

射频等离子体鞘层动力学模型^{*}

戴忠玲 王友年 马腾才

(大连理工大学物理系, 大连 116024)

(2001 年 5 月 15 日收到, 2001 年 6 月 12 日收到修改稿)

在流体力学方程的基础上建立了一种自洽的无碰撞射频等离子体鞘层动力学模型. 这种自洽性包含两个方面: 一方面, 由于考虑了瞬时鞘层电场对离子运动的影响, 因此该模型适用于描述任意频率段的射频鞘层演化过程; 另一方面, 在模型中采用等效电路方法来自洽地确定极板上的瞬时电位与瞬时鞘层厚度之间的关系. 采用数值方法模拟出鞘层的瞬时厚度及极板的瞬时电位变化、鞘层内离子密度和电场强度等物理量的时空变化. 结果表明, 当射频场的频率小于或等于离子等离子体频率时, 离子流密度明显地随时间变化.

关键词: 射频, 离子, 鞘层, 流体力学

PACC: 5265, 5240, 5225

1 引 言

近些年来, 由射频、微波或感应耦合等放电方式产生的低气压、高密度等离子体在微电子工业中得到了越来越广泛的应用, 例如采用这种等离子体可以合成薄膜材料^[1,2]以及对金属、电介质和半导体薄膜等进行刻蚀^[3-5]. 在等离子体工艺过程中, 离子入射到极板上的能量分布和角度分布是两个关键的物理量, 它们直接决定着刻蚀的异向性和刻蚀率的大小. 为了控制离子入射到极板上的行为, 通常在极板上施加一射频(RF)偏压, 从而在极板附近形成一射频等离子体鞘层. 当离子从等离子体中穿越鞘层向极板运动时, 将受到射频鞘层电场的加速, 并以一定的能量和角度轰击到极板的表面上. 离子在射频鞘层中的运动行为, 不仅受到等离子体参量的影响, 还要受到外加射频场的调制.

与直流等离子体鞘层相比, 射频等离子体鞘层的最大特点是鞘层的厚度及鞘层的电位等物理量均随时间变化. 正是由于这种特点, 使得对射频鞘层研究变得相对复杂. 在过去十多年内, 尽管一些作者采用流体力学模型对射频鞘层的特性进行了研究, 但这些作者为了简化问题, 都做出了不同程度的近似. 当外加射频场的频率远小于离子等离子体频率时, 鞘层中离子运动是由瞬时电势决定的, 这时每一时

刻的射频鞘层特性都与电势为相应值的直流辉光放电的鞘层特性一样. Metze 等^[6]提出的一种解析模型描述了这种低频的离子运动. 而当外加射频场的频率远大于离子等离子体频率时, 离子对射频电场的变化不能及时响应. 对这种高频情况, Lieberman^[7], Godyak 和 Sternberg^[8]假定离子的运动由鞘层中的平均电场来决定, 并采用阶梯模型来描述电子在鞘层内的密度分布, 从而可以得到无碰撞射频鞘层演化方程的解析解. 为了避免阶梯模型给电子密度分布带来的不精确性, Edelberg 和 Aydif^[9]假定鞘层内的电子密度分布服从 Boltzmann 分布, 并建立了自洽的鞘层厚度演化方程. 然而, 对于中低频范围的外加射频场, 很难得到鞘层演化方程的解析解. 在这种情况下, 离子对射频电场的变化只是部分响应的. Miller 和 Riley^[10]曾提出一个“衰减势”模型来研究在该频率段的离子动力学问题, 但在他们的工作中仍假定鞘层中离子流密度是恒定的. 最近, Bose 等^[11]试图建立一个时空变化的离子动力学模型来研究中等频率的射频鞘层特性, 但该模型是不自洽的, 因为它假定了极板上的电位是一给定的正弦波形. 实际上, 尽管外界电源的波形为正弦波, 但由于鞘层负载的影响, 极板上的电位将不再是一个正弦波.

