

硅烷低温等离子体阶跃响应的仿真(1)*

杨 靖[†] 李景镇 孙秀泉 龚向东

(深圳大学工程技术学院, 深圳 518060)

(2004 年 5 月 31 日收到, 2004 年 11 月 18 日收到修改稿)

了解含有负离子的低温等离子体的过渡特性, 在等离子体控制过程中, 尤其在选择性等离子体腐蚀工艺和改善电荷堆积等现象中是十分重要的课题. 对电源驱动频率为 13.56MHz, 压力为 0.5 Torr ($0.5 \times 103.33 \text{ Pa}$) 状态下的硅烷 (SiH_4) 低温等离子体的阶跃响应进行仿真. 当电源电压振幅从 550V 阶跃减小到 350V 时, 硅烷低温等离子体表现出以数千 RF 周期为周期的振荡现象, 等离子体中的带电粒子的运动变化决定了振荡现象的产生和振荡周期等特性.

关键词: 迁移率, 扩散系数, 阶跃响应, 等离子体振荡

PACC: 5265, 5235, 5225F, 5240K

1. 引 言

低温等离子体已成为超大规模集成电路加工工艺中必不可少的材料和工具, 在集成电路加工工艺中低温等离子体的控制技术是非常重要的^[1]. 尤其是在超大规模集成电路加工工艺中大面积化、超微细化、高速化等工艺对低温等离子体控制精度提出了更高的要求^[2]. 在低温等离子体加工工艺中任何等离子体外部条件或者内部状态的微小变化, 都将引起低温等离子体自身的物理和化学特性的变化^[3], 所以理解和掌握低温等离子体的过渡特性是十分必要的. Samukawa 等人研究了用时间尺度为数十微秒的脉冲向低温等离子体注入电能时等离子体的过渡特性^[4-7]. Yang 等人对低温等离子体发生器电源电压振幅阶跃式变化时, 等离子体的过渡特性等进行了深入的研究^[8,9]. 王建华等人对鞘层区域中的离子进行了蒙特卡罗模拟, 得到了不同放电参数下离子的能量分布^[10]. 本文以硅烷 (SiH_4) 低温等离子体为对象, 当等离子体发生器电源电压振幅发生阶跃变化(以下简称阶跃变化)时, 对硅烷低温等离子体的过渡特性进行研究.

2. 模 型

本文采用流体等离子体模型. 电子与其他粒子发生碰撞时, 碰撞频率是平均电子能量的函数; 电子、正离子和负离子的迁移速度是电场强度 E 和气体压强 p_0 的函数^[8,9,11-13]. 为了能和蒙特卡罗仿真结果和实验结果进行比较, 放电结构采用电容耦合 (capacitively coupled plasma) 等离子体仿真模型^[1,8,9,14-16]. 放电结构如图 1 所示, RF 电源频率 $f = 13.56 \text{ MHz}$, 平行平板电极间隔 $\text{gap} = 20 \text{ mm}$, 电极半径 $r = 8.0 \text{ cm}$, 电极静电容量为 $C_g = 10.0 \text{ pF}$. 在 $f = 13.56 \text{ MHz}$ 的高频电源作用下, 电子在高频电场中被加速, 获得了高能量的电子和气体分子碰撞使气体电离生成等离子体. 因为电子的迁移率远远大于正离子的迁移率, 所以电子首先到达阴极使阴极带负电荷, 产生负的自偏置电压, 因而进一步吸引正电荷到达阴极. 因为阴极和电源之间耦合电容的存在, 到达阴极的电子在耦合电容上积累, 所以数 RF 周期之后, 耦合电容的作用将阻止过多的电子流入阴极, 使一周期内电子电流和正离子电流等量的流入阴极, 结果使放电进入稳定状态. 为此, 在电源和放电电极之间加入容量为 $C_b = 8.0 \text{ pF}$ 的耦合电容.

* 教育部留学回国人员科研启动基金资助的课题.

