

На правах рукописи



Кобелев Антон Андреевич

**Анализ потоков ионов из ВЧ газового разряда, используемого для процессов
модификации поверхности твердого тела**

01.04.04 "Физическая электроника"

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург – 2019

Работа выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург.

Научный руководитель:

Смирнов Александр Сергеевич,

доктор физико-математических наук, профессор,

Санкт-Петербургский политехнический университета Петра Великого.

Официальные оппоненты:

Швейгерт Ирина Вячеславовна,

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник,

Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, г. Новосибирск.

Бакшт Федор Григорьевич,

доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник,

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург.

Ведущая организация: ФГБОУ «Санкт-Петербургский государственный университет»

Защита состоится 12 декабря 2019 г. в 15 час. 30 мин. в ауд. 305 на заседании диссертационного совета Д212.229.01 при Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого по адресу: 195251, Санкт-Петербург, ул. Политехническая 29, IV учебный корпус.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» и на сайте <https://www.spbstu.ru/dsb/0776-thesis.pdf>

Автореферат разослан " ____ " _____ 2019 г.

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 212.229.01

доктор технических наук, профессор



А.С. Коротков

Общая характеристика работы

Актуальность исследования

В настоящее время процессы плазменной обработки в высокочастотном индукционном (ВЧИ) и емкостном (ВЧЕ) разрядах широко используются на разных этапах высокотехнологичного промышленного производства. Травление и осаждение тонких пленок в ВЧ разряде применяются при изготовлении интегральных микросхем, солнечных элементов, полупроводниковых светодиодов и мощных усилителей для средств телекоммуникаций. В последние годы проводятся активные научные исследования и разработка процессов травления перспективных диэлектриков ZnO_2 , HfO_2 , ZrO_2 [1–3] и полупроводников Ga_2O_3 , $AlGaN$ и GaN [4–6] в ВЧ разрядах в сложной смеси газов. Разрабатываются методы очистки стенок газоразрядной камеры и подложки от загрязняющих элементов, что является важным требованием в высокотехнологичном производстве для современной микроэлектроники. Задача очистки поверхностей также актуальна в исследованиях по УТС и, в частности, для диагностики плазмы в токамаке ИТЭР [7,8]. Распыленные материалы стенок реактора загрязняют поверхности Mo , Rh зеркал и диэлектрических SiO_2 , Al_2O_3 окон в системах диагностики. Это приводит к деградации оптических характеристик элементов и ошибкам измерения параметров плазмы. Для восстановления рабочих характеристик оптических элементов диагностики в процессе работы токамака ИТЭР будет использоваться процедура физического распыления загрязняющих пленок в ВЧЕ разряде. При этом предполагается использование ВЧЕ разряда в инертных газах в двух рабочих режимах: без магнитного поля и в сильном магнитном поле ~ нескольких тесла, силовые линии которого наклонены под углом 5° к поверхности.

Разработка методов обработки в газовом разряде и проектирование соответствующих газоразрядных технологических установок основывается на ряде требований современных технологий. В частности, для травления основными требованиями являются высокая степень анизотропии и селективности процесса. При этом должна обеспечиваться минимальная степень повреждения структуры материалов и гладкая морфология поверхности. Более того, травление должно быть однородным по всей площади обрабатываемого образца. Процесс травления в ВЧ разряде в значительной мере определяется параметрами потока ионов и химически активных радикалов на поверхность твердого тела. В качестве основных параметров выделяют компонентный состав, величину потока, функцию распределения частиц по энергии и углу падения на поверхность образца. Частота и мощность ВЧ разряда, величина и направление внешнего магнитного поля, давление нейтрального газа, состав смеси газов и

конфигурация разрядного промежутка определяют параметры потока ионов и радикалов, и их пространственное распределение. Таким образом, разработка методов плазменного травления в ВЧ разряде является сложной многопараметрической задачей. Для решения данной задачи активно используется численное моделирование совместно с экспериментальными измерениями. В настоящее время благодаря развитию численных методов и компьютерной техники, численное моделирование газоразрядной плазмы позволяет получить более полную картину процессов, происходящих в ВЧ разряде в тех или иных условиях, сэкономить время и средства на проведение экспериментов. Наиболее простые в реализации компьютерные программы позволяют, как правило, проводить одномерный численный расчет параметров ВЧ разряда для одного сорта газа без учета химических реакций между нейтральными компонентами в объеме и на поверхности. Более сложные программы [9–11] и, в том числе, коммерческие (ESI CFD ACE+ и COMSOL), позволяют проводить двумерное и трехмерное численное моделирование в многокомпонентной смеси газов с учетом реальной геометрии технологической установки. При этом в расчетах также учитывается влияние потока нейтрального газа, его нагрева за счет протекания тока и в результате химических реакций на пространственное распределение параметров газоразрядной плазмы. Результаты расчета параметров потока ионов и химически активных радикалов на поверхность используются для разработки моделей, описывающих комплексный механизм травления с участием процессов физического распыления, адсорбции, десорбции и преобразования химических соединений на поверхности. В свою очередь, проверенные модели позволяют проводить расчеты оптимальных условий ВЧ разряда для конкретных технических требований к процессу травления.

Постановка цели и задач исследования

Целью настоящей работы является численный анализ параметров потока ионов и химически активных нейтральных частиц из ВЧ газовых разрядов, предназначенных для плазмохимического травления и физического распыления.

В рамках целей были сформулированы следующие задачи:

1. Численный расчет параметров ВЧЕ разряда в инертных газах He, Ne, Ar, Kr и Xe, применяемого для очистки оптических элементов в системах диагностики высокотемпературной плазмы в термоядерных реакторах;

2. Численный расчет компонентного состава ВЧИ разряда в BCl_3 и параметров потока ионов и химически активных радикалов на поверхность в зависимости от приложенного ВЧ напряжения к силовому электроду;
3. Численное моделирование методом PIC MCC приэлектродного слоя пространственного заряда на основе данных моделирования ВЧИ разряда в BCl_3 в гидродинамическом приближении;
4. Численное моделирование методом PIC MCC приэлектродного слоя пространственного заряда ВЧЕ разряда в сильном магнитном поле, линии которого наклонены к поверхности электрода под произвольным углом;
5. Численное моделирование движения моноэнергетического пучка ионов в многосеточном энергоанализаторе задерживающего потенциала с квадратными и шестиугольными ячейками при различных значениях напряжения и расстояния между сетками, размера, взаимного сдвига и поворота ячеек сеток относительно друг друга.

Научная новизна и практическая ценность

Впервые проведено численное моделирование ВЧИ разряда в BCl_3 с приложенным ВЧ напряжением на подложке. Предложена химическая модель, описывающая режим осаждения пленки V_xCl_y на поверхности GaN, промежуточный режим очистки поверхности от V_xCl_y без травления материала GaN, и режим реактивного ионного травления GaN в BCl_3 плазме ВЧИ разряда.

Впервые проведено численное моделирование движения замагниченных ионов в приэлектродном слое ВЧЕ разряда в магнитном поле, наклоненном к поверхности под произвольным углом, для случая, когда толщина слоя значительно превышает ларморовский радиус ионов. Сформулирован критерий существования магнитного слоя внутри приэлектродного слоя пространственного заряда ВЧЕ разряда.

Впервые рассчитаны функции распределения по энергии и углу падения на поверхность для ионов He^+ в зависимости от величины и угла наклона магнитного поля, что позволяет проводить расчет коэффициента распыления бериллия с поверхности Mo или Rh зеркал в гелиевой плазме ВЧЕ разряда в магнитном поле.

Проведен трехмерный численный расчет аппаратной функции 4-х сеточного энергоанализатора задерживающего потенциала, в котором ячейки сеток представлены в виде квадратов и правильных шестиугольников. Впервые показано, что конструкция прибора со случайным сдвигом и поворотом ячеек

сеток относительно друг друга является оптимальной для проведения измерений энергетического спектра ионов, если апертура составляет более десяти периодов сетки с наибольшим размером ячеек.

