов в моменты времени t_n в режиме VI (б).

с режимом III в три раза возрастает концентрация электронов в разряде и, как видно из рис. 1, а, существенно меняется характер распределения ионов в зазоре.

При несимметричных электродах, отличающихся по площади или по материалу, на некоторых режимах в ВЧ разряде возникает постоянная разность потенциалов между электродами [2, 19]. Иногда такое постоянное смещение вводят специально для изменения характеристик травления. Мы моделировали этот

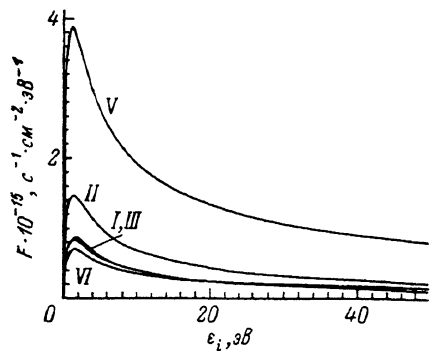


Рис. 5. Функция распределения по энергиям потока ионов Cl_2^+ на электрод.

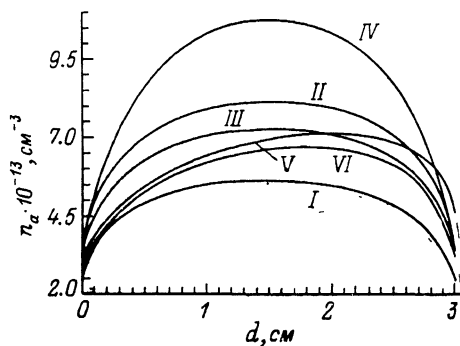


Рис. 6. Концентрация атомарного хлора в разряде.

случай, задавая постоянную составляющую тока, равную 20 %, от амплитуды колебаний ВЧ тока (см. таблицу). Как оказалось, в этом случае расчеты по локальной и нелокальной моделям отличаются существенно. При наличии 20%-ной постоянной составляющей тока постоянная составляющая напряжения на разряде составляла по локальной модели 650 (или 120 В), по нелокальной — 175 % (или 270 В) от амплитуды колебания ВЧ напряжения. На рис. 4 показаны соответствующие пространственные профили концентрации положительных ионов (а) и концентрации электронов (нелокальное приближение) в моменты времени t_n (б). Как видно из рисунка, в локальном приближении у правого электрода образуется максимум концентрации положительных ионов, аналогичный максимумам, возникавшим при «крупномасштабных» колебаниях в моменты максимальной плотности электронов в разряде [12, 13]. В нелокальном прибли-

жении вместо максимума вблизи электрода образуется довольно-таки заметное плато. В обоих приближениях существенно снижается температура нейтрального газа в разряде по сравнению со случаем без постоянной составляющей тока. Наиболее сильное отличие между различными приближениями проявляется в величине и энергетическом спектре потока ионов на электрод (см. таблицу, рис. 5).

Таким образом, наличие даже небольшой по величине постоянной составляющей в токе существенно изменяет распределение параметров плазмы ВЧ газового разряда. В таких режимах необходим более аккуратный учет эффектов пространственной нелокальности электронных кинетических коэффициентов.

Энергетический спектр потока ионов Cl_2^+ на электрод в плазмохимическом реакторе

Одним из важнейших факторов, определяющих анизотропию и скорость травления поверхности в ВЧ разряде, является величина и распределение скоростей ионов, бомбардирующих поверхность. Процессы, происходящие с ионами на поверхности, изучены мало, однако с уверенностью можно сказать, что ион не только сам может вступить в реакцию с атомами поверхности, но и оказать стимулирующее воздействие на реакцию находящихся на поверхности радикалов (в рассматриваемом случае Cl) [1]. Одним из параметров, определяющих поток ионов, является их дрейфовая скорость. К сожалению, нам не удалось получить экспериментальные данные для ионов Cl_2^+ в молекулярном хлоре. Основным процессом торможения ионов в собственном газе является резонансная перезарядка ионов. В работах [20, 21] приведены экспериментально измеренные сечения резонансной перезарядки Cl_2^+ на Cl_2 в диапазоне энергий ионов ϵ_i от 50 до 850 эВ. С учетом данных по сечениям резонансной перезарядки для других молекулярных ионов O_2^+ , N_2^+ , CO^+ , NO^+ [22] мы аппроксимировали сечение резонансной перезарядки Cl_2^+

