



UvA-DARE (Digital Academic Repository)

Компьютерное моделирование и экспериментальные исследования закономерностей плазмохимического осаждения тонких пленок нитрида кремния

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

Publication date

2014

Document Version

Final published version

Published in

Неделя науки СПбГПУ : материалы Научно-практической конференции с международным участием, 2-7 декабря 2013 года

[Link to publication](#)

Citation for published version (APA):

Konakov, S. A., & Krzhizhanovskaya, V. V. (2014). Компьютерное моделирование и экспериментальные исследования закономерностей плазмохимического осаждения тонких пленок нитрида кремния. In E. V. Novikov (Ed.), *Неделя науки СПбГПУ : материалы Научно-практической конференции с международным участием, 2-7 декабря 2013 года: Институт металлургии, машиностроения и транспорта* (Vol. 2, pp. 31-33). Sankt-Peterburgskii gosudarstvennyi politekhnicheskii universitet. <https://week-science.spbstu.ru/userfiles/volumes/66/file.pdf>

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.

UvA-DARE is a service provided by the library of the University of Amsterdam (<https://dare.uva.nl>)

Министерство образования и науки Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

НЕДЕЛЯ НАУКИ СПбГПУ



Материалы
научно-практической
конференции
с международным участием

2–7 декабря 2013 года

ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ, МАШИНОСТРОЕНИЯ И ТРАНСПОРТА

ЧАСТЬ 2



Санкт-Петербург • 2014

УДК 621.762:621.771:621.74:669.017
ББК 30.3
Н 42

Неделя науки СПбГПУ : материалы научно-практической конференции с международным участием. **Институт металлургии, машиностроения и транспорта СПбГПУ. Ч. 2.** – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2014. – 115 с.

В сборнике публикуются материалы докладов студентов, аспирантов, молодых ученых и сотрудников Политехнического университета, вузов Санкт-Петербурга и России, представленные на научно-практическую конференцию, проводимую в рамках ежегодной Недели науки Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Доклады отражают современный уровень научно-исследовательской работы участников конференции в области технологий получения и обработки новых материалов.

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

Редакционная коллегия Института металлургии, машиностроения
и транспорта СПбГПУ:

*А.А. Попович (директор института), Е.В. Новиков (отв. ред.), В.Д. Андреева,
П.В. Ковалев, В.М. Голод, С.И. Выступов, Р.В. Старых, М.В. Барышникова,
Т.С. Кольцова, С.В. Ганин, С.А. Котов, С.А. Ермаков*

Конференция проведена при финансовой поддержке
Комитета по науке и высшей школе Правительства Санкт-Петербурга.

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

ISBN 978-5-7422-4347-2 (ч. 2)
ISBN 978-5-7422-4324-3

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2014

УДК 66.088

С.А. Конаков, В.В. Кржижановская
(Санкт-Петербургский государственный политехнический университет)

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ
ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ТОНКИХ ПЛЕНОК
НИТРИДА КРЕМНИЯ**

Компьютерное моделирование сложных физико-химических процессов производства изделий нанoeлектроники и микросистемной техники является неотъемлемой частью разработки и оптимизации современных технологий. Ключевым аспектом при этом является точность модели и её способность предсказывать новые результаты [1].

Целью исследования являлась разработка многофакторной компьютерной модели технологического процесса плазмохимического осаждения тонких пленок нитрида кремния, для её дальнейшего применения при решении исследовательских и производственных задач.

Подобная задача уже решалась различными группами исследователей [2 – 4]. Однако представленные работы отличаются ограниченностью рассматриваемых параметров и отсутствием подробного сравнения с экспериментом. Отличительной особенностью настоящей работы является рассмотрение типового промышленного процесса, а также анализ влияния параметров на химический состав пленки.

Обзор литературных источников, посвященных рассматриваемому технологическому процессу, позволяет говорить, что для большого числа практически важных задач можно разрабатывать модель на основе ограниченного числа ключевых параметров, перечень которых представлен в таблице 1.

Таблица 1

Ключевые параметры модели

Параметр	Название	Обозначение	Диапазон значений
r_i – исходные данные	Давление	P	0,5 – 5 Торр
	Расход силана (5 % SiH ₄ в Ar)	[SiH ₄]	25 – 500 ст.см ³ /мин
	Расход аммиака	[NH ₃]	0 – 25 ст.см ³ /мин
	Расход азота	[N ₂]	0 – 800 ст.см ³ /мин
	Температура подложки	T	300 – 700 К
	Мощность плазмы	W	5 – 1000 Вт
q_i – результаты расчетов	Скорость осаждения	R	1 – 100 нм/мин.
	Концентрация кремния в пленке	C _{Si}	25 – 70 ат.%
	Атомное соотношение кремния к азоту в пленке	Si/N	0,6 – 0,9

Разрабатываемая модель должна производить расчеты скорости осаждения и состава пленки нитрида кремния на основе исходных значений технологических параметров. Кроме того, в модели необходимо учесть то, что процесс является нестационарным, а геометрия процессной камеры и применяемая в расчетах система химических реакций существенно влияют на получаемые результаты.