Методы исследования

Основными методами исследования являются численное моделирование ВЧИ и ВЧЕ разрядов низкого давления в гидродинамическом приближении и численный расчет ВЧ слоя пространственного заряда методом PIC MCC.

Основные положения, выносимые на защиту

На защиту выносятся следующие положения:

1. При скользящих углах наклона линий магнитного поля к поверхности, пик функции распределения замагниченных ионов по энергии и углу становится значительно уширенным и смещается в область низких энергий и углов падения на поверхность;
2. В приближении движения замагниченных ионов с постоянной длиной пробега в наклоненном магнитном поле столкновительная форма закона Чайлда-Ленгмюра для ВЧ слоя модифицируется с коэффициентом $\cos(\varphi)$;
3. Критический угол наклона линий магнитного поля, при котором формируется магнитный слой внутри приэлектродного ВЧ слоя, определяется арктангенсом от отношения длины свободного пробега к ионному циклотронному радиусу;
4. Пороговая энергия для удаления пленки V_xCl_y с поверхности и инициация реактивного ионного травления GaN под действием потока ионов и химически активных радикалов из ВЧИ разряда в BCl_3 составляет 30 и 60 эВ, соответственно. Промежуточный режим обработки GaN без травления реализуется в интервале энергий ионов $30 \div 60$ эВ.
5. Уширение функции распределения ионов по энергии в многосеточном энергоанализаторе в большей мере определяется провисанием потенциала в ячейках анализирующей сетки;
6. Наименьшее искажение функции распределения ионов по энергии внутри многосеточного энергоанализатора достигается при случайной ориентации (поворот или сдвиг) ячеек сеток друг относительно друга. Для варианта со случайным поворотом ячеек сеток апертура энергоанализатора должна составлять более 10 периодов сетки с наибольшим размером ячеек.

Достоверность научных результатов

Достоверность научных результатов, адекватность использованных моделей были проверены путем сравнения с опубликованными в литературе данными численного моделирования и экспериментальных измерений.

Апробация результатов

Полученные результаты были представлены на следующих научных конференциях и семинарах:

1. 10th International Vacuum Electron Sources Conference Proceedings, Russia, St. Petersburg, June 30 – July 4, 2014.
2. 16th Russian Youth Conference on Physics of Semiconductors and Nanostructures, Opto- and Nanoelectronics, St. Petersburg, Nov. 24-28, 2014.
3. 69th Gaseous Electronics Conference, Bohum, Germany 2016.
4. 16th International Conference on Plasma-Facing Materials and Components for Fusion Applications, Neuss/Düsseldorf, Germany, 16th - 19th May 2017.
5. 33th International Conference on Phenomena in Ionized Gases Proceedings, Estoril, Portugal, July 9-14, 2017.
6. Семинар кафедры физики плазмы Санкт-Петербургского политехнического университета имени Петра Великого, 2019.
7. Семинар в ООО "Коддан Текнолоджис", 2019.

Список публикаций

Полученные результаты опубликованы в следующих рецензируемых научных изданиях:

1. Kobelev A.A, Barsukov Yu.V, Andrianov N.A and Smirnov A.S. Boron trichloride plasma treatment effect on ohmic contact resistance formed on GaN-based epitaxial structure // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. –Vol. 586.
2. Razdobarin A.G., Dmitriev A.M., Bazhenov A.N., Bukreev I.M., Kochergin M.M., Koval A.N., Kurskiev G.S., Litvinov A.E., Masyukevich S.V., Mukhin E.E., Samsonov D.S., Semenov V.V., Tolstyakov S.Yu., Andrew P., Bukhovets V.L., Gorodetsky A.E., Markin A.V., Zakharov A.P., Zalavutdinov R.Kh., Chernakov P.V., Chernozumskaya T.V., Kobelev A.A., Miroshnikov I.V. and Smirnov A.S. RF discharge for in situ mirror surface recovery in ITER // Nuclear Fusion. – 2015. – Vol. 55.

3. Kobelev A., Andrianov N., Barsukov Yu. and Smirnov A. Boron Trichloride Dry Etching. Chapter. – Encyclopedia of Plasma Technology. CRC Press Taylor & Francis Group, 2016.
4. Андрианов Н. А., Кобелев А. А., Смирнов А. С., Барсуков Ю. В. и Жуков Ю. М. Влияние обработки поверхности в BCl_3 плазме на формирование омических контактов к структурам AlGaIn/GaN // Журнал технической физики. – 2017. – Т. 87.
5. Andrianov N.A., Kobelev A.A., Smirnov A.S., Barsukov Yu.V. and Zhukov Yu. M. Influence of surface processing in a BCl_3 plasma on the formation of Ohmic contacts to AlGaIn/GaN structures // Technical Physics. – 2017. – Vol. 67.
6. Landheer K., Kobelev A.A., Smirnov A.S., Bosman J., Deelen S., Rossewijn M., de Waal A., Poulios I., Benschop A., Schropp R., and Rath J. Laser-cut molybdenum grids for a retarding field energy analyzer // Review of Scientific Instruments. – 2017. – Vol. 88.
7. Кобелев А.А., Андрианов Н.А., Хилькевич Е.М., Черноизюмская Т.В., Смирнов А.С. Многосеточные энергоанализаторы задерживающего потенциала для измерения функции распределения ионов по энергиям из плазмы высокочастотного емкостного разряда // Успехи прикладной физики. – 2017. – Т. 5.
8. Dmitriev A.M., Babinov N.A., Bazhenov A.N., Bukreev I.M., Kochergin M.M., Koval A.N., Kurskiev G.S., Litvinov A.E., Masyukevich S.V., Mukhin E.E., Razdobarin A.G., Samsonov D.S., Solokha V.V., Tolstyakov S.Yu., Andrew P., Leipold F., Shigin P.A., Reichle R., Bukhovets V.L., Gorodetsky A.E., Markin A.V., Zakharov A.P., Zalavutdinov R.Kh, Chernakov An.P., Chernakov Al.P., Chernakov P.V., Chernozumskaya T.V., Kobelev A.A., Smirnov A.S. and Marzinovsky I.A. In situ plasma cleaning of ITER diagnostic mirrors in noble-gas RF discharge // Physica Scripta. – 2017. – Vol. T170.
9. Кобелев А.А., Андрианов Н.А., Барсуков Ю.В., Смирнов А.С., Численное моделирование режимов обработки поверхности GaN в BCl_3 -плазме высокочастотного индукционного разряда // Успехи прикладной физики. – 2018. – Т. 6.
10. Kobelev A., Babinov N., Barsukov Yu., Chernozumskaya T., Dmitriev A., Mukhin E., Razdobarin A. and Smirnov A. Collisional RF sheath in capacitive discharge in strong oblique magnetic field // Physics of Plasmas. – 2019. – Vol. 26.

Личный вклад автора

Представленные в диссертации результаты были получены непосредственно автором. Автором проведены численные расчеты параметров ВЧ разрядов с использованием коммерческого кода CFD-ACE+. Разработанный автором код был использован для проведения численного моделирования ВЧ слоя пространственного заряда в произвольном магнитном поле. Автором проведены тесты коммерческого кода CFD-ACE+ и кода, реализованного на C++. Постановка целей и задач исследования, обсуждение и обработка полученных результатов осуществлялась автором совместно с научным руководителем.

Содержание диссертационной работы

Во **введении** рассмотрены актуальность, цели и задачи исследования в рамках диссертационной работы. Приведены результаты, представляющие научную новизну, практическую ценность, обоснована достоверность научных результатов и представлены положения, выносимые на защиту. Приведен список семинаров и конференций, на которых были представлены результаты исследования. Представлен список публикаций автора диссертации в рецензируемых научных изданиях.

