

01;04;05;11;12

Моделирование процесса разложения силана в высокочастотной плазме

© В.И. Струнин, А.А. Ляхов, Г.Ж. Худайбергенов, В.В. Шкуркин

Омский государственный университет,
644077 Омск, Россия
e-mail: strunin@omsu.omskreg.ru

(Поступило в Редакцию 3 августа 2001 г.)

Построена модель, описывающая процесс разложения силана в разряде высокочастотной аргоновой плазмы. На основании численных расчетов получены концентрации продуктов разложения SiH_4 и концентрации продуктов синтеза (высших силанов), проанализирована роль метастабильных атомов аргона в образовании радикала SiH_3 и высших силанов.

Введение

Одним из традиционных способов получения пленок $a\text{-Si:H}$ является разложение силана в ВЧ разрядной плазме. Существуют несколько типов таких систем, получивших название PECVD-реакторов. В последнее время активно развиваются струйные плазмохимические методы, которые различаются по способу активации газообразных реагентов. В методе электронно-лучевой активации [1] пучок электронов с энергией несколько keV направляется в свободную струю рабочего газа, проходящего через сверхзвуковое сопло. Электроны вызывают ионизацию и диссоциацию молекул SiH_4 и далее продукты разложения попадают на подложку. Другой метод [2] предполагает предварительное разложение кремнийсодержащего газа в емкостном ВЧ разряде (по типу PECVD-реактора) с последующим выносом продуктов разложения из разрядной зоны в вакуумную камеру через сопло. В этом методе в зоне разряда наряду с разложением силана протекают различные реакции между радикалами, приводящие к образованию дисиланов и полисиланов, изменяющих состав плазмы и количество пленкообразующих материалов. Наличие информации о концентрациях компонент реагирующего газа и их поведении в зависимости от условий разряда, позволяет выбирать оптимальные режимы плазмохимических процессов и в итоге получать более качественные пленки.

Описание модели

Как показали экспериментальные исследования, наиболее существенный вклад в формирование пленок аморфного кремния приборного качества вносит радикал SiH_3 . Процессы образования и гибели этого радикала в плазме вызывают особый интерес в ходе моделирования. Необходимо отметить, что достоверность получаемых результатов в значительной степени зависит от компонент плазмы, включаемых в модель. В табл. 1 приведен список компонент, включенных в данную модель. Предложенная модель учитывает изменение

концентрации силана, уход радикалов и силана в высшие силаны и пыль Si_yH_n ($y > 5$).

Система уравнений химической кинетики, описывающих процессы в объеме газового разряда, имеет вид

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + u \nabla N_i = \nabla (D_i \nabla N_i) + \sum_j N_j (n_e K_{ji} + \sum_l K_{jli} N_l) - N_i \sum_j (n_e K_{ij} + \sum_l K_{jli} N_l), \quad (1)$$

где N_i — концентрация i -го компонента, D_i — коэффициенты диффузии, n_e — концентрация электронов, K_{ji} — константы скоростей электронно-индуцированных реакций, K_{jli} — константы скоростей реакций между радикалами, u — скорость потока газа в плазмотроне.

Первое слагаемое в правой части описывает диффузионное изменение концентрации, второе и третье — рождение и гибель частиц сорта i в химических реакциях соответственно. Член $u \nabla N_i$ учитывает прокачку газа в разрядной камере. Решение уравнения (1) с конвективным членом, учитывающим прокачку газа, является

Таблица 1. Параметры потенциала Ленарда-Джонса

Компонент	$\sigma_i (A)$	$\varepsilon_i (K)$
SiH_4	4.084	207.6
SiH_3	3.943	170.3
SiH_2	3.803	133.1
SiH	3.662	95.8
H	2.5	30.0
H_2	2.915	59.7
Si_2H_3	4.494	318.2
Si_2H_4	4.601	312.6
Si_2H_5	4.717	306.9
Si_2H_6	4.828	301.3
Si_2H_6^*	4.828	301.3
$\text{Si}_2\text{H}_6^{**}$	4.828	301.3
Si_3H_n	5.08	354
Si_4H_n	5.80	354
Si_5H_n	6.50	354
Ar, Ar*	3.44	120