Критерием точности для построенной модели является безразмерный параметр K (в общем случае вектор с элементами K_i), который определяется следующим выражением:

$$K_i = \text{Max}(|q_i - q'_i| / q'_i),$$

где q_i – значения, полученные в результате численного моделирования, q'_i – экспериментальные данные. При этом модель считается приемлемой, когда для всех переменных выполняется условие $K_i \leq \varepsilon_i$, где ε_i – допустимая погрешность по параметру q_i .

Если в распоряжении имеется набор экспериментальных данных для проверки результатов моделирования, то в этом случае можно говорить, что основная задача сводится к обоснованному выбору параметров модели при которых будет выполняться условие $K < \varepsilon$.

В рассматриваемых условиях задачи можно принять, что модель является применимой при отклонении скорости осаждения R не более чем на $\varepsilon_1 = 10\%$, и атомного соотношения кремния к азоту в пленке Si/N не более чем на $\varepsilon_2 = 15\%$.

В настоящей работе разработана модель процесса плазмохимического осаждения тонких пленок нитрида кремния на технологической установке «Plasmalab system 100». Для проверки модели были проведены экспериментальные работы во время стажировки в «Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf». Определение скорости осаждения производилось на основании измерений толщины пленок методом эллипсометрии. Химический состав определялся методом Фурье-ИК спектроскопии.

Разработанная модель реализована в программном пакете CDF-ACE+. В основе лежат предположения о ламинарном газовом потоке, и о возможности применения уравнений Навье-Стокса в подходе динамики сплошной среды. Некоторые детали используемой модели изложены в работах [5, 6]. Химические взаимодействия в плазме между исходными газовыми компонентами, которые приводят к осаждению пленки нитрида кремния, описаны системой гомогенных и гетерогенных реакций, разработанной на основе публикаций [2, 4].

Рассмотрим результаты расчетов с использованием модели и данные, полученные в эксперименте, в зависимости от различных значений технологических параметров.

Изменение суммарного газового потока с сохранением пропорции подачи газов приводит к нелинейному изменению скорости осаждения. Модель показывает существование максимума при расходе $765 \text{ ст.см}^3/\text{мин}$, в то время как экспериментальные данные такого поведения не обнаруживают. Однако малая ширина диапазона изменения параметра не позволяет однозначно определить причину существования указанных отклонений. Тем не менее, значение параметра K_1 не превышает 3% . Химический состав пленок в серии изменяется слабо и отклонение результатов расчетов составляет не более 5% .

Увеличение потока силана со 100 до $400 \text{ ст.см}^3/\text{мин}$ при фиксированном общем расходе приводит к уменьшению скорости осаждения. Экспериментальные и расчетные зависимости представлены на рис. 1. Значение параметра K_1 в этом случае также менее 3% . Анализ результатов моделирования позволяет объяснить характер обнаруженных закономерностей. С увеличением расхода силана падает концентрация электронов и групп NH_2 , которые в данных условиях лимитируют процесс осаждения пленки нитрида кремния. Уменьшение расхода силана приводит к значительным изменениям химического состава пленки и к обогащению её кремнием. Так для образца с $[SiH_4] = 100 \text{ ст.см}^3/\text{мин}$ $Si/N' = 0,71 \pm 0,05$, в то время как расчетный параметр $Si/N = 0,64$ ($K_2 < 10\%$).

Увеличение расхода аммиака с 5 до $20 \text{ ст.см}^3/\text{мин}$ приводит к уменьшению скорости осаждения пленки. Результаты моделирования и экспериментальные данные находятся в хорошем соответствии ($K_1 < 3\%$), как представлено на рис. 2. Модель показывает, что концентрация аммониевых радикалов возрастает с увеличением расхода аммиака, причем с различной скоростью: концентрации $\text{Si}(\text{NH}_2)_4$, $\text{HSi}(\text{NH}_2)_3$ и $\text{Si}(\text{NH}_2)_3$ возросли значительно больше, чем $\text{HSi}(\text{NH}_2)$. Можно сделать вывод о том, что при малом расходе аммиака происходит преимущественное образование соединений со связями Si-H, а не Si-NH₂, что непосредственно влияет на свойства нитрида. Экспериментальная оценка состава пленки для

$[NH_3] = 5 \text{ ст.см}^3/\text{мин}$ составляет $Si/N' = 1,55 \pm 0,05$, в то время как расчетный параметр $Si/N = 1,36$ ($K_2 < 13 \%$).