$$\sigma_p(\epsilon_i) = \left(7.0 - 0.5 \ln \frac{\epsilon_i}{\epsilon_0}\right) \cdot 10^{-15} \text{ см}^2, \quad (12)$$

где $\epsilon_0 = 0.026$ эВ — тепловая энергия молекул Cl_2 при $T = 300$ К.

Для расчета дрейфовой скорости была использована аппроксимационная формула [23]

$$V_{др} \left(\frac{E}{N}\right) = V_T 0.48 \zeta (1 + 0.22 \zeta^{1.5})^{-0.33}, \quad (13)$$

где ζ определяется из нелинейного уравнения

$$\zeta = \frac{eE}{2\epsilon_r N \sigma_p [(4.5 + 1.8\zeta) \epsilon_0]},$$

m_i — масса иона, e — элементарный заряд, $V_T = (2\epsilon_r/m_i)^{0.5}$, ϵ_r — тепловая энергия.

Для других молекулярных ионов (13) дает значение дрейфовой скорости в собственном газе с той же точностью (около 10 %), с которой известно сечение перезарядки. Полученные значения для $V_{др}$ согласуются с оценками работы [6].

Диффузия ионов для малых полей $E/N \leq 30$ Тд находилась из соотношения Эйнштейна

$$D_i = V_{др}(0) \frac{eE}{\epsilon_r}. \quad (14)$$

Известно [23], что для больших полей коэффициент диффузии можно представить в виде

$$D_i = a m_i V_{др}^3 \left(\frac{E}{N}\right) \frac{N}{E}. \quad (15)$$

Наибольшее соответствие с экспериментальными данными [24] для диффузии молекулярных ионов O_2^+ , N_2^+ , NO^+ в собственном газе дает значение коэффициента $a = 0.22$, которое и было использовано в нашей работе.

При больших полях $\beta = (eE)/(2\varepsilon_r N \tau_p) \gg 1$ функцию распределения ионов по скоростям можно представить в виде [25]

$$f_1(U) = C_1 \exp\left(-0.5 \frac{u_z^2}{\beta}\right) \eta(u_z) \delta(u_y^2). \quad (16)$$

Здесь поле направлено по оси z , $U = V/V_r$, $u_p = u_x^2 + u_y^2$. При малых полях $\beta \ll 1$ функция распределения должна совпадать с максвелловской. Для описания промежуточных полей $\beta \sim 1$ в работе [25] была предложена следующая функция распределения с одним варьируемым параметром α :

$$f(U) = \pi^{-1.5} C \exp[-U^2(1 - \alpha \cos \vartheta)], \quad (17)$$

где ϑ — угол между векторами E и U .

Функция $f(U)$ нормирована на 1 и

$$C = \frac{\alpha \sqrt{1 - \alpha^2}}{\sqrt{1 + \alpha} - \sqrt{1 - \alpha}}.$$

В случае малых полей ($\alpha \rightarrow 0$) функция (17) совпадает с максвелловским распределением, а в случае больших полей ($\alpha \rightarrow 1$) с функцией (16).