математически сложной задачей. Именно присутствие этого члена обеспечивает стационарность решения. Но рассматривая задачу на временном отрезке $[0, \tau]$, где $\tau = M_0/Q$ (M_0 и Q — масса газа в реакторе и его расход), прокачку можно не учитывать и решать уже существенно нестационарную задачу [3]. Такое приближение, известное как режим идеального вытеснения, имеет место только при отсутствии сильного перемешивания реагирующего газа, так как в противном случае невозможно ввести параметр τ , определяющий время пребывания газа в реакторе. В условиях эксперимента величина τ составляет 0.1 с, что гораздо больше времени протекания химических реакций.

Коэффициенты диффузии рассчитывались по широко применяемой в расчетах формуле Уилке для многокомпонентных смесей

$$D_i = (n - n_i) \left[\sum_{k=1, k \neq i}^N n_k / D_{ki} \right]^{-1}, \quad (2)$$

где n — суммарная концентрация смеси, n_i — концентрация i -компоненты.

Поскольку значения концентраций радикалов в разряде не превышают 0.001% от концентрации плазмообразующего газа, то можно ограничиться диффузией частиц в основных компонентах, какими являются SiH_4 и Ar . Коэффициенты бинарной диффузии D_{ki} рассчитывались по формуле молекулярно-кинетической теории газов [4] с использованием потенциала Ленарда–Джонса

$$D_{ki} = 1.412308 \frac{\sqrt{T^3/\mu_{ki}}}{p\sigma_{ki}^2 \Omega_{kl}^*(T_{ki}^*)} \frac{\text{cm}^2}{\text{s}}, \quad (3)$$

p — давление в Торр; $\mu_{ki} = m_k m_i / (m_k + m_i)$ — приведенная масса частиц i -го и k -го сортов; $\sigma_{ki} = (\sigma_k + \sigma_i)/2$ — эффективный диаметр столкновения; $T_{ki}^* = kT/\varepsilon_{ki}$ — характеристическая температура; $\varepsilon_{ki} = \sqrt{\varepsilon_k \varepsilon_i}$ — параметр потенциала межмолекулярного взаимодействия (глубина потенциальной ямы); $Q_{ki}^*(T_{ki}^*)$ — интеграл столкновений для переноса массы, нормированный на Ω -интеграл для модели твердых сфер; в расчетах использовалась аппроксимация $\Omega_{ki}^*(T_{ki}^*)$ [5]

$$\Omega_{ki}^*(T_{ki}^*) = A(T_{ki}^*)^{-B} + C \exp(-DT_{ki}^*) + E \exp(-FT_{ki}^*) + G \exp(-HT_{ki}^*), \quad (4)$$

значения коэффициентов: $A = 1.06036$, $B = 0.15610$, $C = 0.19300$, $D = 47635$, $E = 1.03587$, $F = 1.52996$, $G = 1.76474$, $H = 3.89411$. Использование значения параметров потенциала Ленарда–Джонса приведены в табл. 1. Данные взяты из работ [6,7].

Список реакций, рассматриваемых в модели, приведены в табл. 2. Были использованы данные работ [6–8]. Константы скоростей реакций индуцированных электронным ударом были получены из полного сечения диссоциации силана электронным ударом [6,9]. При

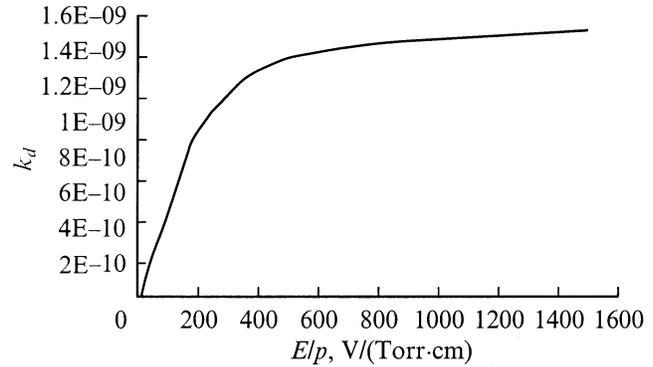


Рис. 1. Зависимость E/p константы скорости диссоциации силана.

