

基于 COMSOL 的 Ion-Filter ICP 腔室仿真

韩传银¹, 程嘉², 路益嘉², 杨义勇¹

1. 中国地质大学(北京), 工程技术学院, 海淀区学院路29号, 北京, 100083

2. 清华大学, 机械工程系, 海淀区清华园1号, 北京, 100084

引言: 增强型化学气相沉积 (PECVD) 广泛应用于光学薄膜和涂层的制备工艺中。在实际工艺中激发态粒子在气相反应和表面反应中占据主导地位, 但离子轰击能量会对基片质量造成损伤。针对离子控制能量的研究众多, 比如远程控制等离子体系统 (ECR) 等。本文通过仿真研究了带离子筛网的 ICP 设备等离子体放电过程, 仿真结果验证离子筛网能有效抑制基片表面离子数密度与离子轰击能量并提高激发态粒子与离子的比例。

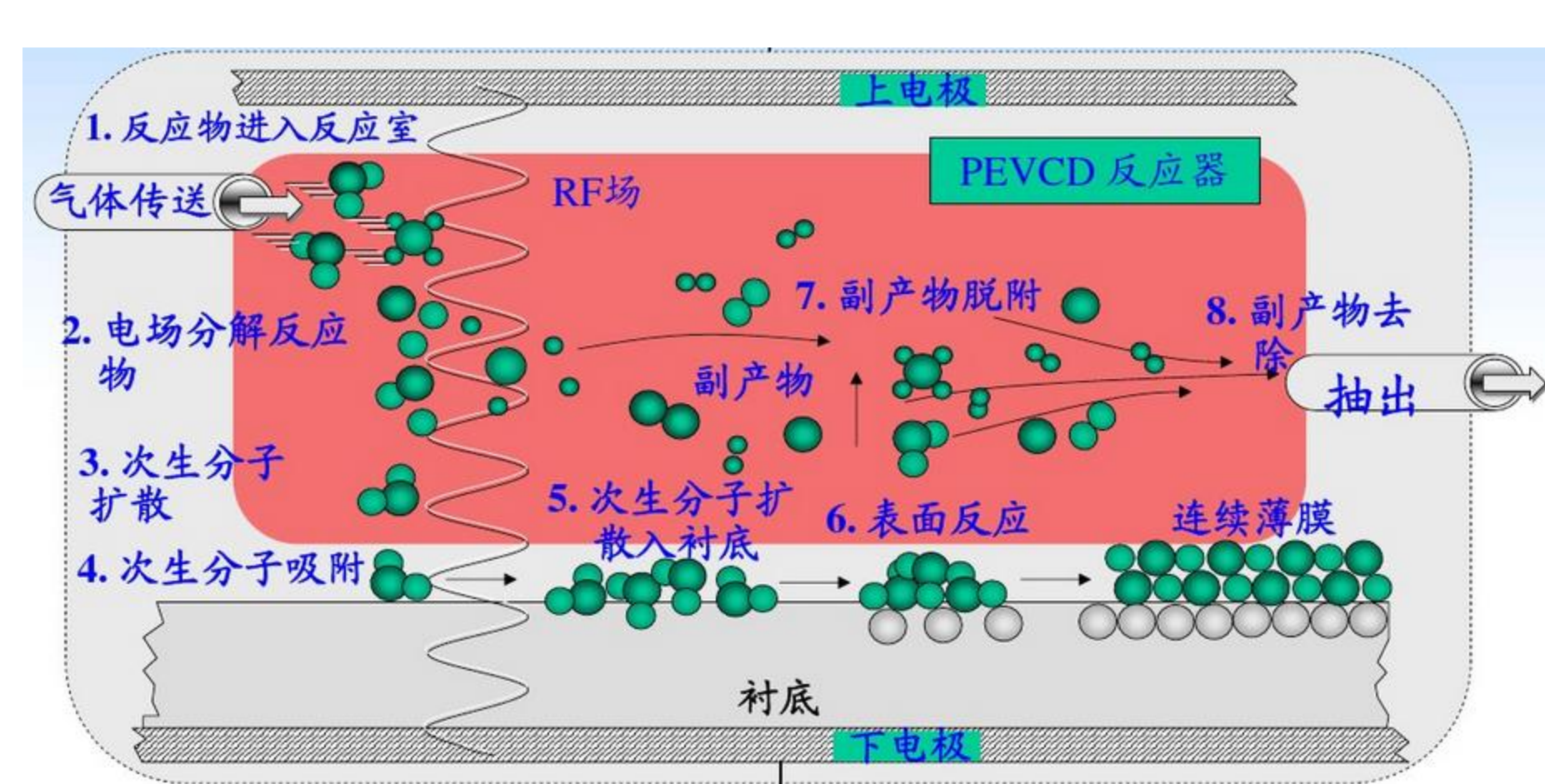


图 1 PECVD 工艺工作原理

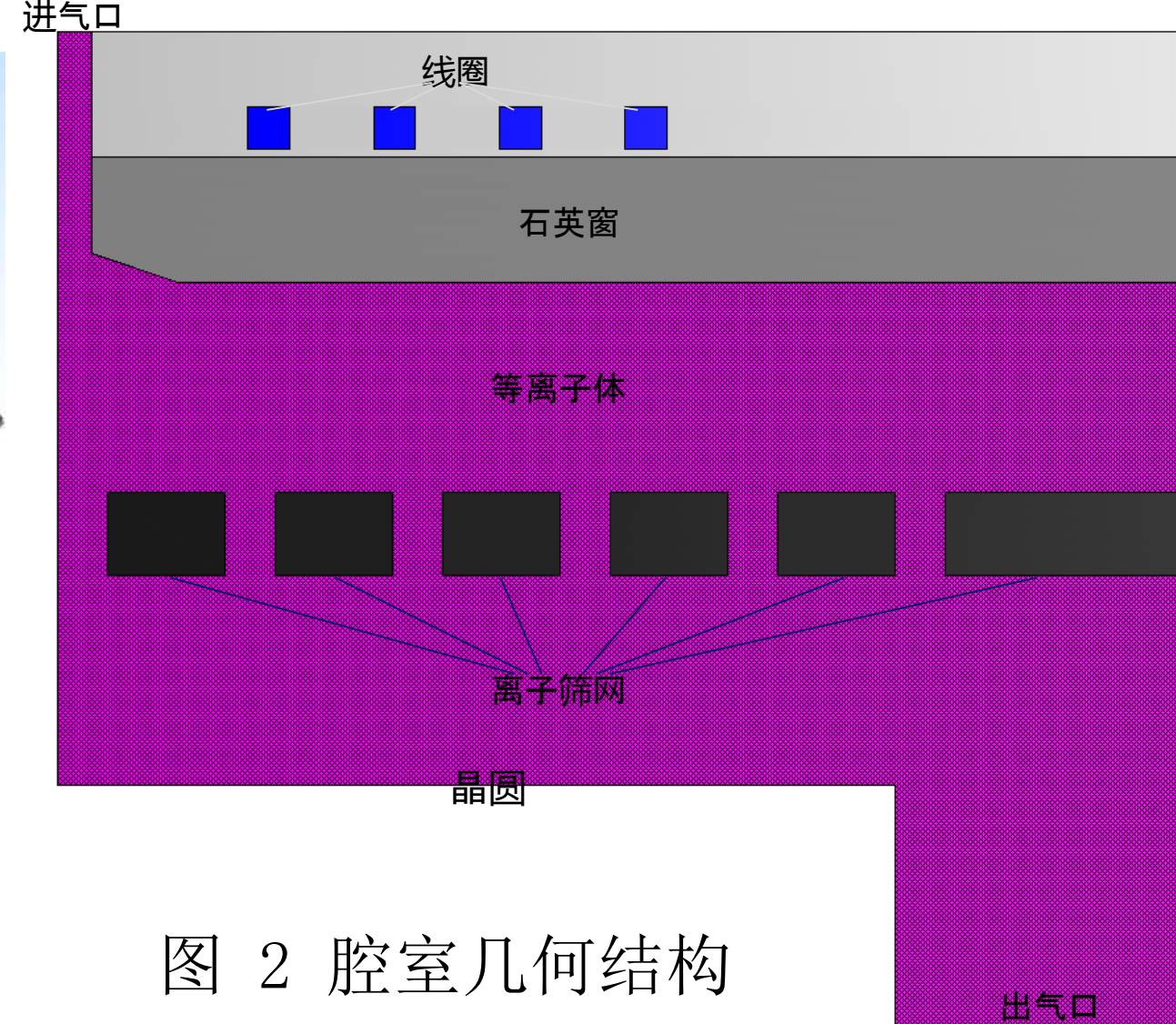


图 2 腔室几何结构

计算方法: 仿真主要对 PECVD 工艺前端等离子体产生过程仿真研究, 研究氩气等离子体放电参数及分布。主要放电方程、模块耦合仿真流程及放电参数如下所示:

REACTION	FORMULA	TYPE	ΔE (eV)
1	$e+Ar \Rightarrow e+Ar$	Elastic	0
2	$e+Ar \Rightarrow e+Ar^*$	Excitation	11.5
3	$e+Ar \Rightarrow e+Ar^+$	Superelastic	-11.5
4	$e+Ar \Rightarrow 2e+Ar^+$	Ionization	15.8
5	$e+Ar \Rightarrow 2e+Ar^+$	Ionization	4.24
6	$Ar+Ar \Rightarrow e+Ar+Ar^+$	Penning ionization	-
7	$Ar+Ar \Rightarrow Ar+Ar$	Metastable quenching	-

图 3 氩气放电反应方程及参数

反应速率分布为 $3.734E8$ 和 $1807 \text{ m}^3/(\text{s mol})$

Psp	200 W	输入功率
p0	10 Pa	放电气压
freq	13.56 MHz	放电频率
Q_in	20 SCCM	进气流量
T0	300 K	气体温度

表 1 等离子体放电参数

$$(\omega\sigma - \omega^2\epsilon_0\epsilon_r)\mathbf{A} + \nabla \times (\mu_0^{-1}\mu_r^{-1}\mathbf{B}) - \sigma\mathbf{v} \times \mathbf{B} = \mathbf{J}_e$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

电磁场计算公式

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e = R_e - (\mathbf{u} \cdot \nabla)n_e$$

电子密度计算公式

$$\Gamma_e = -(\mu_e \cdot \mathbf{E})n_e - D_e \cdot \nabla n_e$$

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \nabla \cdot \Gamma_e + \mathbf{E} \cdot \Gamma_e = S_{en} - (\mathbf{u} \cdot \nabla)n_e + (Q + Q_{gen})/q$$

电子能量计算公式

$$\Gamma_e = -(\mu_{en} \cdot \mathbf{E})n_e - D_{en} \cdot \nabla n_e$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V$$

$$\nabla \cdot (\epsilon_0\epsilon_r \mathbf{E}) = \rho_v$$

静电场计算公式

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mu(\nabla\mathbf{u} + (\nabla\mathbf{u})^T)] + \mathbf{F}$$

