

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЯ НЕЙТРАЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ ВЧ-ПЛАЗМЫ В АСИММЕТРИЧНОЙ ВАКУУМНОЙ КАМЕРЕ В ДИАПАЗОНАХ ЧИСЕЛ КНУДСЕНА $0,3 \leq Kn \leq 3$ ДЛЯ НЕСУЩЕГО ГАЗА\*

Описана математическая модель струйного течения ВЧ-плазмы при давлении 0,1–10 Па при числах Кнудсена  $0,3 \leq Kn \leq 3$  для несущего газа. Модель построена на основе статистического подхода для нейтральной компоненты ВЧ-плазмы с учетом влияния распределенного по объему источника тепла. Приведены результаты расчета течения нейтральной компоненты ВЧ-плазмы при наличии в струе образца в первом приближении с учетом распределенного по объему источника тепла.

*Ключевые слова:* аргон-силановая плазма, тлеющий разряд, высокочастотный разряд, осаждение тонких пленок, тонкие пленки аморфного кремния, плазменные струи, математическое моделирование, статистическое моделирование.

### Введение

В настоящее время среди прочих методов синтеза a-Si:H наиболее перспективными считаются струйные методы, которые различаются по способу активации газообразных реагентов [1; 2]. Главным преимуществом таких систем осаждения являются высокие скорости роста пленок, что выгодно отличает их от обычно используемых PECVD-реакторов [1]. Струйный плазмохимический метод [3] предполагает предварительное разложение кремнийсодержащего газа в емкостном ВЧ-разряде с последующим выносом продуктов разложения из разрядной зоны в вакуумную камеру через сопло. Такие системы позволяют реализовать достоинства как методов типа [3], так и традиционных способов, использующих PECVD-реакторы. Большой интерес представляет поведение радикалов силана и атомов буферного газа в свободно расширяющейся струе в процессе осаждения тонких пленок аморфного кремния. Важной задачей является поиск режимов и условий работы реактора струйной системы, определение распределения электронной компоненты и нейтральных частиц в струе. При управлении технологическими параметрами плазменного осаждения необходимо для учета особенностей течения представление процессов течения ВЧ-плазмы в вакуумной камере, по конфигурации близкой к вакуумной камере экспериментальной установки. Ввиду этого проведен расчет характеристик потока нейтральной компоненты плазмы в асимметричной конфигурации вакуумной камеры с образцом.

### Результаты и их обсуждение

Плазма ВЧ-разряда рассматриваемого типа имеет следующие характеристики: электронная температура 1–4 эВ, давление  $p = 0,1–10$  Па, степень ионизации  $10^{-7}–10^{-4}$ , концентрация электронов  $10^{15}–10^{19}$  м<sup>-3</sup>, температура атомов и ионов в плазменной струе  $(3–4) \cdot 10^3$  К, в плазменной струе  $(3,2–10) \cdot 10^2$  К. Течение нейтральной компоненты ВЧ-плазмы при данных параметрах происходит между переходным режимом течения и свободномолекулярным потоком [4]. Число Кнудсена для нейтрального газа находится в диапазоне  $0,3 \leq Kn \leq 3$ . При построении модели струйного течения ВЧ-плазмы при числах Кнудсена  $0,3 \leq Kn \leq 3$  ввиду незначительности следующего ряда эффектов для рассматриваемого типа плазмы пренебрежем процессами прилипания электронов, возбуждения атомов,

\* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 13-02-98033 а.

эффектом Холла, объемной рекомбинацией, образованием многозарядных ионов, проскальзыванием ионов, градиентом электронного давления, потерями энергии на излучение. Предположим, что основным механизмом рождения заряженных частиц является ударная ионизация, среда изотропная, не гиротропная, концентрация ионов равна концентрации электронов, температура ионов совпадает с температурой нейтральных атомов, скорость ионов совпадает со средней скоростью электронов.

Пусть струя ВЧ-плазмы вытекает в асимметричную цилиндрическую вакуумную камеру радиуса  $R_{vk}$  и длиной  $L_{vk}$  через входное отверстие (сопло Лавая, через которое свободно истекающая плазма попадает в затопленное пространство) плазмотрона радиуса  $R_{rk}$ , которое расположено на базовой плите вместе с областью откачки – выходным отверстием радиуса  $R_{out}$ . Для границ области течения введем следующие индексные обозначения: входное отверстие вакуумной камеры (сопло Лавая) – inlet, выходное – outlet, образец – body, остальные стенки вакуумной камеры – walls (рис. 1).