этом учитывалось, что распределение продуктов реакции полной диссоциации по каналам (R1)–(R3) составляет 39, 48 и 13% соответственно [7]. Константа скорости реакции диссоциации силана рассчитывалась после того, как была найдена функция распределения электронов по энергии [10,11] для соответствующего значения приложенного поля. На рис. 1 приведена зависимость константы скорости диссоциации силана в зависимости от приложенного поля. В условиях, для которых проводилось моделирование ($p = 0.125$ Торр), реализуется диффузионный режим поддержания разряда ($n_i k_r \ll (1/\Lambda_D^2) D_a$), где k_r — коэффициент рекомбинации, D_a — коэффициент амбиполярной диффузии, Λ_D^2 — диффузионная длина. Поэтому гибель заряженных частиц происходит на стенках камеры, а не в объеме разряда.

Для полной постановки задачи необходимо задать краевые условия. Постановка граничных условий связана с рассмотрением поверхностной кинетики. Учет поверхностных процессов затруднен ввиду отсутствия достоверных данных о параметрах взаимодействия компонент с поверхностью. Поэтому в расчетах используются граничные условия, вытекающие из примитивной кинетической теории. Соотношение для падающего и отраженного потоков

$$\Gamma_{\text{out}} = (1 - s)\Gamma_{\text{in}}, \quad (5)$$

где $\Gamma_{\text{in}} = n v_t / 4 + D/2(\partial n/\partial z)$, $\Gamma_{\text{out}} = n v_t / 4 - D/2(\partial n/\partial z)$ — падающий и отраженный потоки частиц соответственно, $v_t = 8kT/\pi m$ — тепловая скорость, m — масса частицы, s — коэффициент осаждения.

Тогда для значений газодинамических параметров на поглощающей поверхности получим соотношение (предполагается диффузный закон отражения)

$$D \frac{\partial n}{\partial z} = -\frac{s v_t}{2(2-s)} n. \quad (6)$$

В выражении (6) не учтено испарение с поверхности, поскольку в условиях интенсивного осаждения на стенки