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0$$

单相流流动方程

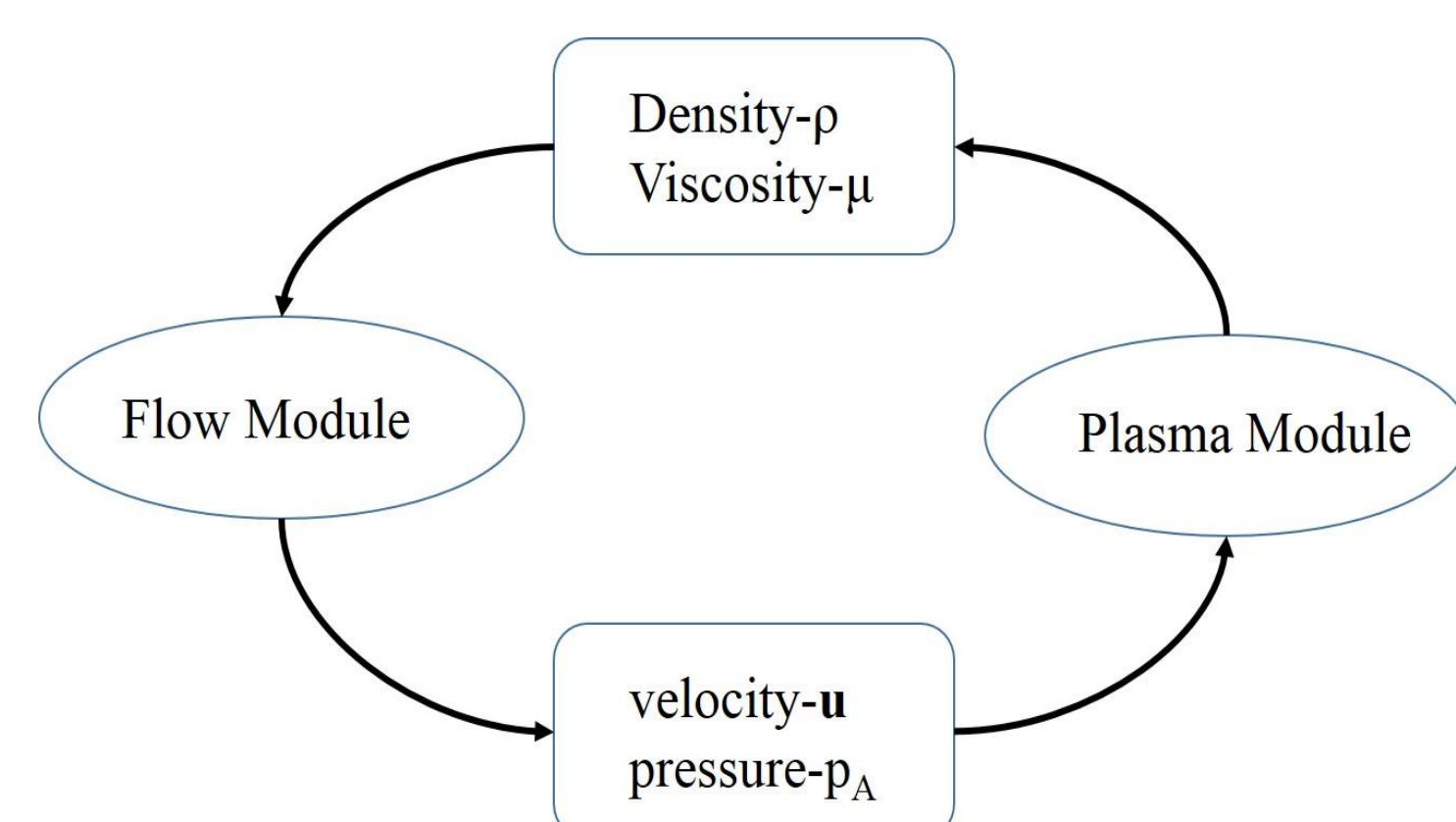


图 4 等离子体流场耦合流程图

仿真假设:

- 1、等离子体为理想气体, 且离子能量函数满足 Maxwellian 分布, 放电满足准中性假设;
- 2、流体为可压缩流且马赫数小于 0.3, 流体计算中满足恒温条件。进气口流量为 20 SCCM, 出气口压力恒定为 10 Pa。

在本次仿真中通过流体和等离子体模型耦合计算得到放电腔室内的等离子体放电参数分布及流场的分布情况。仿真中两模块通过参数在计算过程中耦合实现两模块双向耦合。等离子体模块为流体模型提供背景气体密度和动力学粘度, 流体模块为等离子体模型提供气压和流速。计算时等离子体模块在频域瞬态下求解, 流体模块在稳态下求解, 计算过程中结果实时交互, 保证结果的准确性。

结果: 图 6、7 显示传统 ICP 与 I-F ICP 设备放电参数分布云图及分布曲线, 离子筛网对等离子体放电参数分布影响较大, 能有效抑制基片表面的离子数; 图 8 显示基片表面离子能量分布曲线; 9、10 显示存在离子筛网下流场对等离子体参数分布的影响, 结果表明流场对电子的运动影响较小但能加速通过筛网激发态粒子, 提高基片表面数密度。