В **первой главе** представлен обзор литературы по численным методам моделирования ВЧ газовых разрядов в различных приближениях. Особое внимание отведено рассмотрению проблем численного моделирования разряда в сложной смеси молекулярных газов. Рассмотрены два основных подхода к определению плотности тока и функции распределения ионов на поверхность твердого тела, а именно, численное моделирование траекторий движения ионов в рамках гибридного расчета и экспериментальное измерение с помощью энергоанализатора задерживающего потенциала. Рассмотрены существующие численные модели приэлектродного слоя пространственного заряда, в том числе, в присутствии внешнего сильного магнитного поля, наклоненного к поверхности электрода под углом. Для энергоанализаторов задерживающего потенциала выделены основные факторы, влияющие на точность экспериментального измерения потока ионов из ВЧЕ разряда без магнитного поля.

Вторая глава посвящена расчетам параметров потока ионов из ВЧЕ разряда, предназначенного для очистки оптических элементов систем диагностики параметров плазмы в токамаке ИТЕР. Рассмотрены два основных рабочих режима очистки в газовом разряде с помощью ионной бомбардировки: без магнитного поля и в сильном магнитном поле в несколько тесла. Разработан код для численного моделирования методом Particle-In-Cell Monte Carlo Collisions ("PIC MCC") [12] приэлектродного слоя пространственного заряда и расчета функций распределения ионов по энергии и углу (ФРИЭ и ФРИУ) в произвольном однородном в пространстве магнитном поле. Для режима без магнитного поля вычислены ФРИЭ, ФРИУ из ВЧЕ разряда в неоне на основе данных из самосогласованного численного моделирования. В частности, на рисунке 1а представлено сравнение расчетных и экспериментальных данных в тестовой задаче по распылению золотой пленки ионами Ne^+ . В главе приведены результаты расчетов ФРИЭ на ВЧ электроде и коэффициентов распыления в различных инертных газах на основе экспериментальных данных о средних по ВЧ периоду плотности ионного тока J_{ion} и падении потенциала в слое $\langle U_{sh} \rangle$. Показано, что наиболее эффективное удаление Be пленок с поверхности зеркала происходит в

ВЧЕ разряде в гелии для диапазона частот 80–100 МГц. На рисунке 1б приведены соответствующие отношения коэффициентов распыления бериллия к молибдену для различных газов.

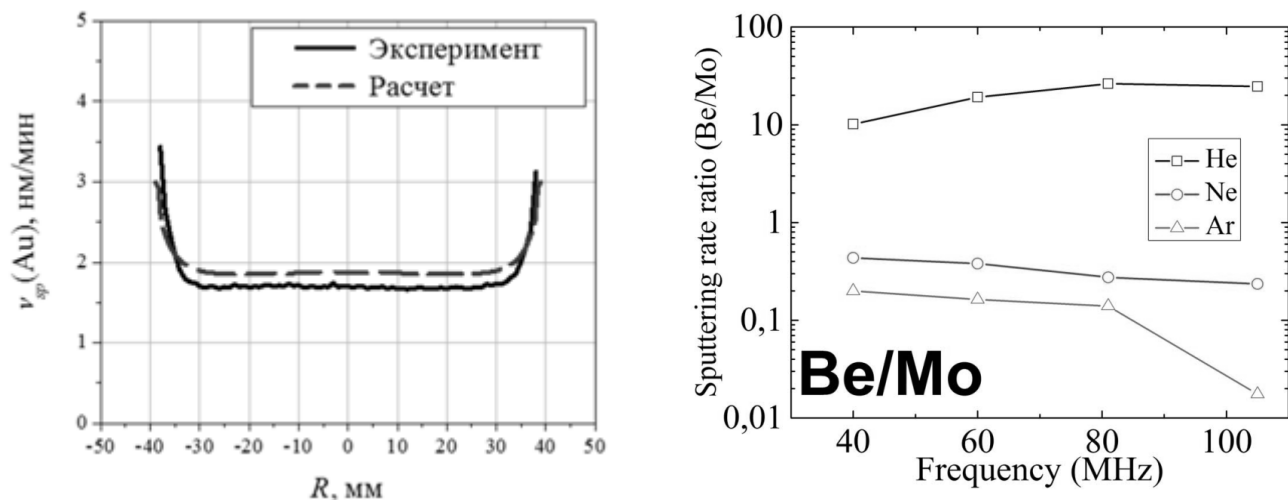


Рисунок 1: а) вычисленный и измеренный профиль распыления золота в ВЧЕ разряде в неоне; б) вычисленное отношение скоростей распыления бериллия и молибдена в различных инертных газах

Самосогласованный численный расчет параметров ВЧЕ разряда в магнитном поле требует пространственного разрешения в трех направлениях и, следовательно, большого количества вычислительных ресурсов. Поэтому была разработана численная модель слоя пространственного заряда для получения качественной картины движения ионов и оценки влияния магнитного поля и угла наклона магнитных линий φ на распределение по энергии и углу. В главе приведены результаты расчета функций распределения по энергии и углу падения на поверхность для ионов He^+ в зависимости от величины и угла наклона магнитного поля. На рисунке 2 представлены результаты расчетов при фиксированном магнитном поле 1.5 Т, давлении нейтрального газа 15 мТор, среднем падении потенциала в ВЧ слое $\langle U_{sh} \rangle = 75$ В и толщине слоя $L_{sh} = 6.3$ мм. С ростом угла наклона линий магнитного поля φ увеличивается длина пройденного ионом пути в слое и, следовательно, вероятности столкновения с нейтральными частицами. Как следствие, это приводит к значительному росту вторичных пиков ФРИЭ в области низких энергий и снижению основного пика вблизи $e\langle U_{sh} \rangle$.

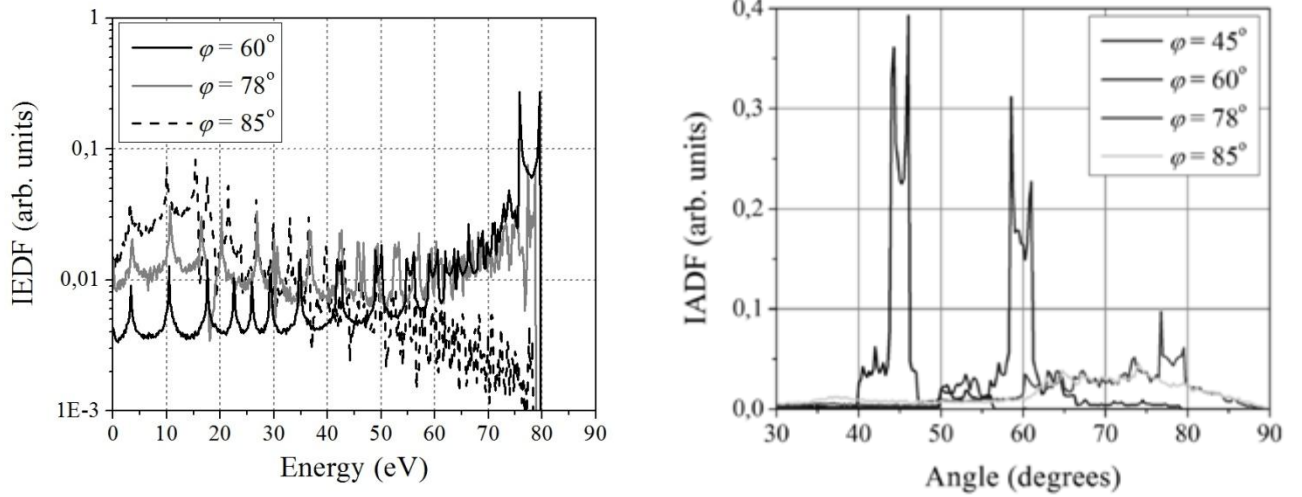


Рисунок 2: Вычисленные при различных углах наклона линий магнитного поля функции распределения ионов He^+ : а) по энергии; б) по углу падения на поверхность. Расчет проведен при $B = 1.5$ Т, $L_{sh} = 6.3$ мм, $\langle U_{sh} \rangle = 75$ В и $p = 15$ мТор