Дрейфовая скорость $V_{др} = V_r \int u_z f(U) d^3U$ следующим образом выражается через параметр α :

$$V_{др} = \frac{V_r}{\sqrt{\pi}} [\sqrt{1 + \alpha} - \sqrt{1 - \alpha}]^{-1} \left\{ \frac{2}{\sqrt{1 - \alpha^2}} - \frac{\sqrt{1 - \alpha^2}}{\alpha} \ln \frac{1 + \alpha}{1 - \alpha} \right\}. \quad (18)$$

Для нахождения α по известной из (13) $V_{др}$ численно решалось нелинейное уравнение (18). Был использован модифицированный метод Ньютона. Если α_n — некоторое приближение к корню (19) $\alpha_0 \sim 1$, то

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n - 0.1 \frac{V_{др}(\alpha)}{V'_{др}(\alpha)}.$$

На основе (17) рассчитывался энергетический спектр потока ионов на электрод

$$F(\varepsilon_i) = \left\langle j_i C_1(\alpha) \left[\frac{\varepsilon_i}{\pi} \right]^{0.5} \left[\frac{2}{m_i \varepsilon_r} \right]^{1.5} \int_0^{\pi/2} \exp\left[-\frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_r} (1 - \alpha \cos \vartheta)\right] \sin \vartheta d\vartheta \right\rangle. \quad (19)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение за период колебаний, j_i — ток ионов на расстоянии длины свободного пробега $l_i \sim 10^{-3}$ см от электрода.

Следует отметить, что выражения (13)—(19) получены в предположении пространственной однородности электрического поля, поэтому могут быть применимы только в случае $l_i \ll l_e$.

На рис. 5 приведены рассчитанные спектры потоков ионов на электрод для режимов, представленных в таблице.

Профиль $F(\varepsilon_i)$ согласуется с экспериментально полученным в [26] при близких к нашим условиям ВЧ разряда в Cl_2 . Интересно отметить, что характер спектра мало отличается для режимов нелокального (III) и локального (II). Отличие носит лишь количественный характер, и поэтому спектр режима III практически совпадает со спектром режима I, который рассчитывался при меньшей амплитуде напряжения, заданного на разряде.

Как видно из рисунка, добавление 20%-ной постоянной составляющей тока в локальном приближении существенно увеличивает поток ионов на электрод, причем прежде всего за счет увеличения высокоэнергетической части ($\varepsilon_i \geq 50$ эВ). В нелокальном приближении картина совершенно другая. Несмотря на большую разность потенциалов между электродами (270 вместо 120 В), энергетический спектр меняется незначительно. Видимо, именно нелокальное приближение наиболее верно описывает реальный энергетический спектр, так как

существенное возрастание потока высокоэнергетических ионов на электрод (кривая V) приводило бы к появлению многочисленных дефектов на поверхности полупроводников, а это в эксперименте не наблюдается [1].

Расчет концентрации атомарного хлора

Наличие атомов Cl в плазмохимическом реакторе на основе ВЧ разряда в Cl₂ является одним из основных факторов, определяющих скорость и анизотропию травления [1]. Атомный хлор образуется в Cl₂ плазме за счет процессов диссоциативного прилипания электронов, диссоциации электронным ударом, ион-ионной рекомбинации, электрон-ионной диссоциативной рекомбинации.

Скорость рождения атомов в первых двух процессах может быть представлена как

$$R_{a, i} = [\nu_a(E) + 2\nu_I(E)] n_e N, \quad (20), (21)$$

где ν_a , ν_d — константы скоростей диссоциативного прилипания и диссоциации, зависящие от поля.

При использовании приведенных в [6] сечений ν_a и ν_d были найдены из решения кинетического уравнения Больцмана. Наши расчеты подтвердили результаты [6], что в среднем ν_d на порядок выше ν_a .

Скорость рождения атомов в процессе ион-ионной рекомбинации записывается как

$$R_r = \beta_n n_p n_n. \quad (22)$$

Из-за примерного равновесия рождения и гибели ионов Cl⁻ в объеме разряда скорости процессов диссоциативного прилипания электронов и ион-ионной рекомбинации близки.

Константы ион-ионной и электрон-ионной рекомбинаций одного порядка. Как показали наши расчеты, концентрация электронов в плазме Cl₂ в рассматриваемом нами α -режиме ВЧ разряда на два порядка ниже концентрации ионов. Это согласуется с оценкой [6]. Поэтому скорость ион-ионной рекомбинации на два порядка больше, чем электрон-ионной рекомбинации, и мы пренебрегали последним процессом как источником атомарного хлора.