Таблица 2. Химические реакции и константы скоростей

№	Реакция	Константа скорости*
Реакции, индуцированные электронным ударом		
R1	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2 + 2\text{H} + e$	3.0(-11)
R2	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H} + e$	3.0(-11)
R3	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2^+ + 2e + 2\text{H}$	2.0(-11)
R5	$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^m + e$	3.1(-11)
R6	$\text{Ar}^m + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	3.65(-3)
R4	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_3^+ + 2e + \text{H}$	2.0(-11)
R7	$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	1.0(-13)
R8	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH} + \text{H}_2 + \text{H} + e$	9.34(-12)
R9	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}_2 + e$	7.19(-12)
R10	$\text{H}_2 + e \rightarrow 2\text{H} + e$	4.49(-12)
R11	$\text{Si}_2\text{H}_6 + e \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2 + e$	2.86(-10)
R12	$\text{Si}_2\text{H}_6 + e \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 + e$	1.23(-11)
Нейтрал-нейтральные реакции		
R13	$\text{SiH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}_2$	$2.8 \cdot 10^{-11} \exp(-1250/T)$
R14	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5^*$	1.0(-11)
R15	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	$4.4 \cdot 10^{-11} (1 - 1.4/(1 + \exp(P - 1.1)))$
R16	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	2.5(-12)
R17	$\text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{Si}_2\text{H}_6$	5.0(-12)
R18	$\text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	1.0(-10)
R19	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_3$	$1.58 \cdot 10^{-11} \exp(-1250/T)$
R20	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	$2.4 \cdot 10^{-10} \exp(-1250/T)$
R21	$\text{Si}_2\text{H}_6^* \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$5.0(6) \text{ c}^{-1}$
R22	$\text{Si}_2\text{H}_6^* + \text{Ar} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{Ar}$	5.00(-10)
R23	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	$2.3(7) \text{ c}^{-1}$
R24	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$2.3(7) \text{ c}^{-1}$
Реакции радикалов с радикалами, силаном, высшими силанами и водородом		
R25	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	$4.1 \cdot 10^{-10} (1 + 3.2/(1 + \exp(0.4P)))$
R26	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6^{**}$	1.0(-11)
R27	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_4$	1.0(-10)
R28	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	1.0(-11)
R29	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{Si}_2\text{H}_5$	$4.1 \cdot 10^{-10} \exp(-2500/T)$
R30	$\text{SiH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{SiH} + \text{H}_2$	3.30(-10)
R31	$\text{SiH}_2 + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$3.9 \cdot 10^{-10} (1 - (1 + 0.55P)^{-1})$
R32	$\text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	1.70(-10)
R33	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	1.00(-10)
R34	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	1.00(-10)
R35	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_4$	$2.4 \cdot 10^{-10} \exp(-1250/T)$
R36	$\text{SiH}_2 + \text{Si}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	1.00(-11)
R37	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	1.00(-11)
R38	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	1.00(-11)
R39	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9 + \text{H}_2$	1.00(-11)
R40	$\text{SiH} + \text{Si}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_7$	1.00(-11)
R41	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	1.00(-11)
R42	$\text{SiH} + \text{Si}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9$	1.00(-11)
R43	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_3\text{H}_8 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9 + \text{H}_2$	1.00(-11)
R44	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	1.00(-11)
R45	$\text{SiH} + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11}$	1.00(-11)
R46	$\text{SiH}_2 + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	1.00(-11)
R47	$\text{SiH}_3 + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{H}_2$	1.00(-11)
R48	$\text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{H} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	1.00(-11)

Таблица 2 (продолжение).

№	Реакция	Константа скорости*
Реакции с метастабильными частицами		
R38	$Ar^m + SiH_4 \rightarrow SiH_2 + 2H + Ar$	2.60(-10)
R39	$Ar^m + SiH_4 \rightarrow SiH_3 + H + Ar$	1.40(-10)
R40	$Ar^m + H_2 \rightarrow 2H + Ar$	7.00(-10)
R41	$Ar^m + SiH_3 \rightarrow SiH_2 + H + Ar$	1.00(-10)
R42	$Ar^m + SiH_3 \rightarrow SiH + H + Ar$	1.00(-10)
R43	$Ar^m + Si_2H_6 \rightarrow Si_2H_4 + 2H + Ar$	6.60(-10)
R44	$Ar^m + Si_2H_4 \rightarrow Si_2H_2 + 2H + Ar$	6.60(-10)
R45	$Ar^m + Ar^m \rightarrow Ar^+ + Ar + e$	1.00(-9)
Реакции, приводящие к формированию пыли (DUST)		
R46	$SiH_n + [Si_5H_{11}, Si_5H_{12}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R47	$Si_2H_n + [Si_4H_9, Si_4H_{10}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R48	$Si_2H_n + [Si_5H_{11}, Si_5H_{12}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R49	$Si_3H_7 + [Si_3H_7, Si_3H_8] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R50	$Si_3H_7 + [Si_4H_9, Si_4H_{10}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R51	$Si_3H_7 + [Si_5H_{11}, Si_5H_{12}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R52	$Si_4H_9 + [Si_4H_9, Si_4H_{10}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R53	$Si_4H_9 + [Si_5H_{11}, Si_5H_{12}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)
R54	$Si_5H_{11} + [Si_5H_{11}, Si_5H_{12}] \rightarrow Dust$	1.00(-11)

*Константы скоростей приведены для давления 0.124 Торг и газовой температуре 500 К, если не указана соответствующая зависимость.