Показано, что замагниченные ионы He^+ ускоряются в ВЧ слое вдоль линий магнитного поля с постоянной длиной пробега, ионная плотность тока в ВЧ слое изменяется пропорционально $\langle U_{sh} \rangle^{3/2} \cdot L_{sh}^{-5/2} \cos(\varphi)$ и практически не зависит от магнитного поля. Следовательно, справедлива модификация столкновительной формы закона Чайлда-Ленгмюра [13] с коэффициентом $\cos(\varphi)$:

$$J_{ion} = 1.68 \varepsilon_0 \left(\frac{2e\lambda_{ia}}{M_i} \right)^{1/2} \frac{\langle U_{sh} \rangle^{3/2}}{L_{sh}^{5/2}} \cos(\varphi) \quad (1)$$

Пропорциональность тока ионов $\cos(\varphi)$ означает, что замагниченные ионы ускоряются в ВЧ слое пространственного заряда преимущественно вдоль линий магнитного поля. При этом в интервале малых углов φ меньше некоторого критического угла φ_{cr} ионы попадают на электрод под углом $\vartheta \approx \varphi$. На рисунке 3 представлены результаты расчетов ионной плотности тока J_{ion} как функции $\langle U_{sh} \rangle^{3/2} \cdot L_{sh}^{-5/2} \cos(\varphi)$. Коэффициент пропорциональности $K_1 = 5.07 \cdot 10^{-9}$. Приравнявая коэффициент K_1 к $1.68 \varepsilon_0 \left(\frac{2e\lambda_{ia}}{M_i} \right)^{1/2}$ получаем среднюю длину пробега ионов He^+ в ВЧ слое $\lambda_{ia} = 7.2$ мм.

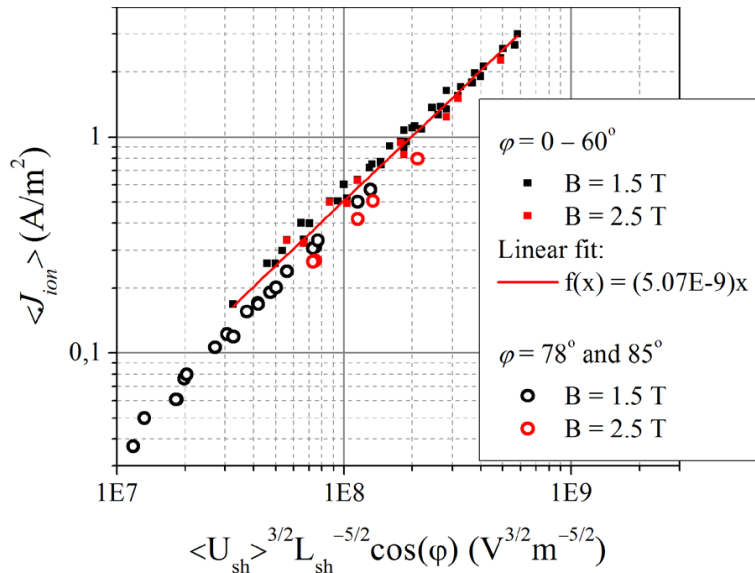


Рисунок 3: Плотность ионного тока как функция $\langle U_{sh} \rangle = 75 \div 200$ В, $L_{sh} = 4 \div 10$ мм, $\varphi = 0 \div 85^\circ$, $B = 1.5$ и 2.5 Т. Давление зафиксировано $p = 15$ мТорр.

Показано, что при фиксированном $\langle U_{sh} \rangle = 75$ В, $B = 1.5$ Т, $p = 15$ мТорр и углах наклона больше критического $\varphi_{cr} \approx 70^\circ$ происходит формирование магнитного слоя внутри ВЧ слоя пространственного заряда. Формирование магнитного слоя происходит когда ионы движутся по циклотронным орбитам, пересекающим электрод [14] и достигают поверхности поперек линий магнитного поля за время $\sim \omega_{ci}^{-1}$ существенно меньшее, чем время движения вдоль линий. Таким образом, выполняется следующее неравенство:

$$\left\langle \frac{V_{||}}{V_{\perp}} \right\rangle > ctg(\varphi) \quad (2)$$

Резонансная перезарядка ионов He^+ на нейтральных атомах приводит к существенному росту поперечной к магнитным линиям компоненты скорости. Транспорт ионов вдоль линий магнитного поля обусловлен столкновительным движением. Таким образом, для ситуации движения ионов в собственном газе с постоянной длиной пробега λ_{ia} критический угол φ_{cr} можно определить как:

$$arctg(\varphi_{cr}) \approx \frac{\lambda_{ia}}{\rho_{ci}} \quad (3)$$

Результаты расчетов функций распределения ионов He^+ по энергии и углу падения на поверхность твердого тела позволяют проводить расчет коэффициента распыления бериллия с поверхности Мо, Rh зеркал и SiO_2 окон. Использование численного моделирования ВЧ слоя в произвольном магнитном поле совместно с экспериментальными измерениями ионной плотности тока и падения потенциала в слое позволят провести разработку и оптимизацию процесса очистки ВЧЕ рядом в гелии оптических элементов в токамаке ИТЕР.

В третьей главе представлены результаты численного исследования свойств ВЧИ разряда в BCl_3 с дополнительным ВЧ напряжением на подложке с обрабатываемым образцом и анализа параметров потока ионов, химически активных нейтральных компонентов на поверхность. За основу были взяты технические характеристики газоразрядной установки Corial 210D. На момент проведения диссертационного исследования данная установка использовалась для изучения влияния обработки ВЧИ разрядом в смеси BCl_3/Ar на сопротивление омического контакта, сформированного на поверхности GaN [15].

Для описания газового разряда в BCl_3 была разработана численная модель, основанная на данных по элементарным процессам ионизации, возбуждения колебательных и электронных уровней прямым электронным ударом для молекулы BCl_3 и продуктов диссоциации $\text{BCl}_{x=0-2}$ и Cl. Дополнительно были включены процессы образования и гибели отрицательных ионов Cl и нерезонансная перезарядка ионов. Подвижность электронов вычислялась на основе транспортного сечения столкновений электронов с нейтральными частицами BCl_3 . Для вычисления транспортного сечения и подвижности ионов использовались данные о поляризуемости и/или дипольного момента Cl, BCl_2 и BCl_3 , как основных нейтральных компонентов BCl_3 плазмы.

На рисунке 4а представлены зависимости усредненного по ВЧ периоду $T_2 = 1/f_2$ падения потенциала в приэлектродном слое вблизи ВЧ электрода и потенциала плазмы относительно заземленного электрода от амплитуды ВЧ напряжения. При малых величинах $eU^{p-p}/2T_e \ll 1$ среднее падение потенциала в приэлектродных слоях практически совпадает с величиной плавающего потенциала, $\langle U_{sh} \rangle = 18.7$ В, $\langle U_{pl} \rangle = 17.1$ В и $U_{fl} = 15.4$ В. Дальнейший рост амплитуды ВЧ напряжения U_{rf} до 150 В приводит к возрастанию среднего потенциала в слоях. Различие площадей ВЧ и заземленного электродов приводит к проявлению эффекта асимметрии разряда и изменению постоянной составляющей на ВЧ электроде U_{DC} от 0 до -88.8 В (рисунок 4а, красные круги). При этом потенциал плазмы возрастает до $\langle U_{pl} \rangle = 46$ В (рисунок 4а, черные квадраты). На рисунке 4б представлены зависимости суммарной плотности ионного тока J_{ion} и радикалов BCl_2 , Cl от амплитуды ВЧ напряжения U_{rf} . Вклад основного иона BCl_2^+ составляет 70% от суммарной плотности тока. Значение J_{ion} на ВЧ электрод возрастает в 1.29 раза с ростом U_{rf} от 0 до 150 В (рисунок 4б синие квадраты). Величина U_{rf} в данном диапазоне слабо влияет на концентрацию плазмы и, следовательно, величину ионного тока, а пробой и поддержание ВЧИ разряда в большой мере обеспечивается вихревым электрическим полем. Аналогично, потоки основных радикалов BCl_2 и Cl слабо, ~

в 1.2 раза, возрастают с ростом амплитуды ВЧ напряжения (рисунок 4б, черные и красные круги). На основе полученных данных о среднем падении потенциала в слое и плотности потока ионов был проведен расчет методом PIC МСС динамики движения ионов в ВЧ слое и функции распределения падающих на подложку ионов.