本文将在流体力学方程的基础上建立一种自洽的射频鞘层动力学模型. 一方面, 由于考虑了瞬时鞘层电场对离子运动的影响, 因此该模型适用于描述

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 19975008 和 19835030)、国家教育部“跨世纪优秀人才培养计划”基金及“高等学校骨干教师资助计划”资助的课题.

任意频率段的射频鞘层演化过程,另一方面,在模型中采用等效电路方法来自洽地确定极板上的瞬时电位和瞬时鞘层厚度.

2 理论模型

现在我们考虑在低气压放电等离子体中放置一个极板(电极或样品台),并在该极板上施加一圆频率为 ω 的射频电源.这样便在极板附近形成一随时间变化的非电中性区,即射频鞘层区.在一般情况下,由于物理量在垂直于极板方向上的梯度远大于其他方向上的梯度,因此可以假定鞘层内所有物理量都是一维变化的.同时,在鞘层中由于离子温度远小于它的动能,因而可以忽略离子的热运动.此外,对于低气压放电,还可以忽略离子与中性气体原子或分子的碰撞过程.这样离子在鞘层中的密度 $n_i(x, t)$ 和流速 $u_i(x, t)$ 可以采用如下冷流体力学方程组来描述:

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \frac{\alpha n_i u_i}{\alpha x} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial u_i}{\partial x} = -\frac{e}{m_i} \frac{\partial V}{\partial x}, \quad (2)$$

式中 m_i 为离子的质量, e 为基本电荷.在方程(2)中, $V(x, t)$ 是鞘层中的瞬时电位分布,可以由如下泊松方程确定:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_i - n_e), \quad (3)$$

式中 ϵ_0 为真空介电常量, $n_e(x, t)$ 为鞘层内的电子密度分布.由于电子的质量很小,可以忽略其惯性运动,这样电子的密度 n_e 可以用 Boltzmann 关系表示为

$$n_e(x, t) = n_0 \exp\left(\frac{eV(x, t)}{k_B T_e}\right), \quad (4)$$

式中 n_0 为等离子体密度, T_e 为电子温度, k_B 为 Boltzmann 常量.

方程(1)~(3)并不能完全确定射频等离子体鞘层的时空演化特性,因为它还依赖于适当的边界条件.假定极板位于 $x=0$ 处,鞘层与等离子体的界面位于 $x=d_s(t)$ 处,其中 $d_s(t)$ 为鞘层的瞬时厚度.在鞘层的边界处,要求等离子体保持准电中性,即

$$n_i(d_s, t) = n_0. \quad (5)$$

另外,假定离子以 Bohm 速度 $u_B = \sqrt{k_B T_e/m_i}$ 进入鞘层,即

$$u_i(d_s, t) = u_B. \quad (6)$$

为了使离子以 Bohm 速度进入鞘层,通常要求在鞘层边界处的电场为 $k_B T_e/(2e\lambda_D)$,即^[9]

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=d_s(t)} = \frac{k_B T_e}{2e\lambda_D}, \quad (7)$$

式中 $\lambda_D = (\epsilon_0 k_B T_e/n_0 e^2)^{1/2}$ 为 Debye 长度.由于电位的参考值可以任意选取,我们令它在鞘层边界处的值为 0,即

$$V(d_s, t) = 0. \quad (8)$$

在上述边界条件中,鞘层的瞬时厚度 $d_s(t)$ 为一个未知量.原则上, $d_s(t)$ 可以由极板上的瞬时电位 $V(0, t) = V_e(t)$ 来自洽地确定,但 $V_e(t)$ 也是未知的.在 Bose 等^[11]的工作中,假定极板上的瞬时电位是给定的,且为一正弦波形,这显然是不自洽的.极板上的瞬时电位不仅依赖于外界射频电源,而且取决于鞘层自身的瞬时特性. Edelberg 和 Aydi^[9] 引入一个等效电路模型可以自洽地确定鞘层的瞬时厚度与极板上瞬时电位之间的关系.在该模型中,鞘层被看成是由一个二极管、电容及电流源组成的并联电路,如图 1 所示.通过二极管的电流表示电子电流

