

# Моделирование плазмохимической технологии травления в ВЧ разряде

Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт вычислительных технологий Сибирского отделения РАН,

[alg@eml.ru](mailto:alg@eml.ru)

**Аннотация** — В рамках гидродинамического приближения моделируется технология плазмохимического травления кремния в ВЧ-разряде  $CF_4/O_2$ . Расчеты выполнены с использованием математической модели неизотермического реактора, в которой движение газовой смеси описывалось уравнениями многокомпонентной гидродинамики с учетом конвективно-диффузионного переноса отдельных компонент смеси. Для определения характеристик низкотемпературной плазмы использовалась гидродинамическая модель аксиально-симметричного ВЧ-разряда в трехмоментном приближении, включающая решение уравнений непрерывности для электронов и положительных ионов, уравнение баланса энергии электронов и уравнение Пуассона для электрического потенциала. Исследовано влияние структуры ВЧ-разряда и многокомпонентной плазменной кинетики на производство и массообмен активных частиц в плазмохимическом реакторе травления.

**Ключевые слова** — плазмохимическое травление, плазмохимические реакторы, многокомпонентные смеси газов, математическое моделирование.

бенно 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 диффузионно-дрейфовому режиму разряда, который рассчитывается в гидродинамическом приближении [1], [2]. К преимуществам гидродинамического приближения можно отнести возможность использования традиционных численных схем, позволяющих достигать сравнительно небольшого времени расчета до выхода ВЧ-разряда на периодический режим.

В [3]-[6] на основе уравнений многокомпонентной гидродинамики с учетом конвективно-диффузионного переноса отдельных компонент смеси разработана численная модель неизотермического реактора, позволяющая исследовать тонкие физические эффекты процесса травления. В настоящей работе модель дополнена численными расчетами ВЧ-разряда и на их основе исследуется влияние структуры разряда на процесс плазмохимического травления кремния в  $CF_4/O_2$ .

## I. ВВЕДЕНИЕ

Плазмохимические реакторы травления являются важнейшим технологическим устройством в производстве микроэлектронных схем. Травление поверхности обрабатываемого материала производится химически активными частицами, генерируемыми в низкотемпературной плазме высокочастотного (ВЧ) разряда. Неоднородное распределение концентраций электронов и ионов в плазме ВЧ-разряда может существенно повлиять на скорость и однородность процесса плазмохимического травления. Из-за сложности моделирования ВЧ-разряда в общей постановке для учета возможного влияния его структуры в реакторных расчетах используют различные аналитические приближения, имеющие достаточно узкие области применения. В этой связи особую значимость приобретают численные расчеты ВЧ-разряда в двумерной постановке. С вычислительной точки зрения исследование физики ВЧ-разряда является сложной и трудоемкой задачей, осо-

## II. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Начально-краевая задача рассматривалась в цилиндрической области, где электродами являлись торцевые поверхности реакционной камеры. В данной области моделировался аксиально-симметричный ВЧ-разряд в трехмоментном приближении [1], [2]. Для нахождения внутренних характеристик плазмы решались уравнения непрерывности для электронов и положительных ионов. Введем безразмерные переменные:

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

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

тогда уравнения непрерывности принимают вид:

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

Здесь потоки электронов и ионов определяются формулами:

$$J_l^\xi = -s_l \text{Pe}_l \tilde{\mu}_l \rho_l \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \xi} - \frac{\partial \tilde{D}_l \rho_l}{\partial \xi},$$

$$J_l^\zeta = -s_l \text{Pe}_l \tilde{\mu}_l \rho_l \frac{\partial \tilde{\varphi}}{\partial \zeta} - \frac{\partial \tilde{D}_l \rho_l}{\partial \zeta},$$

$$s_l = \begin{cases} -1, & l = e \\ 1, & l = p \end{cases}.$$

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

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

Параметр  $\beta_l T$  имеет значение безразмерного времени:

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

Источниковый член вычислялся по формуле:

$$S_l = \begin{cases} \rho_e (\text{Da} R_i - R_a), & l = e \\ \rho_e \text{Da} R_i, & l = p \end{cases},$$

$$R_i = \exp\left[\left(1 - \frac{1}{g_e}\right) \frac{E_i}{kT_{e0}}\right], \quad R_a = \frac{\nu_a L^2}{D_{e0}}.$$

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 положи-

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

Электронная температура находилась из уравнения энергетического баланса электронов, в котором учитывался процесс электронной теплопроводности:

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

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

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:

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

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

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

где  $\varepsilon$  - диэлектрическая постоянная в вакууме.