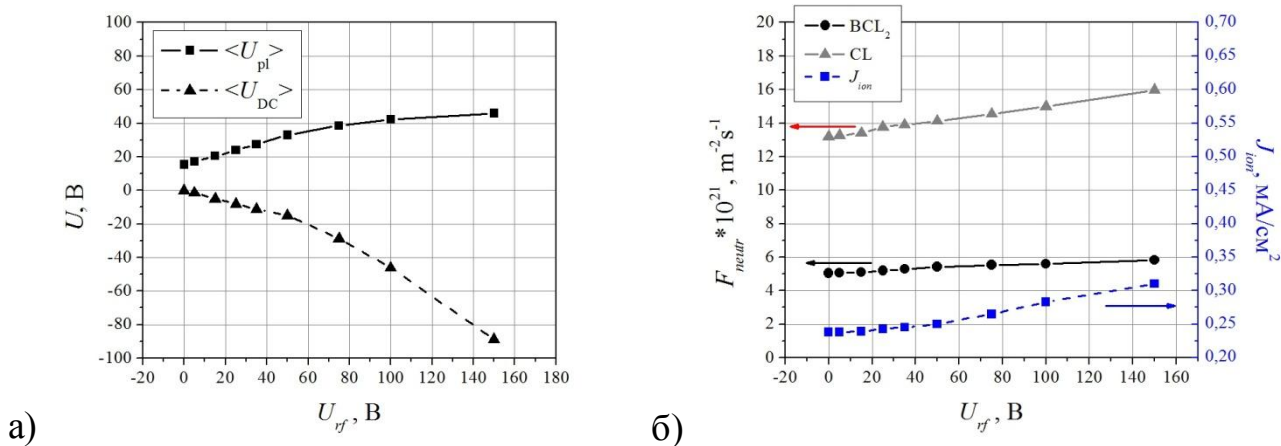


Рисунок 4. Зависимости от амплитуды ВЧ напряжения U_{rf} усредненного по ВЧ периоду: а) падения потенциала в приэлектродном слое; б) потока ионов и радикалов на подложку

Результаты расчетов ВЧИ разряда в BCl_3 при различных значениях напряжения смещения были сопоставлены с результатами экспериментальных измерений для GaN при аналогичных разрядных условиях [15]. На основе сравнения разработана модель воздействия плазмы ВЧИ разряда в BCl_3 на GaN, включающая основные процессы, происходящие на покрытой оксидом поверхности под действием потока ионов и радикалов. Существование поверхностного слоя поверхностного оксида Ga-O на GaN создает условия для осаждения пленки B_xCl_y , т.к. радикалы BCl_x из BCl_3 плазмы способны создавать прочное соединение $(BOCl)_3$ с кислородом. Если средняя энергия ионов $\langle \epsilon_{ion} \rangle$ выше некоторого порога $\epsilon_{thr}^{B_xCl_y}$, то ионная бомбардировка приводит к очистке поверхности в виде соединений $(BOCl)_3$, $B_3O_3Cl_2$, B_2OCl_3 , B_2OCl_4 , B_2OCl_5 и B_2Cl_4 . Дальнейший рост энергии ионов приводит к инициации реактивного ионного травления GaN в виде летучих соединений GaCl и N_2 . На рисунке 5 представлены экспериментально измеренная скорость травления GaN [15] и результаты численного расчета скорости травления, ER^{calc} , и состава поверхности θ . Абсолютное значение скорости роста пленки B_xCl_y , DR^{calc} , не рассчитывалось, так как неизвестна плотность, точный стехиометрический состав, и отсутствуют экспериментальные данные о скорости роста. Поэтому на рисунке 5 кривая 2 лишь качественно отображает процесс осаждения пленки B_xCl_y при энергиях

ионов $\langle \varepsilon_{ion} \rangle < \varepsilon_{thr}^{B_xCl_y}$. Серые вертикальные линии разделяют три режима воздействия ВЧИ разряда в BCl_3 на GaN в зависимости от энергии бомбардирующей поверхность ионов $\langle \varepsilon_{ion} \rangle$, которая контролируется величиной U_{rf} . Область I с $\langle \varepsilon_{ion} \rangle < \varepsilon_{thr}^{B_xCl_y} \approx 30$ эВ соответствует режиму роста пленки B_xCl_y на поверхности GaN. Область II представляет собой промежуточный режим плазменной обработки поверхности, в котором нормированная поверхностная концентрация пленки B_xCl_y θ_1 уменьшается с 1 до 0.1 (рисунок 5, кривая 4), однако отсутствует травление GaN (рисунок 5, кривая 1), так как $\langle \varepsilon_{ion} \rangle < \varepsilon_{thr}^{GaN} \approx 60$ эВ. Область III с $\langle \varepsilon_{ion} \rangle > \varepsilon_{thr}^{GaN}$ представляет собой режим реактивного ионного травления GaN. В данном режиме происходит активация поверхности атомарным хлором (рисунок 5, кривая 3), GaN удаляется с поверхности в виде GaCl и N_2 под действием ионной бомбардировки. При этом доля соединений B_xCl_y уменьшается с ростом энергии ионов, что качественно согласуется с результатами измерений [15].

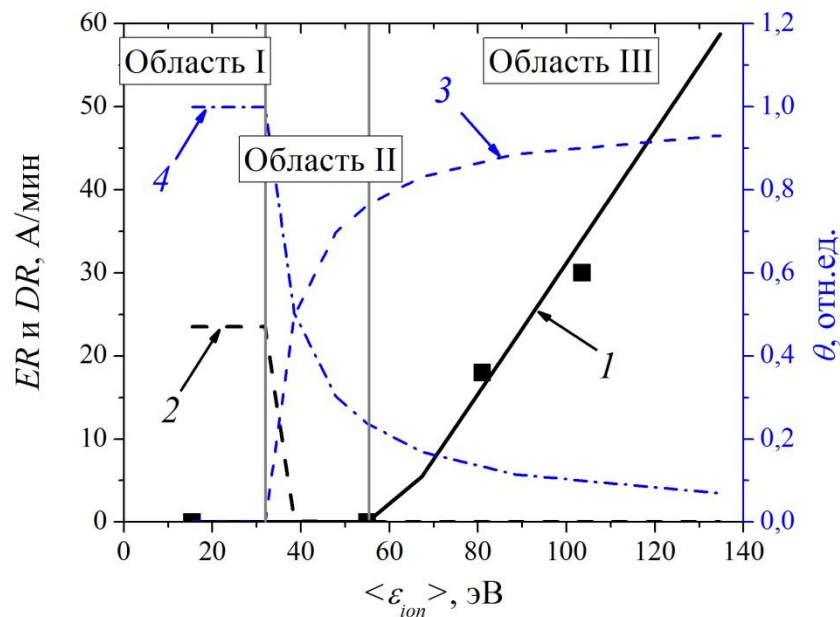


Рисунок 5: Зависимость скорости травления ER и состава поверхности θ от средней энергии ионов из ВЧИ разряда в BCl_3 . Черные квадраты – экспериментально измеренная скорость травления [15]; 1 – вычисленная скорость травления GaN, ER^{calc} ; 2 – вычисленная скорость осаждения B_xCl_y , DR^{calc} ; 3 – нормированная поверхностная концентрация GaNCl, θ_1 ; 4 – нормированная поверхностная концентрация B_xCl_y , θ_2 .