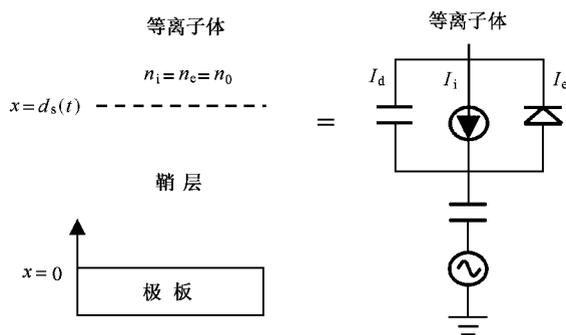


图 1 射频等离子体鞘层的等效电路示意图

随极板上瞬时电位的变化关系,即

$$I_e(t) = \frac{eu_e n_0 A}{4} \exp\left(\frac{eV_e(t)}{k_B T_e}\right), \quad (9)$$

式中 $u_e = \sqrt{8k_B T_e/\pi m_e}$ 为电子的平均热速度, A 为极板的面积.电流源表示离子入射到极板上而产生的电流,即

$$I_i(t) = eu_i(0, t)n_i(0, t)A. \quad (10)$$

通过电容器上的电流是由极板上的电荷 $Q(t)$ 变化而引起的,其表示式为

$$I_d(t) \equiv \frac{dQ}{dt} = \frac{dQ}{dV} \frac{dV}{dt} \equiv C_s(t) \frac{dV_e}{dt}, \quad (11)$$

式中 $C_s(t) = \epsilon_0 A/d_s(t)$ 为鞘层电容.假定施加在极

板上的射频源的电流呈正弦变化,则可得到如下电流平衡方程:

$$I_i(t) - I_e(t) - C_s(t) \frac{dV_e(t)}{dt} = I_{\max} \sin(\omega t), \quad (12)$$

式中 I_{\max} 为外界射频电源的电流幅值. 需要说明的一点是,在 Edelberg 和 Aydil 的工作中^[9],由于假定了在鞘层中离子流密度是守恒的,因此极板上的离子流是一个常量,即 $eu_B n_0 A$. 而在本文中,离子的运动是随鞘层的瞬时电场变化的,因此极板上的离子流 $I_i(t)$ 是随时间变化的.

方程(1)–(3)及(12)构成了一套自洽的非线性方程组. 利用该方程组及边界条件(5)–(8)式,则可以完全确定射频等离子体鞘层的时空演化特性.

3 数值结果

我们将采用数值方法求解上节得到的射频鞘层动力学方程. 具体求解方法如下:首先选择适当的初始条件,并采用四阶龙格-库塔法求解电流平衡方程(12),可以获得极板上的瞬时电位与鞘层厚度之间的变化关系;其次采用空间上的二阶有限差分和时间上的显式差分格式求解离子的流体动力学方程(1)和(2)及泊松方程(3). 通过反复迭代,直至得到的解收敛为止. 在如下讨论中,我们以氩等离子体为例,其中等离子体密度为 $n_0 = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$, 电子温度为 $T_e = 3 \text{ eV}$, 极板面积为 325 cm^2 .

在讨论数值结果之前,须对瞬时鞘层厚度有一个明确的定义. 在 Lieberman^[7]的阶梯模型中,鞘层厚度为电子密度陡然降为零点时的位置与极板之间的距离,而在 Bose 等^[11]的数值模拟中,则选择鞘层的位置为电子密度降为等离子体密度二分之一时的位置. 在本文的数值计算中,假定在鞘层边界离子的流速等于 Bohm 速度 u_B 以及电子密度 n_e 等于离子密度 n_i .