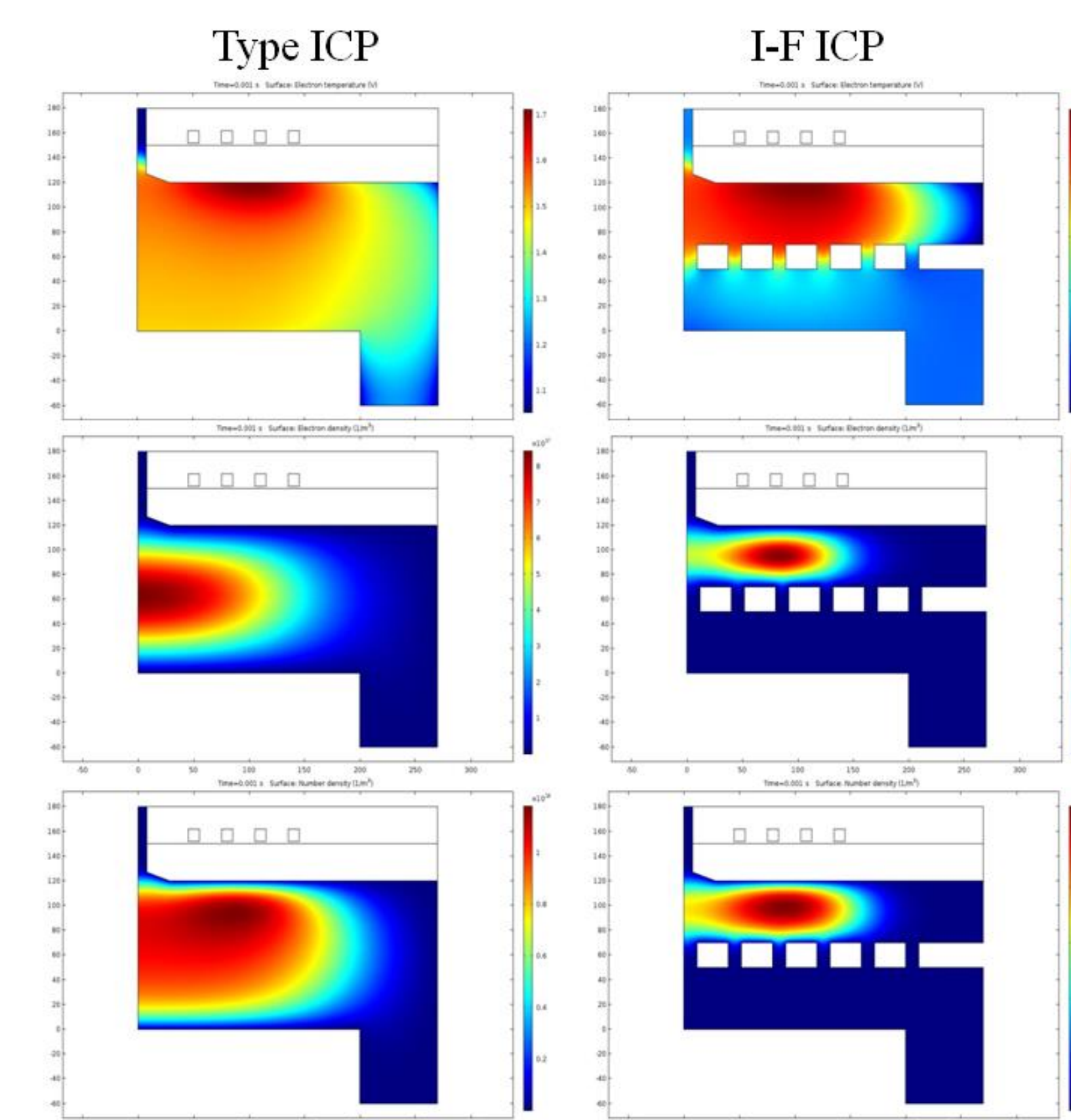


图 6 不同设备等离子体放电参数分布图

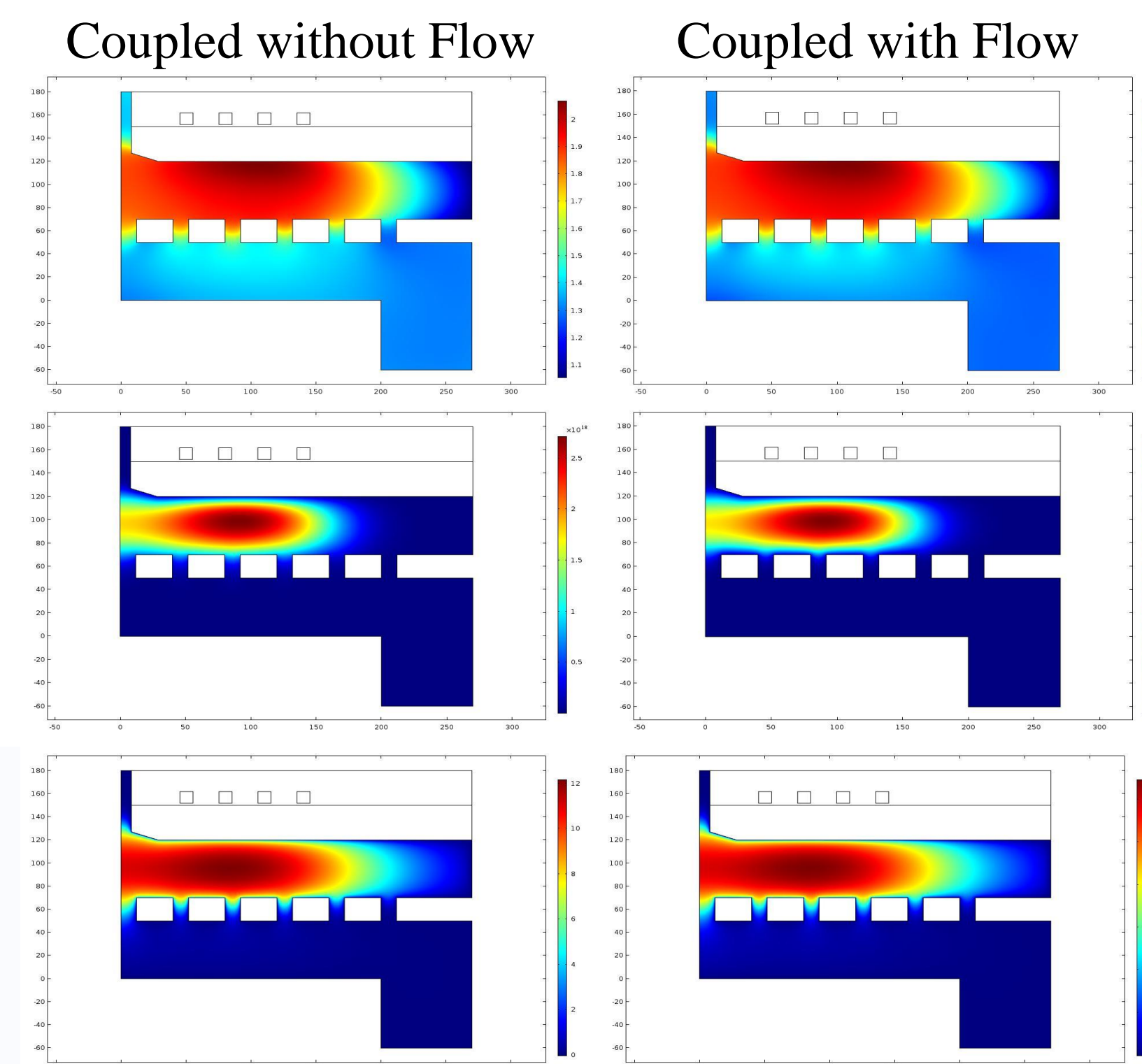


图 9 两组物理模型等离子体参数分布云图

图 7 结果显示无筛网时 n_wAr/n_e 的比值约为 2-2.5 左右, 存在筛网后比值增大到 4-6 之间。结果表明离子筛网对提高激发态粒子密度具有积极意义。

结论: 本研究通过仿真验证离子筛网在 PECVD 设备中的作用。仿真结果显示离子筛网能够有效地抑制基片表面的离子数密度并保持较高的激发态原子数目, 提高激发态粒子与离子数密度比值。同时研究了耦合流场对气体放电参数分布的影响, 仿真结果显示流场对筛网上方放电参数分布影响较小但会加速激发态粒子运动速率, 提高到达基片表面的激发态粒子数密度。

参考文献:

1. K. S. A. Butcher, et.al. Jpn. J. Appl. Phys. 51, 01AF02(2012)
2. Chao Wu, et.al. Jpn. J. Appl. Phys. 54, 036101(2015)
3. N. Sadeghi, et.al. J. Phys. D 34, 1779 (2001)
4. T. Matsui, et. Al. Prog. Photovoltaics 21, 1363 (2013)
5. K. Saito and M. Kondo, Phys. Status Solidi A 207, 535 (2010)
6. T. Wu, et. Al. Jpn. J. Appl. Phys. 42, L257 (2003).