Гибель атомов Cl в разряде происходит за счет объемной и поверхностной рекомбинаций. Объемная рекомбинация Cl является трехтелным процессом и скорость ее квадратично зависит от концентрации атомарного хлора. В экспериментах [27, 28] концентрация атомов Cl не превышает 10 % от молекулярного хлора при условиях ВЧ разряда, аналогичных нашим. Как показывают оценки, проведенные в [27, 28], скорость объемной рекомбинации при давлениях газа ~1 Тор и указанной доли атомарного хлора на три порядка меньше скорости рождения атомов. Таким образом, при этих условиях гибель атомов происходит в основном на поверхности электродов.

Поверхностная рекомбинация атомов хлора является сложным процессом, ее расчет представляет собой самостоятельную задачу. В работах [29-31] было определено, что на металлической поверхности кинетика поверхностной рекомбинации квадратично зависит от концентрации атомов хлора вблизи поверхности и ее скорость можно аппроксимировать выражением

$$R_s = k_s n_a^2, \quad (23)$$

n_a — концентрация атомарного хлора.

К сожалению, коэффициент k_s , зависящий от материала и температуры поверхности, неизвестен. В работах [27, 28] для электродов из нержавеющей стали экспериментально удалось определить отношение $k_f/k_s = 700$ см, где

$$k_f = \left\langle \nu_a + 2\nu_I + \beta_n \frac{n_p n_n}{n_e N} \right\rangle, \quad (24)$$

скобки означают усреднение по периоду колебаний в разряде и по межэлектродному зазору.

Это отношение, пропорциональное $\langle n_e^2 (n_e N)^{-1} \rangle$, слабо зависит от меняющихся параметров разряда: давления (0.2—0.8 Тор), вкладываемой в разряд мощности (0.05—0.5 Вт см⁻³), частоты колебаний (3—14 МГц). Пренебрегая изменениями в этих режимах температуры электродов и потоков ионов на электрод, оказывающих стимулирующее действие на реакцию атомов, мы полагали $k_s = k_f/700$ см. Это позволило нам провести расчет атомарного хлора для случая стальных электродов. Решалась граничная задача стационарного диффузионного уравнения

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[D_a(T) \frac{\partial n_a}{\partial x} \right] = - \langle (v_a + 2v_d) n_e N + \beta_n n_p n_a \rangle, \quad (25)$$

с нелинейными граничными условиями

$$\left[-D_a(T) \frac{\partial n_a}{\partial x} + k_s n_a^2 \right]_{x=0} = \left[-D_a(T) \frac{\partial n_a}{\partial x} - k_s n_a^2 \right]_{x=d} = 0, \quad (26)$$

угловые скобки здесь означают усреднение за период, d — величина межэлектродного зазора, $D_a(T)$ — коэффициент диффузии атомарного хлора в молекулярном, рассчитываемый по эмпирической формуле из [32],

$$D_a(T) = T^{1.75} \cdot 4.3 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2/\text{с},$$

T — температура газа в К.

Граничная задача (25), (26) интегрировалась численно с использованием метода трехточечной прогонки. Полученные результаты представлены на рис. 6. Номера кривых соответствуют режимам, приведенным в таблице. Из рисунка видно, что величины концентрации атомов в локальном и нелокальном приближениях близки, на них также мало влияет наличие постоянной составляющей тока. Наиболее существенное влияние на концентрацию Cl оказывает изменение давления нейтрального газа.

Сравнение полученных результатов с экспериментом

В работах [27, 28] описаны измерения концентрации электронов и атомарного хлора для ВЧ разряда в молекулярном хлоре с параметрами $P=0.2-0.8$ Тор, $f=0.1-13.5$ МГц, $W=50-500$ мВт/см³. Реактор представлял собой диодную планарную систему со стальными, охлаждаемыми водой электродами в виде дисков диаметром 12.7 см и межэлектродным зазором 3 см.