[†]E-mail: yangjing@szu.edu.cn

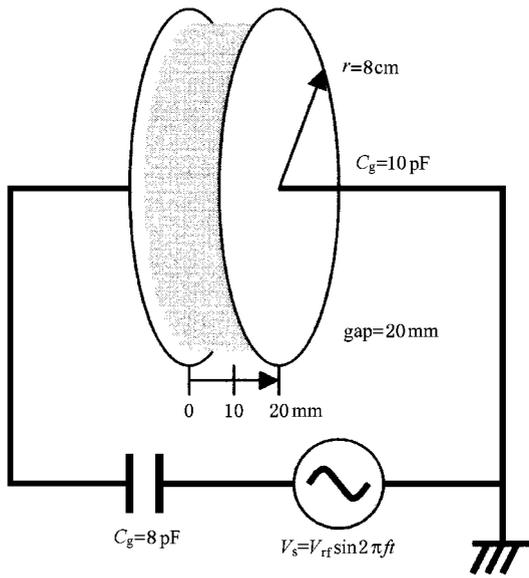


图 1 放电结构

放电电路方程为

$$V_g(t) = \frac{C_b}{C_g + C_b} V_s(t) - \frac{1}{C_g + C_b} \int_0^L i_g(t') dx',$$

$$i_g(t) = \frac{eS}{L} \int_0^L (n_+(x,t)W_+(x,t,E/p_0) - n_-(x,t)W_-(x,t,E/p_0) - n_e(x,t)W_e(x,t,E/p_0)) dx. \quad (1)$$

V_g 为电极间电压, V_s 为电源电压, L 为电极间距, e 为基本电荷量, S 为电极面积, W_+ , W_- , W_e 分别为正离子, 负离子和电子的平均速度, n_+ , n_- , n_e 分别为正离子, 负离子和电子的数密度.

在本 SiH_4 等离子体模型中, 考虑了电子 e , 1 价的 SiH_3^+ 正离子和 1 价的 SiH_3^- 负离子, $\text{SiH}_4(1.3)$, $\text{SiH}_4(2.4)$, SiH_3 , SiH_2 , SiH 等中性原子以及它们之间的化学反应^[11-13, 17]. SiH_4 气体压力为 $p_0 = 0.5 \text{ Torr}$ ($0.5 \times 103.33 \text{ Pa}$).

本模型的支配方程如下: 电子, 正离子, 负离子以及中性原子等的连续性方程为

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \nabla \cdot J_i + \sum_k R_k(x,t, \langle \epsilon \rangle) n_i = 0,$$

$$J_i = -D_i(x,t, E/p_0) \nabla n_i \pm W_i(x,t, E/p_0) n_i,$$

$$W_i = \mu_i E(x,t). \quad (2)$$

电子能量守恒方程为

$$\frac{\partial (\epsilon n_e)}{\partial t} + \nabla \cdot q_e - e J_e \cdot \nabla V$$

$$+ \sum_j H_j R_j(x,t, \langle \epsilon \rangle) n_e = 0$$

$$q_e = -D_e n_e \nabla \epsilon + \frac{5}{3} \epsilon J_e. \quad (3)$$

泊松方程为

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad (4)$$

n_i 为在本模型中考虑的各种粒子的数密度, J_i 为与 n_i 对应的各种粒子的通量, R_k 为反应频率, D_i 为粒子扩散系数, W_i 为粒子迁移速度, μ_i 为带电粒子迁移率, ϵ 为电子能量, H_j 为电子与原子反应能量阈值, V 为空间电位, ρ 为净电荷量, ϵ_0 为真空介电常数.

边界条件设定如下:

$$X_j^{0,L} = X_j^{0+1,L-1} \nabla J_j / J_j (X_j, n_e, n_+, n_-, n_{\text{SiH}_3}, \dots, T_e),$$

$$V_0 = V_g(t),$$

$$V_L = 0. \quad (5)$$

二次电子放出系数为 $\gamma = 0.015$.