давление пересыщенного пара будет велико, и испарением можно пренебречь.

Метод расчета

В цилиндрической системе координат для 20 компонент рассматривалась система уравнений

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} = D_i \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial N_i}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 N_i}{\partial z^2} \right] + F_i - A_i N_i. \quad (7)$$

Слагаемое $(F_i - A_i N_i)$ определяет рождение и гибель i -й компоненты в химических реакциях, $A_i > 0$, $\partial F_i / \partial N_i = 0$. Система уравнений (2) решалась внутри области $[0, R] \times [0, L]$ на временном отрезке $[0, \tau]$ по схеме переменных направлений (продольно-поперечная схема)

$$\begin{aligned} \frac{\bar{n} - n}{0.5\Delta t} &= (\Lambda_z \bar{n} + \Lambda_r n) + F - A \bar{n}, \\ \frac{\widehat{n} - n}{0.5\Delta t} &= (\Lambda_r \bar{n} + \Lambda_z \widehat{n}) + F - A \bar{n}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda_r &= \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(D_i r \frac{\partial n_i}{\partial r} \right), \\ \Lambda_z &= \frac{\partial}{\partial z} \left(D_i \frac{\partial n_i}{\partial z} \right), \end{aligned}$$

\bar{n} — значение концентрации на временном полуслое $\Delta t(m + 1/2)$, \widehat{n} — концентрация на слое $\Delta t(m + 1)$, m — номер временного слоя, Δt — шаг по времени.

Если считать коэффициент диффузии постоянным во всем пространстве, то, используя интегроинтерполяционный метод, можно получить следующие выражения для операторов Λ_r , Λ_z :

$$\begin{aligned} \Lambda_r n_k &= \frac{1}{r_k} \left(r_k^- D \frac{n_k - n_{k-1}}{h_r} \right)_{r,k} \\ &= \frac{D}{r_k h_r^2} (r_k^+ n_{k-1} - 2r_k n_k + r_k^- n_{k+1}), \quad 0 < r_i \leq R, \\ \Lambda_r n_k &= D \left(\frac{\partial^2 n}{\partial r^2} \right)_k = \frac{D}{h_r^2} (n_{k-1} - 2n_k + n_{k+1}), \quad r = 0, \\ \Lambda_z n_i &= D \left(\frac{n_{i-1} - n_i + n_{i+1}}{h_z^2} \right), \end{aligned} \quad (9)$$

где $r_k^- = (r_k - 0.5h)$, $r_k^+ = (r_k + 0.5h)$, $h_r = R/N_r$ — шаг по радиусу, $h_z = L/N_z$ — шаг по длине, $n_{i,k} = n(r_k, z_i)$, $r_k = kh_r$, $z_i = ih_z$.

Система (8) замыкается граничными условиями типа (6) на боковой поверхности и на торцах цилиндра и преобразуется к виду

$$\frac{\partial n}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad D \frac{\partial n}{\partial r} \Big|_{r=R} = -\frac{sv_t}{2(2-s)} n, \quad (10a), (10b)$$

$$D \frac{\partial n}{\partial r} \Big|_{z=0} = -\frac{sv_t}{2(2-s)} n, \quad (10c)$$

$$D \frac{\partial n}{\partial r} \Big|_{z=L} = -\frac{sv_t}{2(2-s)} n. \quad (10d)$$

При $R = 0$ ставится условие, соответствующее отсутствию потока на оси цилиндра. Условие (10с) можно аппроксимировать выражением

$$D \frac{\partial n}{\partial z} \Big|_{z=0} = -\beta n,$$

$$D \frac{n_{1,k} - n_{0,k}}{h_z} = -\beta n_{0,k} - 0.5h_z \mu_{0,k} + h_z \frac{\bar{n}_{0,k} - n_{0,k}}{\Delta t}. \quad (11)$$