Для уравнений (1)-(3) на границах расчетной области ставились следующие краевые условия. На поверхности электродов 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 электродах, а также на боковой стенке реактора полагалась постоянной. На оси симметрии задавались условия симметрии. На боковой стенке реактора (выходной кромке) для потенциала использовались мягкие краевые условия.

Решение данных уравнений является трудной вычислительной задачей из-за высокой нелинейности и сильной взаимосвязи уравнений. Кроме того, для задачи характерны достаточно большие числа Пекле, что требует применения специальных численных методов решения. Уравнения непрерывности для электронов и положительных ионов, а также уравнение электронной энергии аппроксимировались неявной экспоненциальной разностной схемой, предложенной Шарфеттером и Гуммелем [7]. В ней предполагалось, что потоки частиц, скорости дрейфа и коэффициенты диффузии постоянны между узлами разностной сетки. За счет выбора специальной аппроксимации потоков частиц схема обеспечивает их численно стабильные оценки 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 [8]. 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. При решении уравнения Пуассона использовалась конечно-разностная схема второго порядка аппроксимации по пространственным переменным. Численная дискретизация уравнений приводит к пяти-диагональным системам линейных уравнений, которые решались методом исключения Гаусса.

Рассматривался процесс плазмохимического травления кремния в плазме  $\text{CF}_4/\text{O}_2$ . Двумерная математическая модель неизотермического реактора, описывающая течение газовой смеси, процессы теплопереноса и многокомпонентную плазменную кинетику в неоднородном ВЧ-разряде, использовалась для моделирования реактора радиальной схемы [3]-[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. Плазмохимическая кинетика

включала 16 газофазных реакций диссоциации и рекомбинации и 8 гетерогенных реакций на подложке, в которых принимают участие 12 реагентов - F,  $\text{F}_2$ ,  $\text{CF}_2$ ,  $\text{CF}_3$ ,  $\text{CF}_4$ ,  $\text{C}_2\text{F}_6$ , O,  $\text{O}_2$ , CO,  $\text{CO}_2$ , COF,  $\text{COF}_2$ . 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  $\text{CF}_2$ ,  $\text{CF}_3$  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.

### III. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Исследовалось влияние структуры разряда на перенос нейтральных частиц, скорость и однородность травления образцов в плазме  $\text{CF}_4/\text{O}_2$  в зависимости от концентрации  $\text{O}_2$ . В расчетах выбирались следующие значения параметров [1], [2], [4], [5]: радиус электродов  $R = 30$  см, межэлектродное расстояние  $L = 3,5$  см, давление  $p = 0,5$  торр, расход газа  $Q = 200-800$   $\text{см}^3/\text{мин}$ , температура электродов  $T_s = 300$  К, ВЧ напряжение  $\phi_{\text{RF}} = 110$  В, частота активации  $f = 13,56$  МГц, плотность газа  $N = 3 \cdot 10^{16}$   $\text{см}^{-3}$ , средняя плотность электронов  $\bar{n}_{e0} = 6 \cdot 10^9$   $\text{см}^{-3}$ . Исходная газовая смесь подавалась с периферии к центру реактора. Добавка  $\text{O}_2$  в смеси  $\text{CF}_4/\text{O}_2$  изменялась в диапазоне 10-90%. Использовалось базовое значение параметра  $\alpha_s = 0,311$ , характеризующее интенсивность хемосорбции кислорода на кремний.

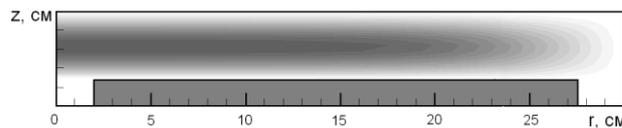
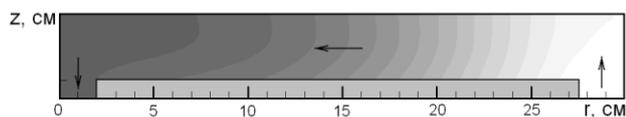


Рис. 1. Распределение электронной плотности в радиальном плазмохимическом реакторе, рассчитанное в гидродинамическом приближении ВЧ-разряда