$X_j^{0,L}$ 分别为计算量在两电极表面的取值, V_0 和 V_L 分别为图 1 中的左侧供电电极和右侧接地电极的电位.

考虑到电源电压振幅为 550V 左右时, 低温等离子体进入稳定状态以后, 正离子和负离子的数密度大约在 $10^{10}/\text{cm}^3$, 电子的数密度大约在 $10^8/\text{cm}^3$, 所以初始条件设定如下:

$$n_e(x) = n_+(x) = 2.5 \times 10^6 \sin(0.1\pi(4.5 + x/L)),$$

$$\epsilon = 1 \text{ eV},$$

$$x_i = L(1 - \cos(\pi(i-1)(n-1)))/2 \quad 1 \leq i \leq n, \quad (6)$$

x_i 为图 1 中从左侧电极表面起放电空间的位置.

利用本模型模拟稳定状态下的硅烷的仿真结果, 与同条件下的蒙特卡罗仿真结果取得了良好的一致性^[15, 18], 并在此基础上, 进一步进行了以 150 微秒为周期的脉冲方式向等离子体注入电能的仿真计算, 并与实验结果进行了比较取得了良好的一致性^[19, 20].

3. 结果与分析

3.1. 硅烷低温等离子体的振荡现象

在电源电压振幅为 550V 的 RF 电源作用下, 当等离子体进入稳定状态以后, 电源电压在 0 相位的

瞬间, 振幅从 550V 分别向 600V (1) 对应图 2 中的 (1) 曲线, 以下同), 500V (2), 400V (3), 350V (4) 和 200V (5) 阶跃变化时, 在等离子体 (bulk) 区域中 $x = 10\text{mm}$ 点上的 SiH_3^- 负离子的数密度的过渡特性如图 2 所示. 在曲线 (1) (2) 和 (3) 三种情况中, 由于有足够的电能注入到等离子体内维持等离子体的反应, 同时, 在鞘层 (sheath) 区域形成了足够强的电场来维持等离子体的密度, 所以, 等离子体从一个稳定状态过渡到另一个稳定状态; 当电源电压振幅阶跃减小为 200V 时, 如图 2 中的曲线 (5) 所示, 由于没有足够的电能注入到等离子体中, 鞘层区域始终没有足够强的电场存在, 正负离子的生成速度小于消失 (扩散等因素) 速度, 所以等离子体逐渐地消失了. 在这里引起我们兴趣的是图 2 中的曲线 (4), 振幅从 550V 向 350V 阶跃减小时等离子体的过渡特性, 此时, 等离子体显现出以大约 4000RF 周期为周期的振荡特性.

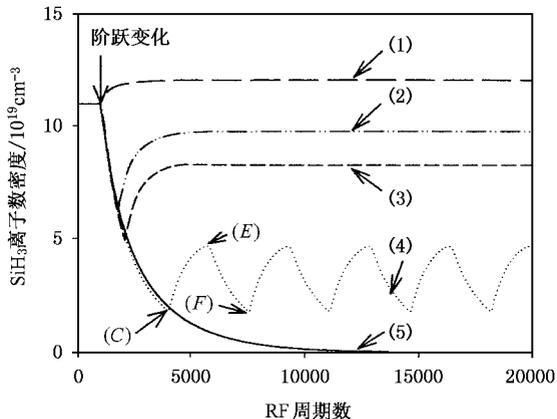


图 2 SiH_3^- 离子数密度的过渡特性

图 3 是电源电压振幅从 550V 向 350V 阶跃减小时, 鞘层区域中 $x = 2\text{mm}$ 点上的 SiH_3^- 负离子通量的过渡特性. (A) 为阶跃减小之前的通量, (B), (C), (D), (E) 分别为阶跃减小之后不同时刻该点的通量. 由 (2) 式可知, SiH_3^- 负离子的通量可以分为扩散分量和迁移分量两部分, SiH_3^- 负离子的迁移方向随 RF 电场的变化而变化, 然而, 一个周期内平均 $(\sum_0^T J(x, t) / T)$ 的结果是, 迁移分量的方向是由两电极指向电极间隔的中间点 ($x = 10\text{mm}$), 是以两电极间隔的中间点为对称的, 使 SiH_3^- 负离子从鞘层区域向等离子体区域迁移. 扩散分量的方向也是对称的, 扩散分量和迁移分量正好方向相反, 方向为由