Здесь $\mu_{0,k} = (\Lambda_r n_{0,k} + F_{0,k} - \Lambda_{0,k} n_{0,k})$, $\beta = (sv_t)/2(2-s)$. Аналогичные соотношения получаются для условий (10b), (10с). Разностное условие (10а) записывается как

$$D \frac{\widehat{n}_{i,1} - \widehat{n}_{i,0}}{h_r/4} = 0.5h_r \mu_{i,0} + 0.5h_r \frac{\widehat{n}_{i,0} - \bar{n}_{i,0}}{\Delta t/2}, \quad (12)$$

где $\mu_{0,k} = -(\Lambda_z \bar{n}_{i,0} + F_{i,0} - A_{i,0} \bar{n}_{i,0})$.

Выражение (11), (12) для расчетов удобно представить в виде:

$$\bar{n}_{0,k} = r_1 \bar{n}_{1,k} + p_1, \quad \widehat{n}_{i,0} = r_3 \widehat{n}_{i,0} + p_3, \quad (13)$$

где

$$r_1 = \frac{D\Delta t}{(h_z^2 + D\Delta t + \beta h_z \Delta t)}, \quad p_1 = \frac{h_z n_{0,k} - \mu_{0,k} \Delta t}{(D\Delta t/h_z + \beta \Delta t + h_z)}, \quad (13a)$$

$$r_3 = \frac{4D\Delta t}{(4D\Delta t + h_r^2)}, \quad p_3 = \frac{\mu_{0,k} h_r \Delta t - h_r \bar{n}_{i,0}}{4D\Delta t + h_r^2}. \quad (13b)$$

Используя соотношения (9), (13), система уравнений (8) принимает вид (индекс по компонентам опущен)

$$\bar{a}_i \bar{n}_{i-1,k} - (\bar{a}_i + \bar{a}_{i+1} + 2 - A\Delta t) \bar{n}_{i,k} + \bar{a}_{i+1} \bar{n}_{i+1,k} = -\Lambda_r n_{i,k} \Delta t - 2n_{i,k} - F\Delta t \quad i = 1, N_z \quad k = 0, N_r,$$

$$\widehat{a}_k \widehat{n}_{i,k-1} - (\widehat{a}_k + \widehat{a}_{k+1} + 2 - A\Delta t) \widehat{n}_{i,k} + \widehat{a}_{k+1} \widehat{n}_{i,k+1} = -\Lambda_z n_{i,k} \Delta t - 2\bar{n}_{i,k} - F\Delta t \quad k = 1, N_r \quad i = 0, N,$$

$$\bar{n}_{i,0} = r_1 \bar{n}_{i,0} + p_1 \bar{n}_{i,0} = r_2 \bar{n}_{i,0} + p_2$$

$$\widehat{n}_{i,0} = r_3 \widehat{n}_{i,0} + p_3 \widehat{n}_{i,0} = r_4 \widehat{n}_{i,0} + p_4.$$

Здесь

$$\bar{a}_i = \bar{a}_{i+1} = \frac{D\Delta t}{h_z^2}, \quad \widehat{a}_k = \frac{D\Delta t r_k}{h_r r_k}, \quad \widehat{a}_{k+1} = \frac{D\Delta t r_k^+}{h_r r_k}. \quad (14)$$

Значения коэффициентов r_2, p_2 и r_4, p_4 легко находятся из формул (13a) соответствующей заменой $h, \mu, n_{i,k} (\bar{n}_{i,k})$. Система (14) решается для всех компонентов скалярными прогонами — сначала по длине цилиндра при каждом фиксированном значении радиуса r_k , затем вдоль радиуса при каждом значении z_i . Расчеты показывают, что решения ведут себя устойчиво при шаге по времени $\Delta t \leq 10^{-8}$ s.