图2和图3分别显示出在不同的频率 ω 下鞘层厚度和极板电位随时间的变化关系. 在这里我们引入一个无量纲的因子 $\beta = \omega/\omega_{pi}$ 来表征随频率的变化关系,其中 $\omega_{pi} = \left(\frac{e^2 n_0}{\epsilon_0 m_i}\right)^{1/2}$ 为离子的振荡频率. 可以看出,鞘层厚度和极板电位都是随时间周期变化的,而且当极板电位达到峰值时鞘层厚度也同时

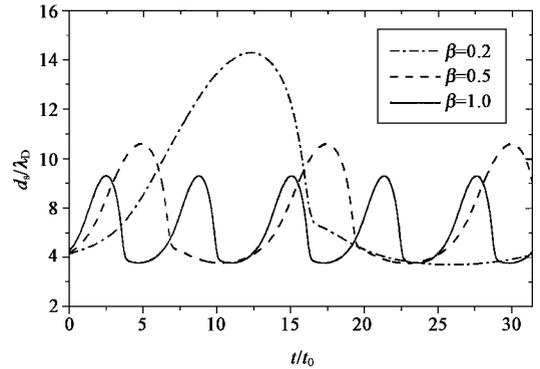


图2 对于不同的电源频率($\beta = \omega/\omega_{pi}$),鞘层的瞬时厚度 $d_s(t)$ 随时间 t 的变化关系. $t_0 = \omega_{pi}^{-1}$ 为离子振荡的特征时间, λ_D 为德拜长度,射频电源的电流幅值为 $I_{\max} = 8.0A$

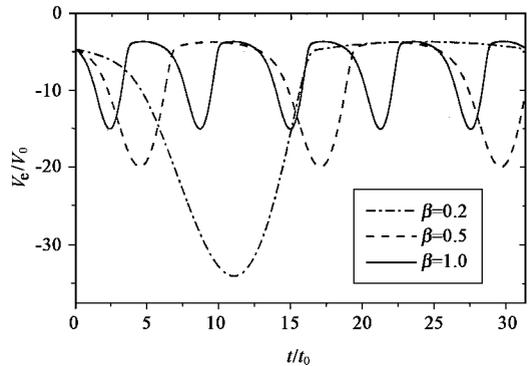


图3 对于不同的电源频率($\beta = \omega/\omega_{pi}$)极板上的瞬时电位 $V_e(t)$ 随时间 t 的变化关系. $V_0 = k_B T_e / e$, 其余图注同图2

达到它的峰值. 此外,还可以看出,对于给定的射频电源电流的幅值 I_{\max} ,随着射频电源频率的变小,鞘层厚度和极板电位的振荡幅度逐渐变大.

图4显示了入射到极板上的离子流密度 $J_i(t) = n_i(0, t)u_i(0, t)$ 随时间的变化关系. 结果表明,在较高频率下离子流几乎不随时间变化,与 Edelberg 和 Aydil^[9]的结果很相似. 这表明在高频情况下($\beta \gg 1$),可以合理地假定离子在鞘层中的运动是稳态的. 然而在低频情况下($\beta \ll 1$),离子流密度呈现出明显的周期性振荡形式. 同时可以看出,频率越低,离子流密度的振荡幅值越大. 这说明在低频情况下,离子在鞘层中的运动受到瞬时鞘层电场的调制.