Результаты расчетов ВЧИ в BCl_3 позволили определить пороговые энергии удаления пленок типа B_xCl_y и выделить основные режимы воздействия потоков ионов и радикалов на поверхность перспективных полупроводников GaN.

Промежуточный режим обработки GaN без инициации травления реализуется в диапазоне энергий ионов с шириной $\varepsilon_{thr}^{GaN} - \varepsilon_{thr}^{BxCl_y} \approx 30$ эВ. В частности, согласно литературным данным [15, 16], такой промежуточный режим обработки в ВЧИ разряде в BCl_3 предпочтительно использовать при изготовлении омических контактов с низким сопротивлением для транзисторов на основе GaN.

Четвертая глава посвящена трехмерному численному расчету траекторий движения ионов без столкновений с нейтральными частицами газа в многосеточном энергоанализаторе задерживающего потенциала и определению влияния параметров элементов конструкции на аппаратную функцию прибора. В качестве основных параметров были рассмотрены размеры, форма ячеек сеток, их взаимный поворот в плоскости сеток и расстояние между сетками. За основу были использованы данные о конструкции и соответствующие измерения с помощью четырехсеточных анализаторов [15, 17] и трехсеточного анализатора [18]. В качестве меры уширения ФРИЭ в анализаторе была выбрана ширина пика на полувысоте аппаратной функции прибора, $\Delta\varepsilon_{rfea}$. На рисунке 6 представлено сравнение результатов численного расчета и экспериментального измерения функции распределения по энергии основных ионов SiH_3^+ из ВЧЕ разряда в смеси SiH_4/H_2 из работы [18]. Для измерения в работе [18] использовался трехсеточный энергоанализатор с шестиугольными ячейками. Расчетная ФРИЭ на рисунке 6 была определена в результате свертки вычисленной аппаратной функции и измеренной ФРИЭ с помощью масс-спектрометра.

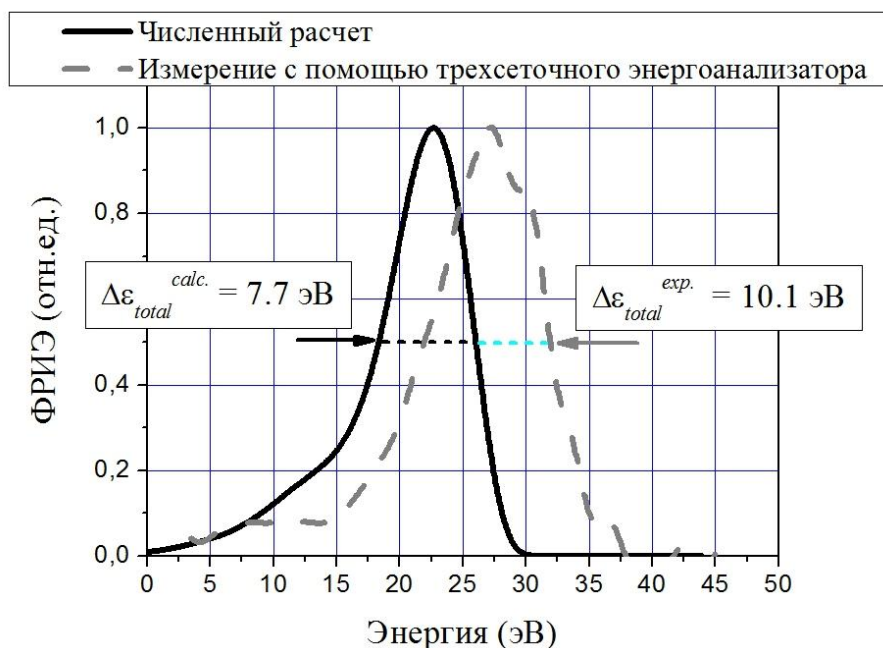


Рисунок 6: Функция распределения ионов SiH_3^+ по энергии, вычисленная и измеренная с помощью трехсеточного энергоанализатора [18] с шестиугольными ячейками сеток.

Ширина на полувысоте аппаратной функции в многосеточном энергоанализаторе $\Delta\varepsilon_{rfea}$ определяется провисанием потенциала в ячейках анализирующей сетки, которое в свою очередь зависит от размера ячеек и разницы электрического поля перед и после данной сетки. В общем случае величина провисания в ячейках анализирующей третьей сетки определяется соотношением [19]:

$$\Delta\varepsilon_{rfea} = \Delta U = \kappa d_3 (E_{23} - E_{34}) = \kappa d_3 \left(\frac{U_3 - U_2}{L_{23}} - \frac{U_4 - U_3}{L_{34}} \right) \quad (4)$$

где ΔU – разность между значениями потенциала на анализирующей сетке и в центре ячейки сетки, U_3 – потенциал третьей (анализирующей) сетки, U_2 и U_4 – потенциал второй и четвертой сетки, соответственно; L_{23} и L_{34} – расстояния между соответствующими сетками; $E_{23} = (U_3 - U_2)/L_{23}$ и $E_{34} = (U_4 - U_3)/L_{34}$ – электрические поля перед и после третьей сетки, соответственно, d_3 – размер ячейки третьей сетки, κ – численный коэффициент, равный $1/4\pi$ для двумерной сетки [19]. Формула (4) применима при $d_3 \ll L_{23}, L_{34}$. Для энергоанализаторов с шестиугольными ячейками сеток может быть использован коэффициент $\kappa = \pi^{-1}$, $d_3 = r_3$ – радиус вписанной окружности, полученный на основе аналитического расчета провисания потенциала для круглого отверстия. В случае трехсеточного энергоанализатора формула (4) применима в следующем виде:

$$\Delta\varepsilon_{rfea} = \Delta U = \frac{r_3}{\pi} (E_{23} - E_{3C}) = \frac{r_3}{\pi} \left(\frac{U_3 - U_2}{L_{23}} - \frac{U_C - U_3}{L_{3C}} \right) \quad (5)$$

Полагая, что аппаратная функция и измеренная масс-спектрометром ФРИЭ [18] аппроксимируются функциями Гаусса, расчет $\Delta\varepsilon_{rfea}$ по формуле (5) и свертка с соответствующей ФРИЭ с $\Delta\varepsilon_{source} = 5.3$ эВ дает значение $\Delta\varepsilon_{total} = 9.18$ эВ. Сравнение полученных значений ширины на полувысоте ФРИЭ из эксперимента (рисунок 6, красная кривая), численного расчета (рисунок 6 черная кривая) и расчета по формуле (5) представлено в таблице 1. Расчетные значения с хорошей точностью совпадают с измеренной величиной.

Таблица 1: Сравнение измеренных и расчетных значений ширины на полувысоте пика ФРИЭ (SiH_3^+).

$\Delta\varepsilon_{total}$, эВ	$\Delta\varepsilon_{rfea}$, эВ	
7.7	5.4	Численный расчет
9.18	7.46	Оценка по формуле (5)
10.1	--	Эксперимент [18]

На рисунке 7 представлены результаты численного расчета ширины на полувысоте $\Delta\varepsilon_{rfea}$ при различных параметрах четырехсетевого энергоанализатора с квадратными ячейками. Для наглядности в качестве аргумента использован параметр $U_0 = d_3(E_{23} - E_{34})$. Коэффициент k в формуле (4) для ячеек с квадратной формой был определен путем линейной аппроксимации результатов численных расчетов зависимости уширения $\Delta\varepsilon_{rfea}$ то параметра $U_0 = d_3(E_{23} - E_{34})$ (рисунок 7, красная штриховая линия). Величина коэффициента k составляет 0.11.