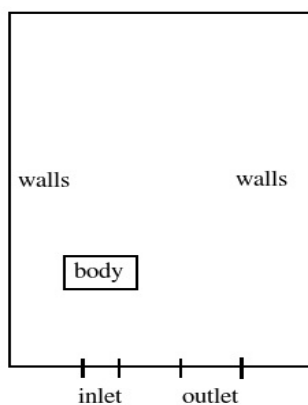


Рис. 1. Схема области расчета

Для расчета нейтральной компоненты струйного течения ВЧ-плазмы при числах Кнудсена  $0,3 < Kn < 3$  разработана кинетическая модель на основе уравнения Больцмана с учетом влияния распределенного по объему источника тепла [5; 6]. Данную модель можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + c \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + \tilde{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial c} &= S(f), \\ f(c, r, 0) &= f_0(c, r), \\ \tilde{F} &= -(1/m_a) \text{grad } W_T. \end{aligned} \quad (1)$$

В упругих столкновениях электроны передают атомам энергию

$$E_c = \frac{3}{2} K_b \delta v_c n_e (T_e - T_a). \quad (2)$$

Удельная мощность распределенного источника представима в виде:

$$W_T = \int E_c dV dt, \quad (3)$$

где  $dV$  – элемент объёма.

В выражениях используются следующие обозначения:  $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$  – функция распределения плотности частиц нейтральной компоненты плазмы в фазовом пространстве,  $\mathbf{c}$  и  $\mathbf{r}$  – векторы скоростей и координат соответственно,  $f_0$  – максвелловская функция распределения по скоростям,  $S(f)$  – интеграл столкновений,  $\tilde{F}$  – приведенная сила, действующая на нейтральные атомы в процессе упругих соударений с электронами,  $W_T$  – энергия, передаваемая нейтральным атомам электронами в процессе упругих соударений,  $n_e$  – концентрация электронов,  $\nu_c$  – частота упругих столкновений электронов с атомами и ионами,  $\sigma$  – проводимость плазмы,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $\delta = m_e/2m_a$ ,  $m_a$  – масса атома,  $m_e$  – масса электрона.

Для решения задачи (1)–(3) при числах Кнудсена  $0,3 \leq Kn \leq 3$  используется модифицированный метод прямого статистического моделирования Г. Бёрда [7], в котором учтено влияние распределенного источника тепла удельной мощностью (3) на нейтральную компоненту ВЧ-плазмы [8].

С помощью разработанной программы проведены расчеты основных газодинамических характеристик потока нейтральной компоненты ВЧ-плазмы для асимметричной вакуумной камеры. Расчеты показали, что при данных условиях время установления течения до стационарного состояния составило порядка 1 с.

Для моделирования течения использовалась модель асимметричной вакуумной камеры с размерами:  $R_{vk} = 20$  см, расстояние до подложки  $L_{tb} = 10$  см, высота подложки – 0,2 см, радиус входного отверстия  $R_{rk} = 1,25$  см. В расчетах применялись данные для аргона (поскольку в эксперименте используется смесь  $Ar + 5\%SiH_4$ , то основной вклад вносит главным образом аргон). На подложке установлен нагрев до 550 К.

На рис. 2–5 представлены результаты расчета течения нейтральной компоненты ВЧ-плазмы при расходе плазмообразующего газа  $Q = 10$  ст. см<sup>3</sup>/с. Температура на входе в камеру  $T_{inlet} = 370$  К, скорость потока на входе в камеру  $V_{inlet} = 550$  м/с.

Из рис. 2 видно, что модуль скорости убывает при приближении потока газа к телу (кривая 2), а за образцом модуль скорости увеличивается при вхождении потока в область откачки (кривая 3). По оси вакуумной камеры скорость при входе в камеру резко убывает с 550 м/с до 280 м/с (кривая 1), что связано с торможением молекул при входе в камеру и переходом кинетической энергии движения во внутреннюю, т. е. температура газа на входе резко возрастает с 370 К до 520 К (рис. 3). В области откачки (рис. 2, кривая 1) модуль скорости максимален и принимает значение 260 м/с, при подходе газа в зону откачки скорость постепенно возрастает (рис. 2, кривые 2, 3).