图5,图6和图7分别显示出离子密度 $n_i(x, t)$ 、电势 $V(x, t)$ 及电场 $E(x, t)$ 在鞘层中的时空分布情况. 从图5可以看出,离子的密度随时间的变化

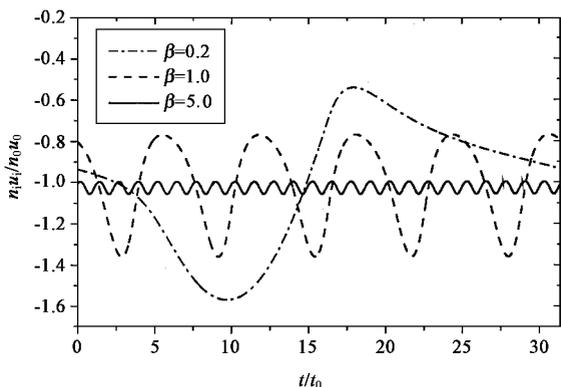


图 4 对于不同的电源频率 ($\beta = \omega/\omega_{pi}$), 入射到极板上的瞬时离子流 $n_i u_i$ 随时间 t 的变化关系 图注同图 2

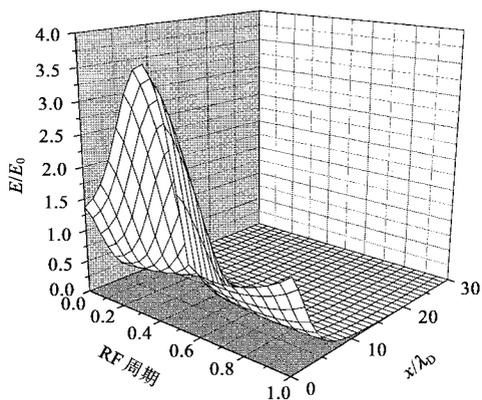


图 7 在一个射频 (RF) 周期内鞘层电场 $E(x, t)$ 的时空演化关系 $E_0 = k_B T_e / (e \lambda_D)$ 图注同图 5

较为缓慢, 随空间位置的变化则非常明显. 图 6 和图 7 表明电势和电场仅在极板附近有比较明显的变化, 电势随空间变量的变化基本上呈现抛物线的形式, 而电场则是呈线性变化的.

4 结 论

本文在流体力学方程的基础上, 建立了一个自洽的无碰撞射频等离子体鞘层动力学模型. 在该模型中离子的密度及流速的时空分布是非稳态的, 并且引入了等效电路模型来考虑了极板上离子流、电子流及电荷的变化对极板电势的影响. 数值计算表明: 1) 在较高频率下离子流几乎不随时间变化, 离子密度与时间无关的假定是合理的; 2) 在较低频率下离子流呈明显的周期振荡, 并且频率越低, 离子流振荡的幅值越大; 3) 鞘层的瞬时厚度和极板上的瞬时电位是同步变化的; 4) 鞘层电场仅在极板附近变化比较明显.

由于本文研究的内容是针对低气压放电的射频等离子体鞘层, 没有考虑离子在鞘层内同中性气体分子或原子的碰撞效应. 在某些等离子体制备薄膜工艺中, 放电气压可达几帕, 甚至更高^[3], 这时必须考虑碰撞效应对鞘层特性的影响. 另外, 由于离子的能量分布和角度分布直接影响到刻蚀速率与刻蚀剖面^[12, 13], 因此在进一步的工作中, 我们还将采用 Monte-Carlo 方法来模拟离子在入射到极板上的能量分布和角度分布.

作者感谢宫野教授在计算方法上提供的帮助.

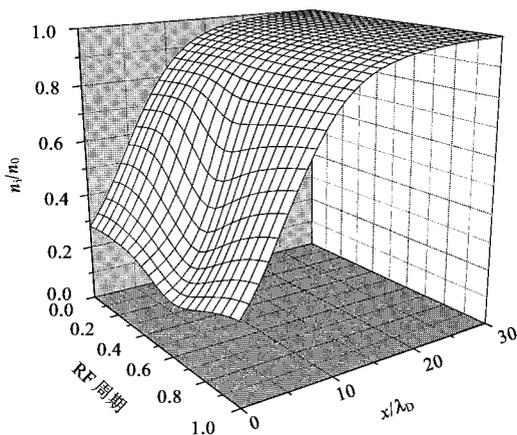


图 5 在一个射频 (RF) 周期内离子密度 $n_i(x, t)$ 的时空演化关系 λ_D 为德拜长度, 射频电流的电流幅值为 $I_{max} = 8.0 A$; 电源的频率为 $\omega = 0.5 \omega_{pi}$