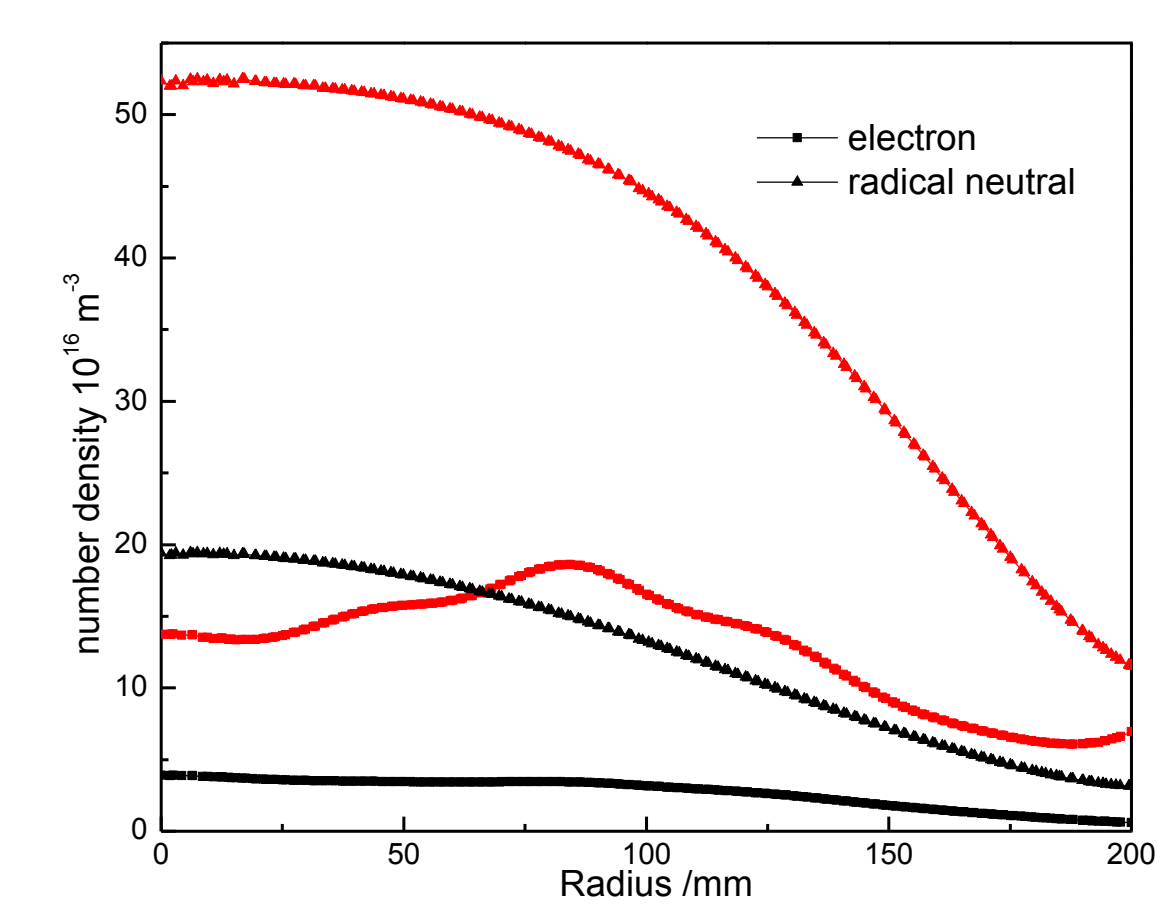


图 7 基片上 10mm 激发态粒子与电子分布曲线

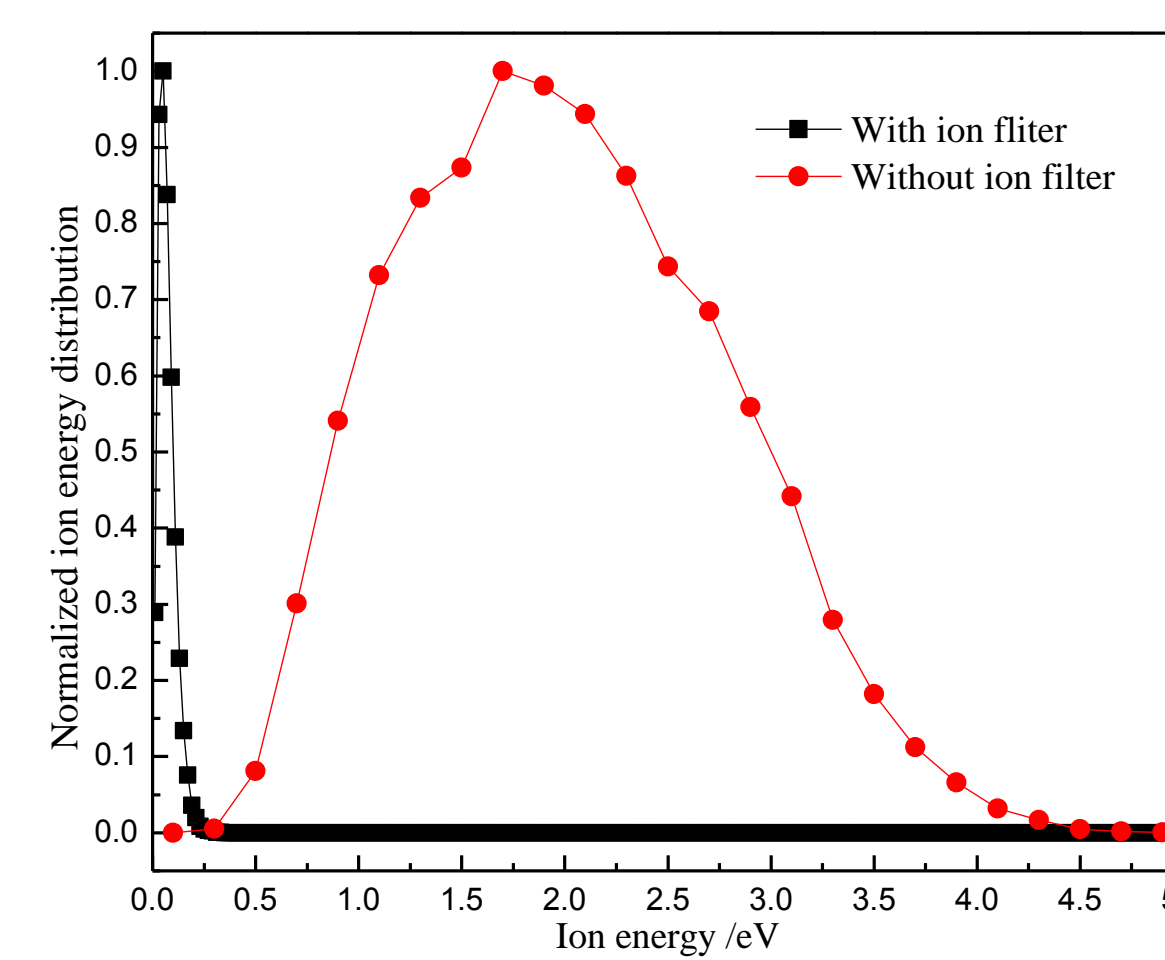


图 8 离子筛网对轰击基片表面离子能量分布曲线