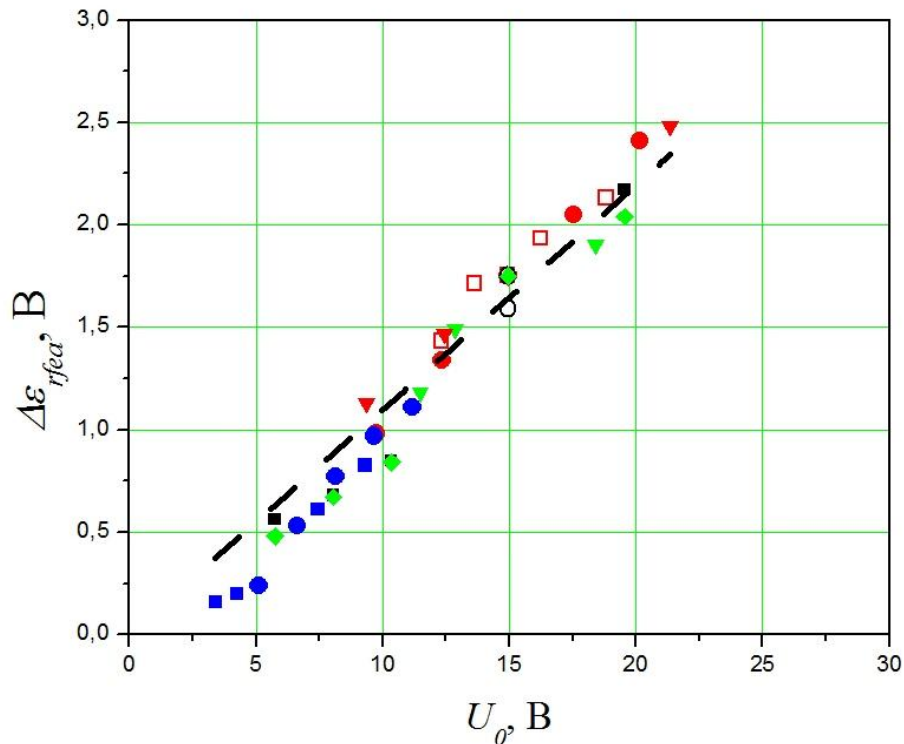


Рисунок 7: Вычисленные зависимости ширины на полувысоте аппаратной функции 4хсетевого энергоанализатора с квадратными ячейками от параметра $U_0 = d_3(E_{23} - E_{34})$. Моноэнергетический пучок ионов: черные квадраты – размер ячеек сеток $50 \div 210$ мкм; зеленые ромбы – размер ячеек третьей (анализирующей) сетки $50 \div 170$ мкм; красные полые квадраты – энергия пучка $10 \div 35$ эВ; красные круги – потенциал второй сетки, $U_2 = -100 \div -20$ В; зеленые треугольники – расстояние между второй и третьей сеткой, $L_{23} = 0,75 \div 1,6$ мм; красные треугольники – расстояние между каждой парой сеток, $L_{12} = L_{23} = L_{34} = 0,7 \div 1,6$ мм; полые черные круги – толщина проволоки = $50 \div 130$ мкм (размер ячейки фиксированный). Электроны: синие квадраты – размер ячеек сеток $84 \div 126$ мкм; синие круги – потенциал второй сетки, $U_2 = -60 \div 60$ В. Красная штриховая линия – линейная аппроксимация.

Для улучшения разрешающей способности энергоанализатора необходимо снижать значение параметра $kd_3(E_{23} - E_{34})$. На величины $E_{23} = (U_3 - U_2)/L_{23}$ и $E_{34} = (U_4 - U_3)/L_{34}$ накладываются ограничения, которые определяются условиями эксперимента. В частности, потенциалы U_2 и U_3 определяются максимальной энергией отсекаемых частиц и энергией анализируемых частиц, соответственно. Для запираания потока вторичных электронов с коллектора потенциал U_4 фиксируется равным $-25 \div -15$ В. Расстояния между сетками определяются длиной пробега анализируемых частиц λ и могут быть увеличены до тех пор, пока $(L_{12} + L_{23} + L_{34}) \ll \lambda$. Поэтому, уменьшение размера ячеек третьей (анализирующей) сетки d_3 является оптимальным способом улучшения разрешающей способности многосеточного энергоанализатора. В целом, результаты расчетов по формулам (4) и (5) находятся в количественном согласии с результатами измерений из работ [15, 18] в пределах 30%.

В данной главе также представлены результаты численных расчетов для определения влияния относительного сдвига и поворота идентичных ячеек сеток для четырехсеточного энергоанализатора. Показано, что максимальная чувствительность прибора достигается, когда проволоки и ячейки всех сеток находятся строго одна под другой, т.е. одинаковые ячейки полностью совмещены. Наименьшее искажение аппаратной функции анализатора наблюдается при полном совмещении или случайном повороте ячеек сеток. Показано, что в энергоанализаторе с идентичными сетками для предотвращения искажения формы измеренной кривой задержки необходимо, чтобы апертура энергоанализатора составляла более 10 периодов сетки. Представленные результаты моделирования многосеточных анализаторов с квадратными и шестиугольными ячейками сеток позволяют оптимизировать конструкцию прибора путем снижения разброса по энергии измеряемых ионов и увеличения чувствительности прибора.

В заключении сформулированы основные результаты, полученные в диссертации:

1. Проведены расчеты столкновительного движения ионов в приэлектродном ВЧ слое в пространственно однородном магнитном поле с произвольной величиной и углом наклона силовых линий к нормали к поверхности электрода. Проведен численный анализ влияния магнитного поля на функцию распределения ионов по энергии и углу падения из ВЧЕ разряда в инертных газах на основе данных из самосогласованного численного моделирования и экспериментальных измерений. Показано для конкретных условий чистящего ВЧЕ разряда без магнитного поля, а именно при давлении 15 мТор, мощности 15 Вт и частоте 60–100 МГц, что

распыление бериллия происходит в более чем 20 раз эффективнее Mo, Rh зеркала, или SiO₂ окна.

2. Функция распределения ионов He⁺ по энергии и углу падения существенно зависит от угла наклона линий магнитного поля. Изменение угла наклона φ от 0 до 85° приводит увеличению числа столкновений ионов более чем в 10 раз. Это приводит к уширению и снижению высоты пика энергетического и углового спектра ионов, появлению серии вторичных пиков в области низких энергий. В интервале малых углов $\varphi < \varphi_{cr}$ ионы He⁺ ускоряются в ВЧ слое вдоль линий магнитного поля с постоянной длиной пробега и попадают на электрод под углом $\vartheta \approx \varphi$. Показано, что в данном интервале углов справедлива модификация столкновительной формы закона Чайлда-Ленгмюра с коэффициентом $\cos(\varphi)$. В случае больших углов $\varphi > \varphi_{cr}$ происходит формирование магнитного слоя вблизи поверхности электрода. Критический угол наклона линий магнитного поля, при котором формируется магнитный слой внутри приэлектродного ВЧ слоя, определяется арктангенсом от отношения длины свободного пробега к ионному циклотронному радиусу.

3. Проведены расчеты пространственного распределения параметров ВCl₃ плазмы ВЧИ разряда низкого давления в гидродинамическом приближении при различной амплитуде ВЧ напряжения на нижнем электроде. Методом PIC-MCC вычислены функции распределения по энергии для основных ионов ВCl₂⁺. Показано, что в рассматриваемом диапазоне параметров ВЧ разряда поток ионов/химически активных радикалов и средняя энергия ионов контролируются практически независимо друг от друга величиной амплитуды ВЧ тока в катушке и ВЧ напряжения на подложке, соответственно.