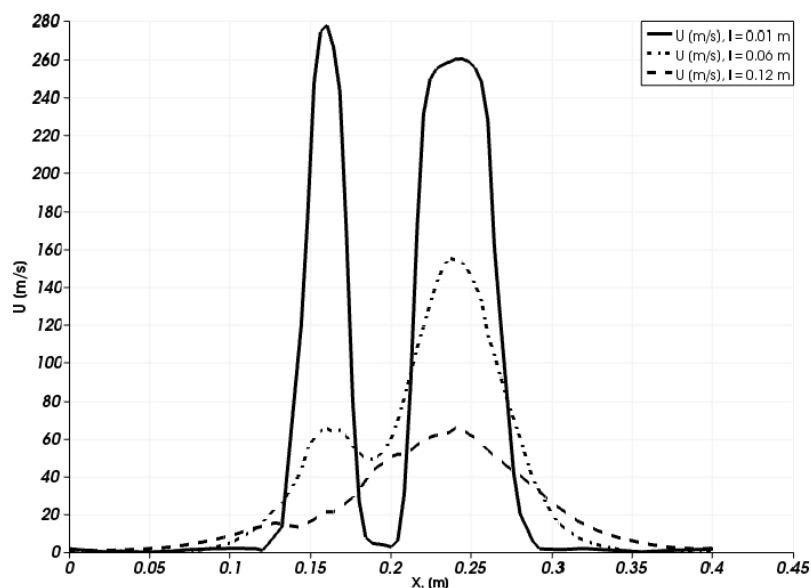


Рис. 2. Модуль скорости несущего газа в поперечном сечении струи при наличии образца в зависимости от расстояния от входного отверстия: 1 – сплошная, 2 – штрих-пунктирная, 3 – пунктирная

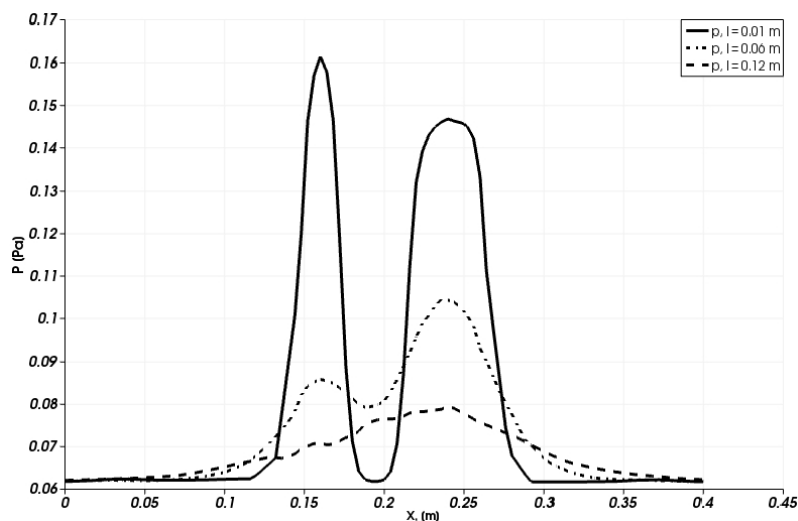


Рис. 3. Распределение давления  $p$  по поперечным срезам вакуумной камеры

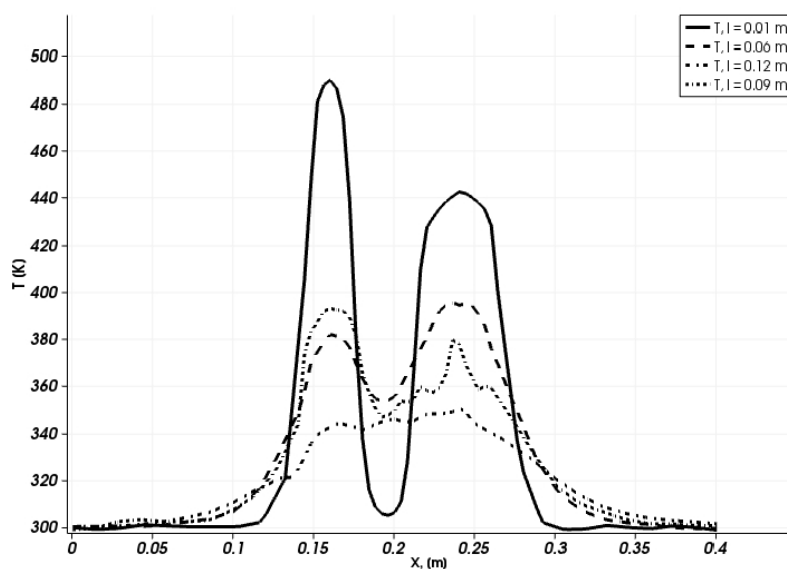


Рис. 4. Температура  $T$ (K) в поперечном сечении струи при наличии образца в зависимости от расстояния от входного отверстия