Серия экспериментов и расчетов при увеличении мощности ВЧ разряда с 5 до 20 Вт показывает, что в этом случае возрастает скорость осаждения пленки. Сравнение численных и экспериментальных данных дает значение параметра $K_1 < 6 \%$. Значительного изменения химического состава при этом не происходит.

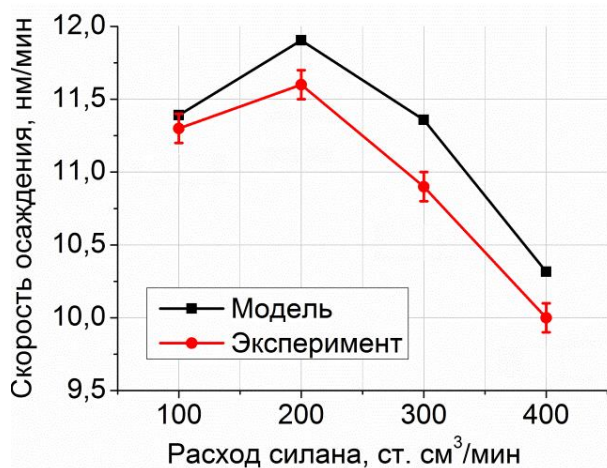


Рис. 1. Зависимость скорости осаждения от расхода силана

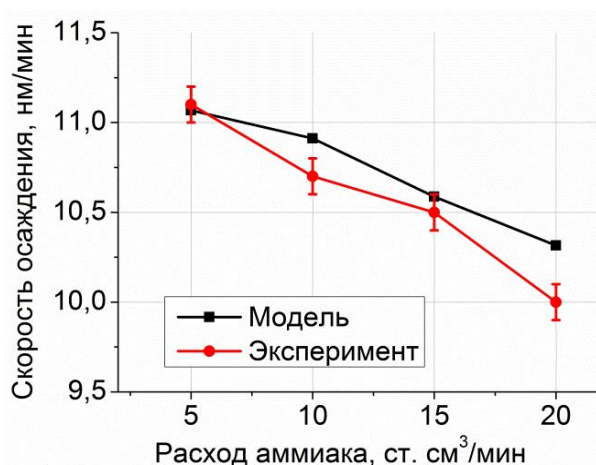


Рис. 2. Зависимость скорости осаждения от расхода аммиака

Таким образом, можно заключить, что разработанная модель процесса плазмохимического осаждения нитрида кремния позволяет с приемлемой точностью получать значения скорости осаждения пленки и её химического состава в рассматриваемом диапазоне технологических параметров. Разработанную модель можно использовать для оптимизации технологических процессов, а также для создания принципиально новых технологий с целью применения их в области нано- и микросистемной техники.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Александров С.Е., Болдырев Ю.Я., Петухов Е. П. и др. Высокопроизводительные вычисления и нанотехнологии на примере задач газофазного синтеза. // Труды Международной научной конференции «Научный сервис в сети Интернет: эксафлопное будущее». М.: Изд-во МГУ, 2011 г. с. 41.
2. M.J. Kushner, Simulation of the gas-phase processes in remote-plasma-activated chemical-vapor deposition of silicon dielectrics using rare gas-silane ammonia mixtures // J. Appl. Phys. –1992. – Vol. 71. – No. 9. – P. 4173 – 419.
3. A. Dollet, J.P. Coudere, B. Despax, Analysis and numerical modelling of silicon nitride deposition in a plasma-enhanced chemical vapour deposition reactor // Plasma Sources Sci. Technol. – 1995. – Vol 4. – P. 94 – 106.
4. M. Bavafa, H. Ilati, B. Rashidian, Comprehensive simulation of the effects of process conditions on plasma enhanced chemical vapor deposition of silicon nitride // Semicond. Sci. Technol. – 2008. Vol. 23. – No. 9. – 19 p. doi:10.1088/0268-1242/23/9/095023.
5. С.А. Конаков, В.В. Кржижановская Сравнение двух моделей плазмохимических процессов при осаждении нитрида кремния // Труды международной научно-практической конференции «XL НЕДЕЛЯ НАУКИ СПбГПУ». – Изд-во Политехнического университета, Санкт-Петербург, 2011. – Часть VI. – с. 132 – 134.
6. Конаков С.А. Дипломная работа «Моделирование и оптимизация технологического процесса плазмохимического осаждения (PECVD) нитрида кремния», Санкт-Петербург, СПбГПУ, 2013, 126 с.