



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

Сравнение двух моделей плазмохимических процессов при осаждении нитрида Кемния

Konakov, S.A.; Krzhizhanovskaya, V.V.

Publication date

2011

Document Version

Final published version

Published in

XL Неделя науки СПбГПУ

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Konakov, S. A., & Krzhizhanovskaya, V. V. (2011). Сравнение двух моделей плазмохимических процессов при осаждении нитрида Кемния. In E. V. Vochagina (Ed.), *XL Неделя науки СПбГПУ: материалы международной научно-практической конференции* (Vol. 6, pp. 132-134). Sankt-Peterburgskii gosudarstvennyi politekhnicheskii universitet. <https://docplayer.ru/41761987-XI-nedelya-nauki-spbgpu-materialy-mezhdunarodnoy-nauchno-prakticheskoy-konferencii-ch-vi-spb-izd-vo-politehn-un-ta-s.html>

General rights

It is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), other than for strictly personal, individual use, unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

Disclaimer/Complaints regulations

If you believe that digital publication of certain material infringes any of your rights or (privacy) interests, please let the Library know, stating your reasons. In case of a legitimate complaint, the Library will make the material inaccessible and/or remove it from the website. Please Ask the Library: <https://uba.uva.nl/en/contact>, or a letter to: Library of the University of Amsterdam, Secretariat, Singel 425, 1012 WP Amsterdam, The Netherlands. You will be contacted as soon as possible.

XL Неделя науки СПбГПУ : материалы международной научно-практической конференции. Ч. VI. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2011. – 144 с.

В сборнике публикуются материалы докладов студентов, аспирантов, молодых ученых и сотрудников Политехнического университета, вузов Санкт-Петербурга, России, СНГ, а также учреждений РАН, представленные на научно-практическую конференцию, проводимую в рамках ежегодной XL Недели науки Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Доклады отражают современный уровень научно-исследовательской работы участников конференции в области фундаментальных, технических, экономических, социальных и гуманитарных наук.

Представляет интерес для специалистов в различных областях знаний, учащихся и работников системы высшего образования и Российской академии наук.

Печатается по решению редакционно-издательского совета
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

Редакционная коллегия факультета технологии и исследования материалов:

*Г.А. Туричин (декан ФТИМ), Е.В. Бочагина (отв. ред.),
П.В. Ковалев, В.М. Голод, С.И. Выступов,
Е.В. Богомолова, А.А. Григорьев, С.А. Ермаков, А.Ф. Липаев*

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2011

УДК 66.088

С.А. Конаков (4 курс, кафедра ФХМНТ), В.В. Кржижановская (доц., каф. ФХМНТ)

СРАВНЕНИЕ ДВУХ МОДЕЛЕЙ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ОСАЖДЕНИИ НИТРИДА КРЕМНИЯ

Нитрид кремния широко используется в технологии микро- и нанoeлектроники для создания пассивирующего слоя и в качестве маски для травления [1]. Оптимизация процесса осаждения нитрида – важная задача, решение которой позволит выработать нетривиальные технологические приемы создания перспективных материалов с новыми свойствами [2].

Цель работы – провести численное моделирование плазмохимических процессов осаждения нитрида кремния методом PECVD.

За основу взята химическая система из силана, аммиака и азота. Предполагается, что можно выделить две «независимые» подсистемы: Si-H (исходное вещество SiH_4), и N-H (исходные вещества NH_3 и N_2).

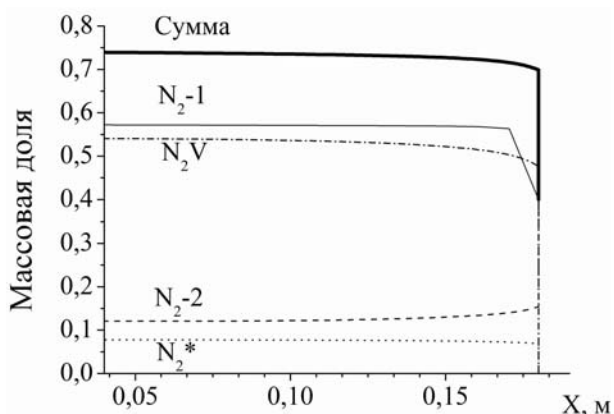


Рис. 1. Распределение азота по сечению реактора. N_2-1 – молекулярный азот в первой модели; N_2-2 – молекулярный азот, N_2V – колебательно-возбужденные молекулы, N_2^* – электронно-возбужденные молекулы во второй модели. Сумма = $N_2-2 + N_2V + N_2^*$.

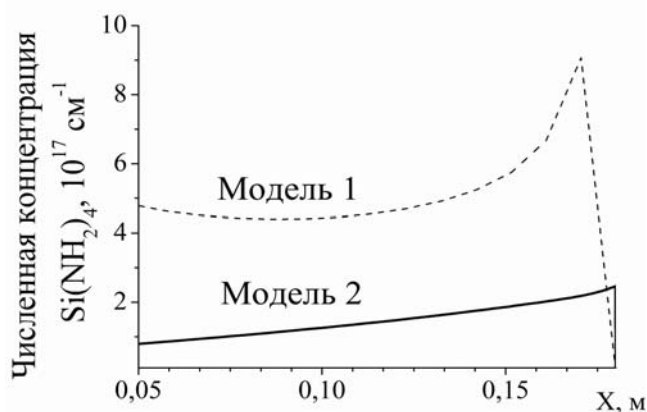


Рис. 2. Распределение $Si(NH_2)_4$ по сечению реактора

В области плазмы взаимное влияние компонентов минимально, т. к. преобладают процессы разупорядочивания системы: генерация ионов, радикалов и свободных атомов.