两电极间隔的中间点指向两电极, 使 SiH_3^- 负离子从等离子体区域向鞘层区域扩散. 扩散分量使等离子体区域 SiH_3^- 的密度降低, 迁移分量使等离子体区域 SiH_3^- 的密度升高; 这两个分量的平衡使得等离子体密度处于平衡状态. 由于电源电压振幅阶跃式减小, 鞘层区域的电场强度相应减弱, SiH_3^- 向等离子体区域的迁移分量减小, 于是阶跃减小之前迁移分量和扩散分量的平衡被破坏, 扩散分量相对变大, 等离子体区域的 SiH_3^- 扩散到鞘层区域, 在 (B) 时刻鞘层区域的 SiH_3^- 负离子通量达到了最大值.

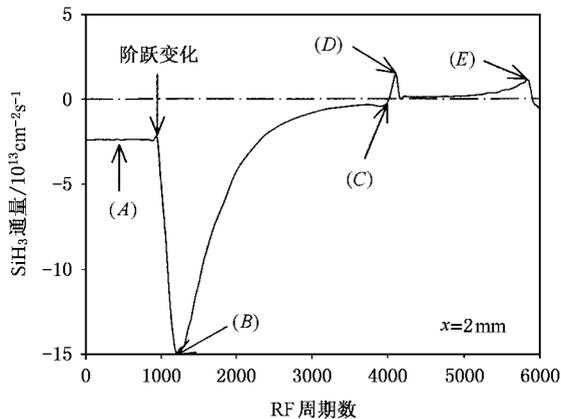


图 3 SiH_3^- 负离子通量的过渡特性

图 4 是与图 3 (A) (B) (C) (D) (E) 时刻相对应各时刻, 一个周期内时间平均的电场强度的空间分布. 如图 4 所示 (B) 时刻空间各点电场强度几乎为 0, 显示此时迁移分量几乎完全消失, 所以, SiH_3^- 负离子通量完全由扩散分量构成达到最大值 (图 3 (B)), 因此, 等离子体区域 SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子的密度单调降低. 由于等离子体区域等离子体密度的降低, 所以空间密度梯度相应变小, 扩散速度变慢, 扩散分量随之变小, 于是迁移分量相对开始上升, 当达到图 3 (C) 时刻时, SiH_3^- 负离子通量为 0, 即此时扩散分量与迁移分量大小相等, 此时在两电极的前面分别出现正负电场 (图 4 (C)), SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子的运动方向开始出现反向, 因此, SiH_3^- 负离子在此鞘层区域电场的作用下, 向等离子体区域迁移, 于是鞘层区域出现正的 SiH_3^+ 净电荷, SiH_3^- 负离子再次被 SiH_3^+ 正离子形成的电场俘获在等离子体区域, 其结果使鞘层区域的电场强度不断增强, 如图 4 (D) 和 (E), 进而增大了向等离子体区域迁移 SiH_3^- 负离子的力度, 使等

离子体区域 SiH_3^- 负离子的密度不断上升.