4. На основе сравнения результатов численного моделирования и экспериментальных данных разработана модель, описывающая режимы обработки GaN под действием потока основных ионов ВCl₂⁺, ВCl₃⁺ и химически активных радикалов ВCl, ВCl₂ и Cl. Вычислены пороговые энергии для удаления пленки В-Cl на поверхности GaN, реактивного ионного травления в ВЧИ разряде в ВCl₃. Если средняя энергия ионов ниже порога $\varepsilon_{thr}^{B_xCl_y} \approx 30$ эВ, то прочные химические соединения типа (ВОCl)₃, В₃О₃Cl₂, В₂ОCl₃ с кислородом не могут быть удалены с поверхности под действием ионной бомбардировки. Как следствие, радикалы ВCl и ВCl₂ из плазмы образуют на поверхности химические соединения типа В-Cl, что приводит к росту пленки В_xCl_y. Увеличение энергии ионов до значений выше порога $\varepsilon_{thr}^{GaN} \approx 60$ эВ инициирует реактивное ионное травление GaN, при котором

материал удаляется с поверхности в виде GaCl и N₂. Так как порог ε_{thr}^{GaN} выше $\varepsilon_{thr}^{BxCl_y}$, то существует промежуточный режим обработки поверхности GaN. В таком режиме соединения В–Cl, а также поверхностный оксид, практически полностью удаляются, и поверхность пассивируется атомарным хлором. Реализуется промежуточный режим обработки GaN в диапазоне энергий ионов с шириной $\varepsilon_{thr}^{GaN} - \varepsilon_{thr}^{BxCl_y} \approx 28$ эВ. Согласно литературным данным, такой промежуточный режим обработки в BCl₃ предпочтительно использовать при изготовлении омических контактов с низким сопротивлением для транзисторов на основе GaN.

5. Проведены трехмерные численные расчеты аппаратной функции многосеточного энергоанализатора задерживающего потенциала, в котором ячейки сеток представлены в виде квадратов или правильных шестиугольников. Рассмотрено влияние взаимного расположения ячеек и значений потенциала сеток на ширину на полувысоте пика аппаратной функции анализатора. Показано, что ширина аппаратной функции и, следовательно, уширение ФРИЭ в многосеточном энергоанализаторе в большей мере определяется провисанием потенциала в ячейках анализирующей сетки. Приведены формулы для количественной оценки ширины аппаратной функции энергоанализатора с квадратными или шестиугольными ячейками. На основе параметрического численного исследования был определен соответствующий коэффициент $k = 0.11$ для сеток с квадратными ячейками.

6. Показано, что наименьшее искажение аппаратной функции энергоанализатора достигается при полном совмещении ячеек одинаковых сеток или при случайном сдвиге и повороте ячеек сеток относительно друг друга. С точки зрения сборки прибора, вариант случайной ориентации является предпочтительным, так как на практике сложно добиться идеального совмещения ячеек сеток, а сдвиг на малые расстояния порядка толщины проволоки приводят к сильному искажению. Показано, что для снижения ошибок измерения ФРИЭ апертура энергоанализатора должна составлять более десяти периодов сетки.

Список литературы

[1] Shoeb J. and Kushner M.J. Mechanisms for plasma etching of HfO₂ gate stacks with Si selectivity and photoresist trimming // Journal of Vacuum Science and Technology A. – 2009. – Vol. 27.

[2] Sha L. and Chang J.P. Plasma etching of high dielectric constant materials on silicon in halogen chemistries // Journal of Vacuum Science and Technology A. – 2004. – Vol. 22.

[3] Sungauer E., Pargon E., Mellhaoui X., Ramos R., Cunge G., Vallier L., Joubert O. and Lill T. Etching mechanisms of HfO₂, SiO₂, and poly-Si substrates in BCl₃ plasmas // Journal of Vacuum Science and Technology A. – 2007. – Vol. 25.

[4] Shul R. J., Willison C. G., Bridges M. M., Han J., Lee J. W., Pearton S. J., Abernathy C. R., MacKenzie J. D., Donovan S. M., Zhang L. and Lester L. F. Selective inductively coupled plasma etching of group-III nitrides in Cl₂- and BCl₃-based plasmas // Journal of Vacuum Science and Technology A. – 1998. – Vol. 16.

[5] Kokubun Y., Miura K., Endo F. and Nakagomi S. Sol-gel prepared β-Ga₂O₃ thin films for ultraviolet photodetectors // Applied Physics Letters. – 2007. – Vol. 90.

[6] Chung J.W., Hoke W.E., Chumbes E.M. and Palacios T. AlGa_N/Ga_N HEMT With 300-GHz f_{\max} // IEEE Electron Device Letters. – 2010. – Vol. 31.

[7] Mukhin E., Vukolov K., Semenov V., Tolstyakov S., Kochergin M., Kurskiev G., Podushnikova K., Razdobarin A., Gorodetsky A., Zalavutdinov R., Bukhovets V., Zakharov A., Bulovich S., Veiko V. and Shakshno E. Progress in the development of deposition prevention and cleaning techniques of in-vessel optics in ITER // Nuclear Fusion. – 2009. – Vol. 49.

[8] Maffini A., Moser L., Marot L., Steiner R., Dellasega D., Uccello A., Meyer E. and Passoni M. In situ cleaning of diagnostic first mirrors: an experimental comparison between plasma and laser cleaning in ITER-relevant conditions // Nuclear Fusion. – 2017. – Vol. 57.

[9] Schweigert I.V. and Schweigert V.A. Combined PIC–MCC approach for fast simulation of a radio frequency discharge at a low gas pressure // Plasma Sources Science and Technologies. – 2004. – Vol. 13.

[10] Sommerer T.J. and Kushner M.J. Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂,

He/CF₄/O₂, and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo-fluid hybrid model // Journal of Applied Physics. – 1992. – Vol. 71.

[11] Rakhimova T.V., Braginsky O.V., Ivanov V.V., Kovalev A.S., Lopaev D.V., Mankelevich Yu.A., Olevanov M.A., Proshina O.V., Rakhimov A.T., Vasilieva A.N. and Voloshin D.G. Experimental and theoretical study of ion energy distribution function in single and dual frequency RF discharges // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2007. – Vol. 35.

[12] Birdsall C.K. and Langdon A.B. Plasma Physics via Computer Simulation. – Adam Hilger, 1991.

[13] Lieberman M.A., Lichtenberg A.J. Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. Second Edition. – John Wiley & Sons, 2005.

[14] Рожанский В.А. Теория плазмы. – Лань, 2012.

[15] Андрианов Н.А. Плазменные процессы в технологии НЕМТ транзисторов на основе III- нитридов: дисс. ... канд. физ.-мат. наук : 01.04.04 / Андрианов Николай Александрович. – СПб., 2018.

[16] Fujishima T., Joglekar S., Piedra D., Lee H.-S., Zhang Y., Uedono A. and Palacios T. Formation of low resistance ohmic contacts in GaN-based high electron mobility transistors with BCl₃ surface plasma treatment // Applied Physics Letters. – 2013. – Vol. 103.

[17] Смирнов А.С., Уставщиков А.Ю., Фролов К.С. Распределение по энергиям электронов и ионов, бомбардирующих электрод в высокочастотном разряде // Журнал Технической Физики. – 1995. – Т. 65.

[18] Landheer C. Tuning of ion bombardment in plasma processes for the fabrication of crystalline silicon solar cells: Ph.D. Thesis / Cornelius Landheer; Utrecht University. – 2017.

[19] Тютиков А.М. Шапиро Ю.А. Об искажениях, вносимых сетками в кривые задержки трехэлектродных анализаторов // Журнал Технической Физики. – 1963. – Т. 33.