Вне плазмы доминирует тенденция к структуризации – взаимодействию активных частиц с образованием новых химических компонентов. В этой области существует единая система из молекул и радикалов, которая описывается термодинамическими законами.

В рамках данной работы были созданы две модели плазмохимических процессов, протекающих в газовой фазе. Первая (базовая) модель включает 56 компонентов и 152 химических реакций. Во второй модели описано 70 составляющих (введены H , NH_2^- , N_2V , NH_3V , N_2V , Si_2H_4 и др.) и 280 реакций. Компоненты ограничены стехиометрическими формулами: Si_2H_n , N_2H_m и SiN_xH_y , что оправдано при низких давлениях и высоких скоростях прокачки. В других условиях образуются высшие силаны, формирующие наночастицы [3].

Расчеты проводились с использованием пакета «ESI CFD-ACE+». За основу взята модель химического реактора с индуктивно-связанной плазмой [4]. Частота поля – 13.56 МГц, давление – 1 Па, газовая смесь: SiH_4 – 20%, NH_3 – 40%, N_2 – 40%.

Результаты показывают, что модели имеют различия, но общие закономерности находят подтверждение в литературе [5], что позволяет говорить о корректности расчетов.

В первой модели наблюдается рост массовой доли молекулярного азота от начальной величины 0.4 на входе ($X=0.18$ м) до средней величины 0.57, что показано на рис. 1. Для второй модели характерна схожая тенденция, что выявляется при рассмотрении возбужденных колебательных и электронных состояний молекул азота. Сумма трех компонентов достигает средней величины 0.74.

Можно сделать вывод о том, что в системе происходит генерация молекулярного азота, который значительно устойчивее, чем аммиак. Увеличение детализации модели путем введения новых составляющих позволило выявить новые важные свойства этого процесса.

Введение во вторую модель компонентов Si_2H_3 , Si_2H_4 , Si_2H_5 увеличило содержание молекул Si_2H_6 на три порядка (с 10^{13} до 10^{16} , $см^{-3}$). Усиление ухода кремния в полимерные образования снижает скорость синтеза основных азот-кремниевых соединений.

Распределение численной концентрации $Si(NH_2)_4$ для двух моделей показано на рис. 2. Абсолютные величины отличаются в 2-4 раза, а характер зависимостей различен. Для второй модели характерен меньший градиент и отсутствие роста концентрации $Si(NH_2)_4$ при приближении к подложке ($X \leq 0.07$ м). Это объясняется улучшением детализации описания

процессов взаимодействия кремневодородов с радикалами аммиака за счет добавления более 30 реакций, регулирующих соотношение компонентов в данной системе.

Изменение плазмохимической модели влияет на результаты расчетов. Введение новых составляющих расширяет степень свободы системы и снимает «вырождение» по некоторым физическим параметрам, что реализует эффекты «высших порядков». Увеличение числа реакций является механизмом «точной настройки». Введение медленных и маловероятных процессов редко приводит к качественным изменениям. Правильный выбор минимально необходимого количества реакций позволяет редуцировать модель, без снижения качества.

В заключение можно сказать о том, что для корректного описания плазмохимических процессов необходимо в первую очередь определить компонентный состав системы, и только после этого уделить внимание химическим взаимодействиям. Моделирование механизмов на поверхности подложки требует дополнительного изучения, но получение хороших результатов невозможно без правильного описания явлений в объеме реактора.

Дальнейшая работа будет направлена на детализацию модели поверхностных процессов при осаждении нитрида кремния. Предполагается провести серию расчетов при различных условиях в системе. Результаты могут быть проверены на экспериментальных установках для подтверждения правильности построения модели. Полученные данные можно будет использовать при разработке опытных и промышленных технологических процессов осаждения нитрида кремния и новых материалов на его основе.

ЛИТЕРАТУРА:

1. M. Kohler, *Etching in microsystem technology*. – Wiley-VCH, 1999.
2. С.А. Конаков, В.В. Кржижановская. Компьютерное моделирование процесса осаждения многослойных структур на основе нитрида кремния методом PECVD. Материалы пятого всероссийского форума студентов, аспирантов и молодых ученых «Наука и инновации в технических университетах», стр. 12-13. Изд-во Политехнического университета, Санкт-Петербург 2011.
3. Y.E. Gorbachev, M.A. Zatevakhin, A.A. Ignatiev, V.V. Krzhizhanovskaya. Numerical modeling of heat and mass transfer processes in PECVD reactors for growing silicon films under the conditions of intense formation of higher silanes in the gas phase. *Heat Transfer Research* 38 (1). pp. 71-84 2007.
4. И.С. Киселева, В.В. Кржижановская. Разработка модели роста пленки нитрида кремния в удаленной плазме с индукционным методом возбуждения ВЧ разряда пониженного давления. Труды международной научно-практической конференции «XXXIX НЕДЕЛЯ НАУКИ СПбГПУ». Часть VI, стр. 116-117. Изд-во Политехнического университета, Санкт-Петербург 2010.
5. A. Dollet, J. P. Couderc, B. Despax., Analysis and numerical modeling of silicon nitride deposition in a plasma-enhanced chemical vapor deposition reactor// *Plasma Sources Sci. Technol.* – 4. – 1995.