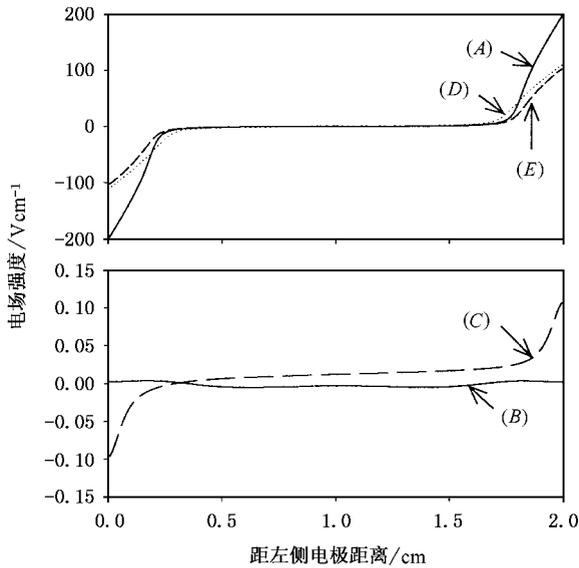


图 4 电场强度空间分布的过渡特性

3.2. SiH_3^- 离子的迁移率和扩散系数对振荡周期的影响

振荡现象是由于 SiH_3^- 负离子的迁移和扩散运动引起的,而 SiH_3^- 负离子的迁移和扩散特性是由 SiH_3^- 负离子的迁移率和扩散系数决定的。 SiH_3^- 负离子的迁移率和扩散系数对振荡周期的影响如图 5 和图 6 所示,图 5 为扩散系数不同时对振荡周期的影响,图 6 为迁移率不同时对振荡周期的影响,扩散系数增大(1.5 倍)或者迁移率减小(0.8 倍),则等离子体振荡周期变短;扩散系数减小(0.5 倍)或者迁移率增大(1.2 倍)则振荡周期变长.这是因为扩散系数越大等离子体区域的 SiH_3^- 负离子数密度降低得越快,所以振荡周期变短;而迁移率越大使 SiH_3^- 负离子俘获在等离子体区域的能力越强,阻碍 SiH_3^- 负离子数密度的降低,所以振荡周期变长.

3.3. 发生振荡现象的原因

对于硅烷低温等离子体,在电源电压振幅分别为 550V 和大于 350V 时,因为平均电子能量的差异不大,所以原子电离频率和电子吸附频率相差很小,如果没有其他因素存在,两种情况下等离子体的密度最终可以是相等的,然而,两种情况所不同的是鞘层区域电场强度的大小不等,即使负离子俘获在等离子体区域的能力不同,因此,使等离子体处于不同

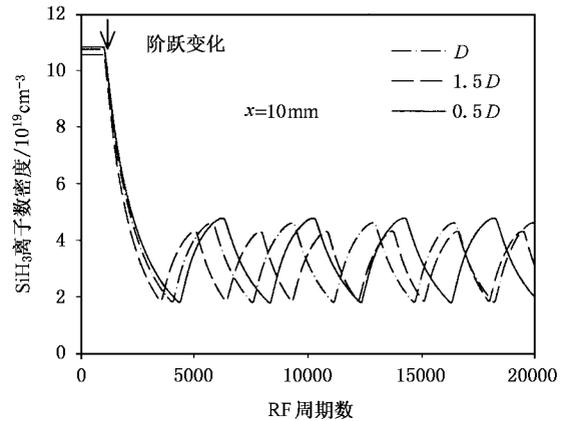


图 5 扩散系数对振荡周期的影响

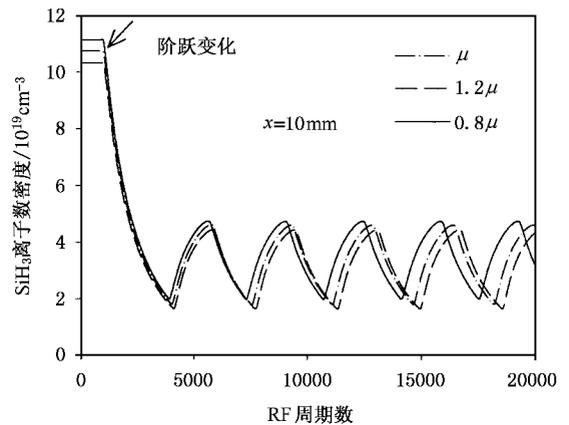


图 6 迁移率对振荡周期的影响

的平衡点,所以两种情况下,最终等离子体的密度不同.当电源电压振幅为 550V 前后时,鞘层区域存在着足够强的电场(图 4(A)),此电场平衡着等离子体区域的 SiH_3^- 负离子向两电极方向的扩散,从而使等离子体处于平衡状态.