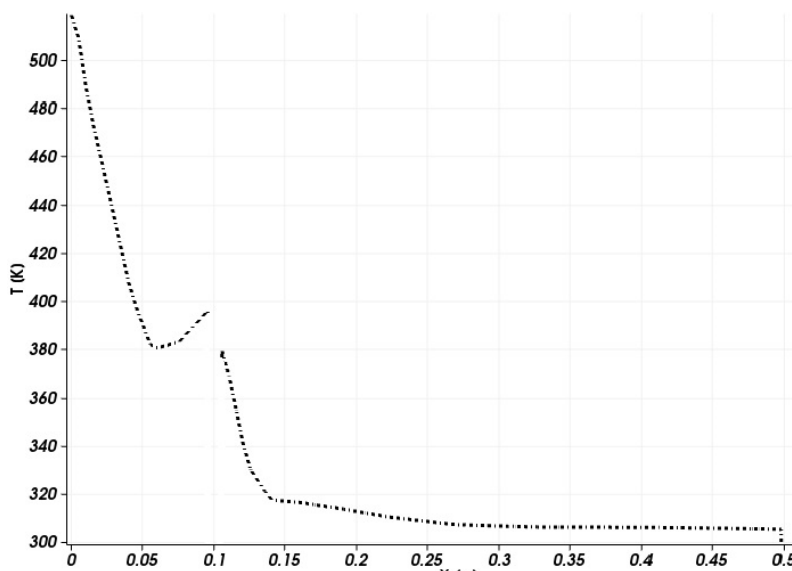


Рис. 5. Температура  $T$ (K) по оси вакуумной камеры

На рис. 3 видно, что давление на удалении 0,01–0,06 м от входного отверстия сначала падает, затем при подходе газа к образцу оно нарастает, что связано с торможением потока. За образцом давление увеличивается в сторону области откачки.

На рис. 4 показано распределение температуры по срезам вакуумной камеры по оси  $Oz$ . Из рис. 5 видно, что на входе в вакуумную камеру происходит резкий скачок температуры, а далее – понижение температуры нейтрального газа до 380 K (на расстоянии 0,06 м), затем плазма нагревается при подходе к подложке (это происходит за счет установленной температуры подложки), а далее за образцом температура нейтральной компоненты постепенно падает до температуры стенок камеры. В области откачки температура газа поднимается до 440 K, что связано предположительно с близостью входной зоны и области откачки в расчетной модели.

**Методика эксперимента**

Осаждение тонких пленок аморфного кремния проводилось на вакуумной установке ННВ 6.1. Плазма тлеющего разряда возбуждалась в плазмотроне диаметром 7 см, длиной 10 см. Давление в камере варьировалось в пределах 100–300 мТорр и контролировалось емкостным вакуумным датчиком SETRA 100. Тлеющий ВЧЕ-разряд возбуждался генератором АСГ-6b колебательной мощностью 600 Вт (напряженность поля  $E = 50$  В/см). Два пластинчато-роторных насоса и диффузионный насос откачивали вакуумную камеру до предельного остаточного давления  $5 \cdot 10^{-6}$ Торр. Стеклоянные подложки размером  $6 \times 6$  см проходили очистку с использованием кипящего раствора серной

кислоты и дистиллированной воды. Перед напылением подложки отжигались в вакуумной камере при температуре 200–300 °С. Расходомер УГФС-4 позволял контролировать поток рабочего газа в пределах 4–60 станд. см<sup>3</sup>/мин. После повышения давления в камере плазмотрона до рабочего диапазона зажигался тлеющий разряд. Время осаждения контролировалось с помощью заслонки.

Результаты измерений толщины пленок аморфного кремния от расстояния от центра пленки представлены на рис. 6. Осаждение проводилось для разных значений расстояния от сопла до подложки (30 и 50 мм), диаметр сопла составлял 3 мм, время осаждения – 20 минут. Хорошо видно, что для случая в 30 мм пленки имеют сильно неравномерную толщину вследствие неравномерности плотности плазменного потока, что видно и в расчете на рис. 3 (кривая 1) – в центре и по краям струи достаточный большой перепад давлений. Если расположить подложку на расстоянии 50 мм, перепад по толщине будет составлять примерно 30 %, что видно и в расчете на рис. 4 (кривая 2), где образуется область радиусом около 60 мм с небольшим перепадом давлений. Однако в данном случае скорость осаждения резко уменьшается, что объясняется снижением локальной плотности газа вблизи подложки. Для получения равномерных по толщине покрытий с неравномерностью толщины покрытия менее 5 % предлагается устанавливать не одно сопло, а матрицу сопел, расположенных так, чтобы газовые струи пересекались на 60 % расстояния от сопла до подложки [9].