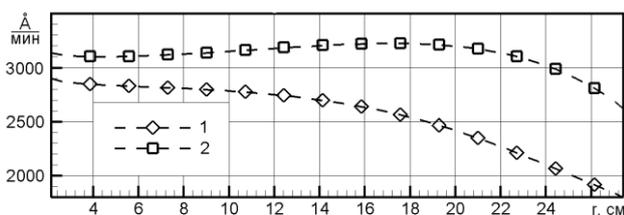
На рис. 1 представлено распределение электронной плотности в плазме ВЧ-разряда. Электронная плотность максимальна в центре реактора и монотонно спадает до нуля с приближением к границам плазменной области. Различие безразмерных времен  $\beta_1 T$  для электронов и положительных ионов составляет  $10^4$ . Это приводит к тому, что электроны двигаются значительно быстрее и откликаются на 13,56 МГц электрическое поле. Рассмотрение расчетной электронной плотности в различные моменты времени периода колебаний ВЧ напряжения показали, что изменение концентрации электронов в объеме реактора мало и становится заметным только вблизи электродов. Распределение ионной плотности практически повторяет структуру электронной плотности и не реагирует на высокочастотное поле.

Среднее значение электронной температуры в ВЧ-разряде составляет 5-6 эВ. Исключение составляют приэлектродные слои, где электронная температура достаточно резко меняется. Сравнение электронной температуры в различные моменты времени периода колебаний ВЧ напряжения показали, что электронная температура изменяется под действием высокочастотного поля в основном в приэлектродных слоях и практически не меняется 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 в плазме ВЧ-разряда. Параметры режима:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К, 30% доля O<sub>2</sub> в CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>. Направление подачи смеси – к центру реактора.

На рис. 2 представлено 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.



**Рис. 3.** Зависимость скорости спонтанного травления от радиуса образца: 1 – распределение электронной плотности, рассчитанное в гидродинамическом приближении ВЧ-разряда, 2 – однородное распределение электронной плотности. Параметры режима: см. Рис. 2.

Скорость спонтанного травления монотонно понижается вдоль радиуса образца (см. рис.3, кривая 1). Максимальное значение скорости травления совпадает с максимумом электронной плотности. С увеличением добавки кислорода O<sub>2</sub> скорость травления значительно возрастает вблизи внутренней кромки образца. Зависимость скорости спонтанного травления от радиуса образца при однородном распределении электронной плотности имеет меньший разброс по амплитуде и обеспечивает лучшую однородность травления образцов (см. рис. 3, кривая 2). Различие между зависимостями средних скоростей травления от добавки кислорода O<sub>2</sub> при однородном и неоднородном распределе-

ниях электронной плотности не превышает 5%. Положение максимума средней скорости травления в зависимости от добавки O<sub>2</sub> сохраняется и определяется только интенсивностью хемосорбции кислорода на кремнии [4], [5].

#### IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе двумерной гидродинамической модели ВЧ-разряда рассчитаны концентрации электронов и ионов в плазмохимическом реакторе травления. Исследовано влияние структуры ВЧ-разряда на скорость и однородность травления кремниевых образцов в смеси CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>. Показано, что однородность травления образцов существенно зависит от изменения электронной плотности в радиальном направлении, которым часто пренебрегают, рассчитывая разряд в одномерной постановке.

#### БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 11-01-00064), президентской программы поддержки ведущих научных школ РФ (проект № НШ-6293.2012.9).

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Graves D.B., Jensen K.F. A continuum model of DC and RF discharges // IEEE Transactions on plasma science. - 1986. - V. 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. - V. 73 - P. 3668 -3679.
- [3] Григорьев Ю.Н., Горобчук А.Г. Эффекты неизотермичности в плазмохимическом реакторе травления // Микроэлектроника. - 1998. - Т.27. - №4. - С. 294 - 303.
- [4] Григорьев Ю.Н., Горобчук А.Г. Особенности интенсификации травления кремния в CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> // Микроэлектроника. - 2007. - Т. 36. - № 4. - С. 283 - 294.
- [5] Горобчук А.Г., Григорьев Ю.Н. Влияние ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления кремния в CF<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> // Вычислительные технологии. - 2007. - Т. 12. - № 5. - С.51 - 66.
- [6] Grigoryev Yu.N., Gorobchuk A.G. Numerical Simulation of Plasma-Chemical Processing Semiconductors // Micro Electronic and Mechanical Systems / Ed. by Kenichi Takahata. - Publisher: In-Tech Education and Publishing. - 2009. - P. 185 - 210.
- [7] Scharfetter D.L., Gummel H.K. Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator // IEEE Transactions on electron devices. - 1969. - V. ED-16, - P. 64 - 77.
- [8] Ting Wei Tang. Extension of the Scharfetter-Gummel algorithm to the energy balance equation // IEEE Transactions on electron devices. - 1984. - V. ED-31. - P. 1912 - 1914.