当电源电压振幅阶跃减小为 350V 时, SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子数密度在电极间的空间分布如图 7 所示.图 7 中的 (E) 和 (F) 时刻分别为图 2 中的波峰 (E) 和波谷 (F) 的瞬间,是一个振荡周期中具有代表性的两个时刻.在 (E) 时刻,鞘层区域的 SiH_3^+ 正离子与 SiH_3^- 负离子数密度的差大约为 $10^8/\text{cm}^3$, 电场强度大约 100V/cm(图 4(E)).此时,使密度大约为 $4.5 \times 10^9/\text{cm}^3$ 的 SiH_3^- 负离子俘获在等离子体区域的电场的能力已经达到极限,而此时等离子体区域的原子电离和电子吸附等反应仍在进行, SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子密度仍在成指数形式上升,所以 (E) 时刻之后等离子体区域的 SiH_3^- 负

离子要以扩散的形式放出;又由于鞘层区域 SiH_3^- 负离子的密度梯度大于 SiH_3^+ 正离子,所以在鞘层区域 SiH_3^- 负离子扩散速度要大于 SiH_3^+ 正离子的扩散速度,因此,扩散使鞘层区域的 SiH_3^- 负离子密度迅速增加,使 SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子数密度相等,于是 SiH_3^+ 正离子空间电荷形成的鞘层区域的电场消失, SiH_3^- 负离子向等离子体区域的迁移分量消失,在扩散分量的作用下,等离子体密度和密度梯度同时开始下降,最终在 (F) 时刻密度下降到极小值. 此 (F) 时刻虽然 SiH_3^+ 正离子和 SiH_3^- 负离子数密度在整个空间几乎相等,且密度梯度同时也达到最小值,但是 (F) 时刻鞘层区域的正

负离子的密度却高于 (E) 时刻. 此时在 RF 外加电场的的作用下,正离子和负离子表现出相反的运动方向,所以在电极前面显现出净电荷密度为 $10^8/\text{cm}^3$ 的 SiH_3^+ 正离子鞘层区域,从而在鞘层区域形成大约 $100\text{V}/\text{cm}$ 的强电场. 由图 4 可知 (D) 时刻的鞘层区域的电场强度大于 (E) 时刻. 此电场使鞘层区域的 SiH_3^- 负离子向等离子体区域迁移,所以等离子体区域的等离子体密度再次上升;当密度再次上升到与 (E) 时刻相同的密度状态时,再次发生高密度等离子体扩散放出的现象,于是,形成了等离子体的振荡现象.

4. 结 论

本文对包含有 SiH_3^- 负离子的硅烷低温等离子体在 RF 电源电压振幅阶跃式变化情况下的过渡状态进行了仿真,结论概要如下:(1)处于稳定状态的低温等离子体,在其工作电源电压振幅发生阶跃式变化时,等离子体的过渡状态可能有 3 种情况;其一,从一个稳定状态过渡到另一个稳定状态;其二,从稳定状态过渡到等离子体的完全消失;其三,从一个稳定状态过渡到周期式的振荡状态.(2)硅烷低温等离子体的振荡现象是由 SiH_3^- 负离子的运动特性引起的,在周期式振荡状态中, SiH_3^- 负离子的迁移率和扩散系数对振荡周期的长短起决定性的作用.