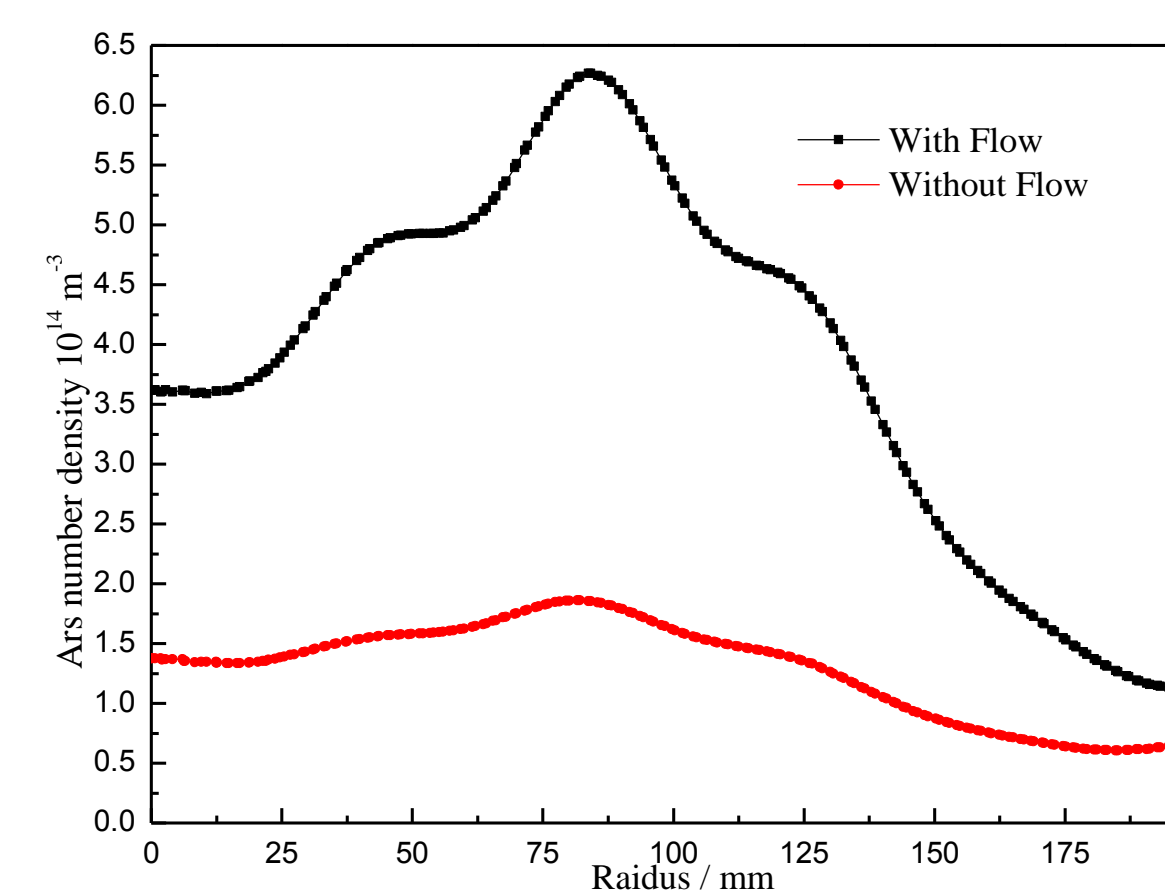


图 10 两种模型下基片上 10mm 激发态原子分布曲线

图 9 结果可得在耦合流体模块后, 到达基片表面的激发态原子数目可以提高 4 倍左右, 也表明耦合流场耦合的必要性。