Результаты

Численное моделирование физико-химических процессов проводилось для цилиндрического реактора с размерами $L = 3.88$ cm, $R = 1.25$ cm. Расчет проводился при общем давлении газа $p = 0.125$ Torr, температуре $T^\circ = 500$ K и частоте электрического поля $f = 13.56$ MHz. Концентрация электронов задавалась параметрически и составляла $n_e = 10^8$ cm⁻³.

Результаты вычислений представлены на рис. 2, где приведены концентрации силиановых радикалов и атомарного водорода в зависимости от времени. Видно, что такие компоненты, как SiH₂, SiH, быстро (≈ 0.001 s) выходят на равновесные концентрации, тогда как SiH₃ достигает равновесного значения за время порядка 0.01 s. Похожим образом ведет себя и атомарный водород. Отметим, что значительное содержание атомарного водорода в плазме совпадает с результатами [3] для PECVD-реактора диодной схемы. Другой важной особенностью является накопление Si₂H₆, Si₃H₈ и H₂ в объеме реактора (рис. 3). Распределения концентрации радикала SiH₃ по длине разрядной камеры для разных давлений представлены на рис. 4. Добавление аргона существенно влияет на концентрацию SiH₃. Реакция Ar^m + SiH₄ → SiH₃ + H + Ar, являясь дополнительным каналом разложения силана, увеличивает производство силана в сравнении с плазмой чистого силана (рис. 5). Однако время выхода SiH₃ на равновесный уровень

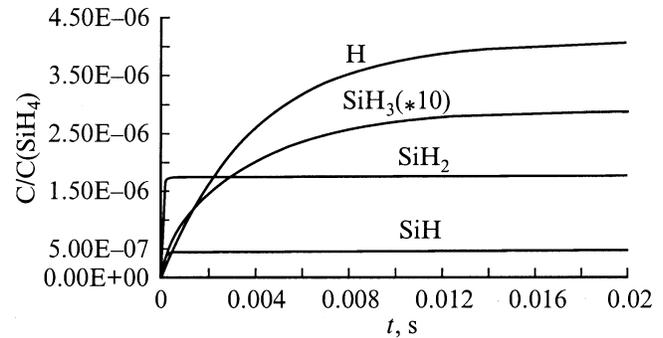


Рис. 2. Зависимости концентрации радикалов силана и водорода от времени.

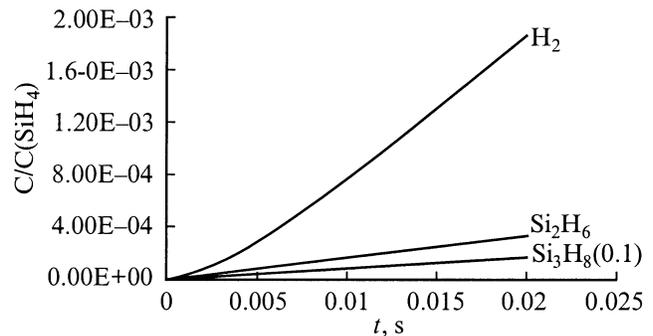


Рис. 3. Зависимость концентрации радикалов Si₂H₆; Si₃H₈ и H₂ от времени.

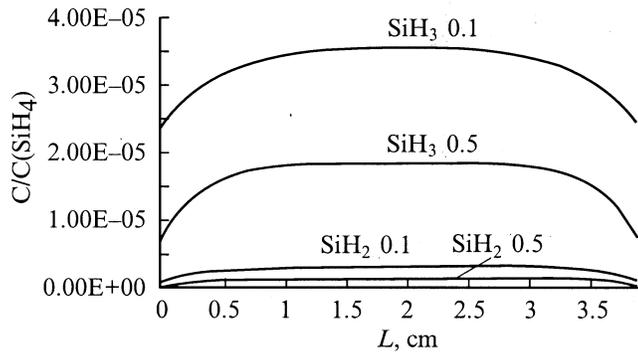


Рис. 4. Аксиальные профили концентраций радикалов. Числа 7 кривых — давление p , Торг.