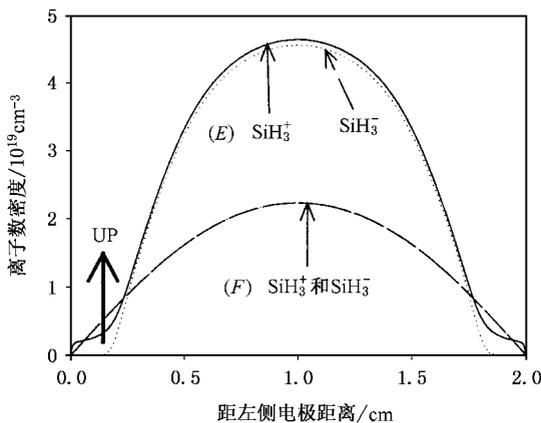


图 7 SiH_3^+ 和 SiH_3^- 数密度的空间分布

- [1] Lieberman M A and Lichtenberg A J 1994 *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* (New York : Wiley) 1 ,17
- [2] Sekine M 2001 *Japan Soc. Appl. Phys.* **70** 387
- [3] Tachi S 2000 *Japan Soc. Appl. Phys.* **69** 323
- [4] Samukawa S , Ohtake H and Mieno T 1996 *J. Vac. Sci. Technol.* **14** 3094
- [5] Meyyappan M 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 2122
- [6] Ahn T H , Nakamura K and Sugai H 1996 *Plasma Sources Sci. Technol.* **5** 139
- [7] Goto N 1998 *J. Appl. Phys. D* **31** 428
- [8] Yang J , Ventzek P L G , Sakai Y , Date H , Kitamori K and Tagashira H 1997 *J. Appl. Phys.* **82** 2093
- [9] Yang J , Ventzek P L G , Sugawara H , Sakai Y , Kitamori K , Tagashira H and Meyyappan M 1998 *J. Appl. Phys.* **84** 1848
- [10] Wang J H and Jin C E 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1116 (in Chinese)
[王建华、金传恩 2004 物理学报 **53** 1116]
- [11] Kushner M J 1988 *J. Appl. Phys.* **63** 2532
- [12] Date A , Kitamori K , Sakai Y and Tagashira H 1991 *T. IEE Japan.* **111** A 962
- [13] Ohmori Y , Simozuma M and Tagashira H 1986 *J. Appl. Phys. D* **19** 1029
- [14] Goedheer W J and Meijer P M 1995 *IEEE Trans. on Plasma Sci.* **23** 644
- [15] Makabe 1996 *The Institute of Electrical Engineers of Japan Technical Report* **595** 65
- [16] Chapman B 1980 *Glow Discharge Processes : Sputtering and Plasma Etching* (New York :Wiley ;Tokyo) 144
- [17] Sato N and Tagashira H 1991 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **19** 102
- [18] Yang J et al 1993 *Proceedings of The Hokkaido Chapter of The Institute of Electrical Engineers of Japan* p24
- [19] Yang J 1999 *Ph. D. thesis* (Hokkaido University) No. 4766 ,101
- [20] Boswell R W and Vender 1991 *IEEE Trans. on Plasma Sci.* **19** 141

Simulation of step response of silane low-temperature plasma (1)*

Yang Jing Li Jing-Zhen Sun Xiu-Quan Gong Xiang-Dong

(School of Engineering and Technology , Shenzhen University , Shenzhen 518060 ,China)

(Received 31 May 2004 ; revised manuscript received 18 November 2004)

Abstract

Understanding of the transient response of electronegative radio-frequency glow plasmas is important for process control , better selectivity etch technology and charge free etching. We have investigated the step responses of RF (13.56MHz) silane gas plasmas at a pressure of 0.5 Torr ($0.5 \times 103.33\text{Pa}$). The result showed that , when the power voltage changed stepwise from 550V to 350V , a steady state pulsed plasma oscillation at a few kHz appeared. The transient behavior and oscillation were interpreted in terms of the transport and chemistry of charge carriers in the plasma.

Keywords : mobility , diffusion coefficient , step-response , plasma oscillation

PACC : 5265 , 5235 , 5225F , 5240K

* Project supported by the Scientific Research Foundation for Returned Overseas Chinese Scholars from the Ministry of Education of China.