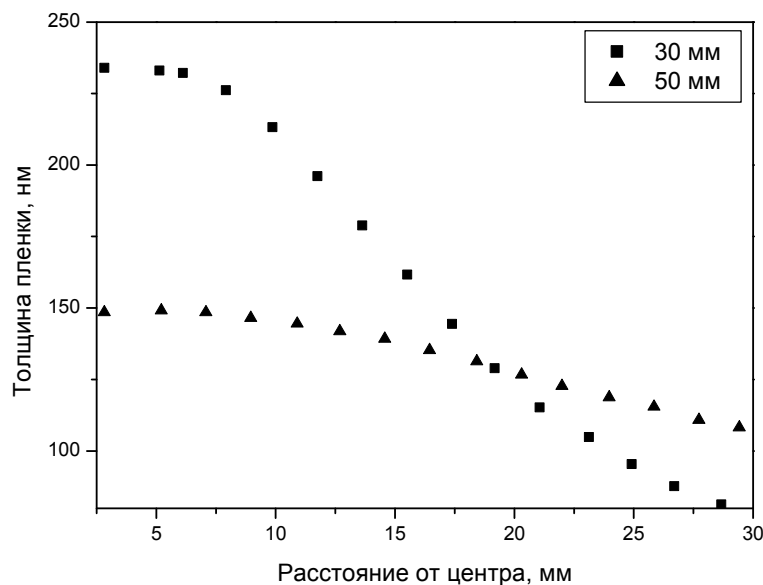


Рис. 6. Толщина пленки от расстояния от центра

### Выводы

Полученные закономерности струйного течения ВЧ-плазмы для асимметричной вакуумной камеры при давлении 0,1–10 Па дают качественную картину течения нейтральной компоненты ВЧ-плазмы для модели вакуумной камеры, близкой по конфигурации к экспериментальной, что позволяет детальнее понять картину течения ВЧ-плазмы в заданном диапазоне давлений. Для понимания влияния заряженной компоненты на подложку необходим дополнительный расчет электронной температуры.

### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Шарафутдинов Р. Г., Бакланов М. Р., Аюпов Б. М. и др. Особенности процессов осаждения и свойства слоев кремния, полученных струйным плазмохимическим методом с электронно-лучевой активацией газов // ЖТФ. 1995. Т. 65. № 1. С. 181–185.
- [2] Van de Sanden M.C.M., Severens R. J. et al. Plasma chemistry aspects of a-Si:H deposition using an expanding thermal plasma // J. Appl. Phys. 1998. Vol. 84 (5). P. 2426–2433.
- [3] Струнин В. И., Ляхов А. А., Худайбергенов Г. Ж., Шкуркин В. В. Моделирование процесса разложения силана в высокочастотной плазме // ЖТФ. 2002. Т. 72. № 6. С. 109–114.
- [4] Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М.: Наука, 1984. 518 с.
- [5] Шемахин А. Ю., Желтухин В. С. Расчет газодинамики струй ВЧ-плазмы пониженного давления // Уч. зап. Казан. ун-та. 2011. Т. 153. Кн. 4. С. 135–142.
- [6] Желтухин В. С., Шемахин А. Ю. Моделирование струйного течения высокочастотной плазмы при пониженных давлениях // Математическое моделирование. 2013. Т. 25. № 6. С. 64–71.
- [7] Бёрд Г. А. Молекулярная газовая динамика. М., 1981.
- [8] Абдуллин И. Ш., Желтухин В. С., Струнин В. И., Шемахин А. Ю., Худайбергенов Г. Ж., Хубатхузин А. А. Моделирование газодинамического истечения струи аргон-силановой плазмы в затопленное пространство // Вестн. Казан. технол. ун-та. 2013. Т. 16. № 19. С. 95–98.
- [9] Пат. 2188878 Российская Федерация, МПК<sup>7</sup> С 23 С 16/24, С 16/50, Н 01 L 21/205. Способ нанесения пленок аморфного кремния и устройство для его осуществления / Баранова Л. В. [и др.]. № 2000119336/28; заявл. 19.07.2000; опубл. 10.09.2002, Бюл. № 25. 5 с.: ил.