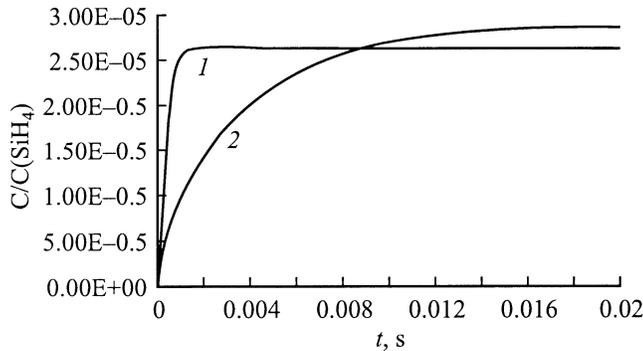


Рис. 5. Концентрации силана в зависимости от времени для газовых составов: 1 — 100% SiH_4 и 2 — (95% Ar + 5% SiH_4).

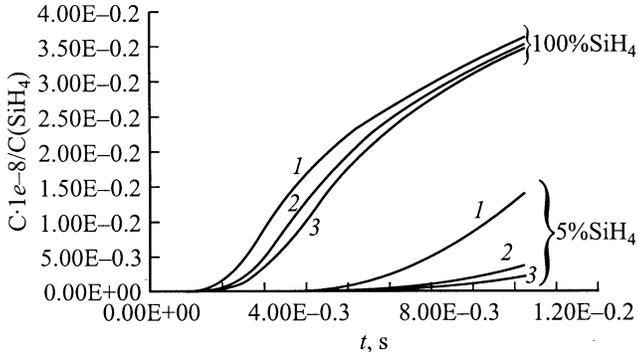


Рис. 6. Концентрация „пыли“ для разных давлений. p , Торг: 1 — 0.25, 2 — 0.125, 3 — 0.1.

в смеси Ar/SiH_4 увеличивается. Активное образование пыли, хотя и оказывает слабое влияние на кинетику основных компонент, может приводить к ухудшению качества пленок. На рис. 6 концентрация пыли указана для различных давлений в разряде чистого силана и в смеси 5% SiH_4 + 95% Ar . В аргон-силановой плазме относительное содержание пыли оказывается меньшим в 4 раза при высоких давлениях (0.25–0.5 Торг) и в 6–6.5 раз при давлениях около 0.1 Торг.

Список литературы

- [1] Шарифутдинов Р.Г., Бакланов М.Р., Аюпов Б.М. и др. // ЖТФ. 1995. Т. 65. Вып. 1. С. 181–185.
- [2] Струнин В.И., Худайбергенов Г.Ж. и др. // Тез. докл. X конф. по физике газового разряда. Рязань, 2000. С. 182–183.
- [3] Горбачев Ю.Е., Затевахин М.А., Каганович И.Д. // ЖТФ. 1995. Т. 66. Вып. 12. С. 89–110.
- [4] Бэрд Р. Явления переноса. М.: Мир, 1974.
- [5] Рудобахта С.П. Диффузия в химико-технологических процессах. М.: Химия, 1993.
- [6] Kushner M.J. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63. P. 2532.
- [7] Leroy O. et al. // Plasma Sources Sci. Technol. 1998. N 7. P. 348.
- [8] Горбачев Ю.Е. и др. // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 8. С. 77–85.
- [9] Дерюгин А.А., Кочетов И.В. и др. // ТВТ. 1985. Т. 23. № 3. С. 435–439.
- [10] Струнин В.И., Худайбергенов Г.Ж., Шкуркин В.В. // Тез. докл. II Всероссийской научно-технической конф. „Компьютерные технологии в науке, проектировании и производстве“. 2000. Ч. V. С. 29–31.
- [11] Струнин В.И., Худайбергенов Г.Ж., Шкуркин В.В. // Вестник ОмГУ. 2000. Вып. 2. С. 27–29.