Сравнение данных, приведенных в [27, 28], с нашими расчетами для почти совпадающих параметров ВЧ разряда показывают, что в эксперименте наблюдается на десятки процентов бóльшая, чем у нас, концентрация электронов и атомарного хлора. В то же время характер зависимости n_a от n_e и W в [27, 28] тот же, что и в наших расчетах, т. е. с ростом n_e и W пропорционально растет и n_a .

Расхождение с экспериментом в определении n_e и n_a не является удивительным. Во-первых, в работах [27, 28] точно не указан абсолютный энерговклад. Во-вторых, плохо известна константа поверхностной рекомбинации атомарного хлора. В-третьих, приведенные в [6] сечения взаимодействий электронов с молекулами Cl₂ определены весьма приблизительно. Нет надежных экспериментальных данных по дрейфовым скоростям ионов Cl₂⁺ и Cl⁻, коэффициенту γ вторичной эмиссии электронов и фотоэмиссии. Как показали расчеты, эти константы могут быть существенны. Так, изменение дрейфовых скоростей ионов на 10 % ведет к 10%-му изменению концентрации электронов.

Возможно, что уточнение входных параметров для наших моделей вполне может привести к лучшему совпадению расчетов с экспериментом. Однако возможно, что расхождение с экспериментом связано с некорректным описанием приэлектродных слоев разряда в гидродинамическом приближении. Например, можно предположить, что вблизи электродов возникают пучки высокоэнергетических электронов, которые существенно повышают ионизацию в объеме ВЧ разряда.

Проведенные нами численные исследования показали, что ВЧ разряды в электроотрицательных газах низкого давления имеют сложную, далеко не однородную пространственную структуру, которая к тому же при определенных параметрах может периодически меняться с характерным временем, обусловленным процессами прилипания электронов, уходом ионов из приэлектродных областей. Процессы переноса заряженных частиц играют важную роль в разрядах низкого давления. Как показали расчеты, обычная диффузия работает лишь в узких приэлектродных слоях, в объеме плазмы происходит вынос частиц в результате их дрейфа и вынужденной амбиполярной диффузии [33].

Помимо описания электродинамики ВЧ разрядов нам также удалось построить самосогласованную модель планарного плазмохимического реактора с ВЧ возбуждением, которая согласуется с экспериментом. Созданная модель позволяет выявлять наиболее важные процессы, протекающие при травлении, что может способствовать созданию упрощенных моделей и оптимизировать проведение экспериментов.

Следующим шагом на пути построения полной самосогласованной математической модели травления было бы создание комплекса программ по взаимодействию радикалов и ионов с поверхностями различных материалов, подвергающихся травлению. В качестве входных параметров для этих программ использовались бы потоки радикалов и энергетические спектры потоков ионов на поверхность. А выходные данные помимо скорости и анизотропии травления включали бы коэффициенты прилипания заряженных частиц и радикалов к поверхности.

Авторы выражают благодарность Ю. А. Манкелевичу и С. С. Филиппову за обсуждение алгоритмов расчетов.