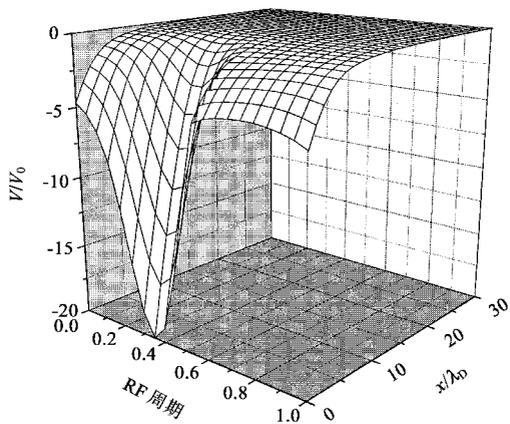


图 6 在一个射频 (RF) 周期内鞘层电势 $V(x, t)$ 的时空演化关系 $V_0 = k_B T_e / e$ 图注同图 5

- [1] Z. H. Ju *et al.*, *Acta Phys. Sin.* **49**(2000), 2310(in Chinese)
[居建华等, 物理学报, **49**(2000), 2310].
- [2] X. Y. Ma *et al.* *Acta Phys. Sin.* **47**(1998) 871(in Chinese) [马
锡英等, 物理学报, **47**(1998), 871].
- [3] N. Hershkowitz, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **26**(1998), 1610.
- [4] K. Nagayama, B. Farouk, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **26**
(1998), 125.
- [5] S. Samukawa, H. Akashi, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **26**
(1998), 1621.
- [6] A. Metzke, D. W. Ernie, H. J. Oskam, *J. Appl. Phys.*, **60**
(1986), 3081.
- [7] M. A. Lieberman, *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **16**(1988), 638.
- [8] V. A. Godyak, N. Sternberg, *Phys. Rev.*, **A42**(1990), 2299.
- [9] E. A. Edelberg, E. S. Aydil, *J. Appl. Phys.*, **86**(1999),
4799.
- [10] P. A. Miller, M. E. Riley, *J. Appl. Phys.*, **82**(1997), 3689.
- [11] D. Bose, T. R. Govindan, M. Meyyappan, *J. Appl. Phys.*, **87**
(2000), 7176.
- [12] G. S. Hwang, K. P. Giapis, *J. Vac. Technol.*, **B15**(1997),
70.
- [13] M. A. Vyvoda, M. Li, D. B. Graves, *J. Vac. Technol.*, **A17**
(1999), 3293.

DYNAMICAL MODEL OF THE RADIO-FREQUENCY PLASMA SHEATH*

DAI ZHONG-LING WANG YOU-NIAN MA TENG-CAI

(Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 15 May 2001 ; revised manuscript received 12 June 2001)

ABSTRACT

A self-consistent model for the dynamics of the capacitive radio-frequency (RF) plasma sheath driven by a sinusoidal current source is obtained under the assumptions of time-dependent, collisionless ion motion and inertialess electrons. The model consists of fluid equations describing the charge transport in the sheath coupled to an equivalent circuit model of the sheath to predict the characteristics of it at any RF frequency. Some numerical results have been obtained for the instantaneous sheath thickness, the instantaneous voltage and the ion flux density on the substrate, etc. It has been shown that when the RF frequency is less than the ion plasma frequency, the ion flux density will strongly depend on the time.

Keywords : radio frequency, ions, sheaths, hydrodynamics

PACC : 5265, 5240, 5225

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 19975008 and 19835030), by the Trans-Century Training Program Foundation for Talents from the Ministry of Education, China, and by the Foundation for University Key Teachers by the Ministry of Education, China.