Список литературы

- [1] Плазменная технология в производстве СВИС / Под ред. Н. Айнспрука, Д. Брауна. М.: Мир, 1987. 472 с.
- [2] Данилин Б. С., Киреев В. Ю. Применение низкотемпературной плазмы для травления и очистки материалов. М.: Энергоатомиздат, 1987. 264 с.
- [3] Словецкий Д. И., Дерюгин А. А. // Химия плазмы. М.: Энергоатомиздат, 1987. Вып. 13. С. 240—277.
- [4] Masek K., Laska L., d'Agostino R., Cramarossa F. // Contrib. Pl. Phys. 1987. Vol. 27. V 1. P. 15—21.
- [5] Anderson H. M., Merson J. A., Light R. W. // IEEE Trans. Pl. Sci. 1986. Vol. PS-14. N 2. P. 156—165.
- [6] Rogoff G. L., Klamer J. M., Piejak R. B. // IEEE Trans. Pl. Sci. 1986. Vol. PS-14. N 2. P. 103—111.
- [7] Ковалев А. С., Назаров А. И., Рахимов А. Т. и др. // Физика плазмы. 1986. Т. 12. № 10. С. 1264—1268.
- [8] Ковалев А. С., Рахимов А. Т., Суетин Н. В., Феоктистов В. А. // Тез. докл. III Всесоюз. конф. по физике газового разряда. Киев, 1986. С. 107—109.
- [9] Райзер Ю. П., Шнейдер М. Н. // Физика плазмы. 1987. Т. 13. Вып. 4. С. 471—479.
- [10] Voeuf J.-P. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 36. N 6. P. 2782—2792.
- [11] Barnes M. S., Colter T. J., Elta M. E. // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 61. N 1. P. 81—89.
- [12] Бойко В. В., Манкелевич Ю. А., Рахимов А. Т. и др. // Препринт ИПМ им. М. В. Келдыша. № 86. М., 1988. 22 с.
- [13] Бойко В. В., Манкелевич Ю. А., Рахимов А. Т. и др. // Физика плазмы. 1989. Т. 15. № 2. С. 218—225.
- [14] Бойко В. В., Манкелевич Ю. А., Рахимов А. Т. и др. // Физика плазмы. 1989. Т. 15. № 7. С. 867—871.
- [15] Kushner M. J. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. N 8. P. 2532—2551.
- [16] Graves D. B. // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. N 1. P. 88—94.
- [17] Richards A. D., Thompson B. E., Sawin H. H. // Appl. Phys. Lett. 1987. Vol. 50. N 9. P. 492—494.
- [18] Левитский С. М. // ЖТФ. 1957. Т. 27. Вып. 5. С. 970—977.
- [19] De Vries C. A. M., van Hoek W. G. M. // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58. N 5. P. 2074—2076.
- [20] Dillon J. A., Sheridan W. F., Edwards H. D., Ghosh S. N. // J. Chem. Phys. 1955. Vol. 23. N 5. P. 776—779.
- [21] Ghosh S. N., Sheridan W. F. // J. Chem. Phys. 1957. Vol. 27. N 6. P. 1436—1437.
- [22] Евсеев А. В., Радциг А. А., Смирнов Б. М. // ЖЭТФ. 1979. Т. 77. Вып. 2. С. 560—573.
- [23] Смирнов Б. М. Ионы и возбужденные атомы в плазме. М.: Атомиздат, 1974. 456 с.
- [24] Мак-Даниэль И., Мезон Э. Подвижность и диффузия ионов в газах. М.: Мир, 1976. 424 с.
- [25] Смирнов Б. М. // ДАН СССР. 1968. Т. 181. № 4. С. 833—836.

- [26] *Donnelly V. M., Flamm D. L., Bruce R. H.* // J. Appl. Phys. 1985. Vol. 58. N 6. P. 2135—2144.
- [27] *Richards A. D., Thompson B. E., Allen K. D., Savin H. H.* // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. N 3. P. 792—798.
- [28] *Richards A. D., Savin H. H.* // J. Appl. Phys. 1987. Vol. 62. P. 799—807.
- [29] *Benziger J. B., Preston R. E.* // Surf. Sci. 1984. Vol. 141. N 2/3. P. 567—579.
- [30] *Tusoe W. T., Spencer N. D., Lambert R. M.* // Surf. Sci. 1982. Vol. 120. N 2. P. 413—426.
- [31] *Wasserman E., Falconer W. E., Yager W. A.* // J. Chem. Phys. 1968. Vol. 49. N 4. P. 1971—1972.
- [32] *Reid R. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K.* The Properties of Gases and Liquids. New York: McGraw-Hill, 1977. 688 p.
- [33] *Шаниро Г. И., Сорока А. М.* // Письма в ЖТФ. 1979. Т. 5. Вып. 3. С. 129—133.

Московский государственный
университет им. М. В. Ломоносова
Научно-исследовательский институт
ядерной физики

Поступило в Редакцию
2 ноября 1989 г.
