



# COMSOL 在 PECVD 工艺仿真中的应用

## ——等离子体放电仿真

报告人：韩传铤

指导老师：程嘉 路益嘉

清华大学机械工程系

COMSOL  
CONFERENCE

2015 北京

2015/11/5

Excerpt from the Proceedings of the 2015 COMSOL Conference in Beijing



天行健，  
君子以自强不息



地势坤，  
君子以厚德载物

# 目 录

- 研究背景
- 研究内容
- 仿真模型
- 仿真结果及分析
- 小结

# 研究背景—PECVD工艺简介

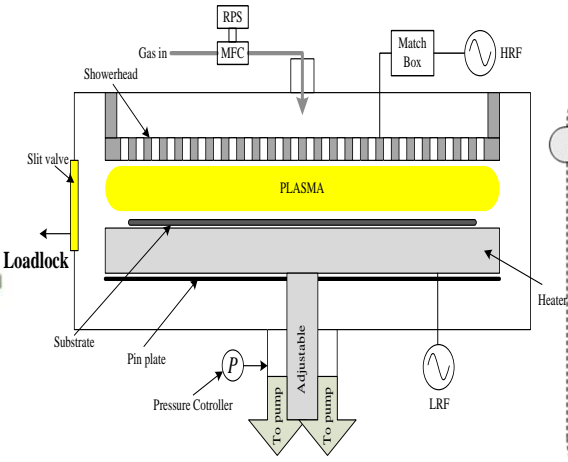
等离子体增强型化学气相沉积 (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition, PECVD) 广泛应用于光学薄膜和涂层的制备工艺中。



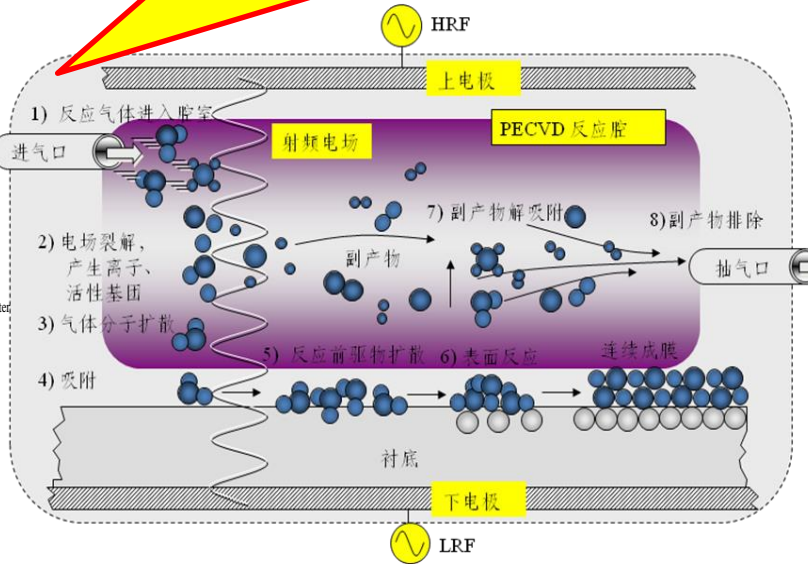
典型多场耦合工艺系统：电磁场、热场、流场、化学反应、等离子体



PECVD设备



PECVD放电腔室



PECVD工艺机理示意图

# PECVD工艺控制现状

实际工艺中，气相反应和表面反应中占据主导地位的是激发态原子和基团，带电离子轰击能量对成膜质量会造成损伤。目前主要抑制离子轰击能量的控制手段有：

- 远程等离子体源(Remote Plasma)—激发态原子过度衰减，导致参与反应的数密度降低；
- 电子回旋共振放电(electron cyclotron resonance discharge)—设备结构复杂，大尺寸镀膜成本过高；
- 基台三极管电极结构(triode electrode configuration)—在带电粒子密度很低的CCP放电中使用，未在ICP设备中出现。

本研究中提出一种在放电腔室内部增加离子筛网，此结构能够在等离子体放电时通过吸收带电粒子过滤到达基片表面的带电粒子密度，但与激发态原子不发生反应，基片表面的激发态数密度影响较小，提高激发态粒子与离子比例。

# 研究内容—PECVD工艺放电过程

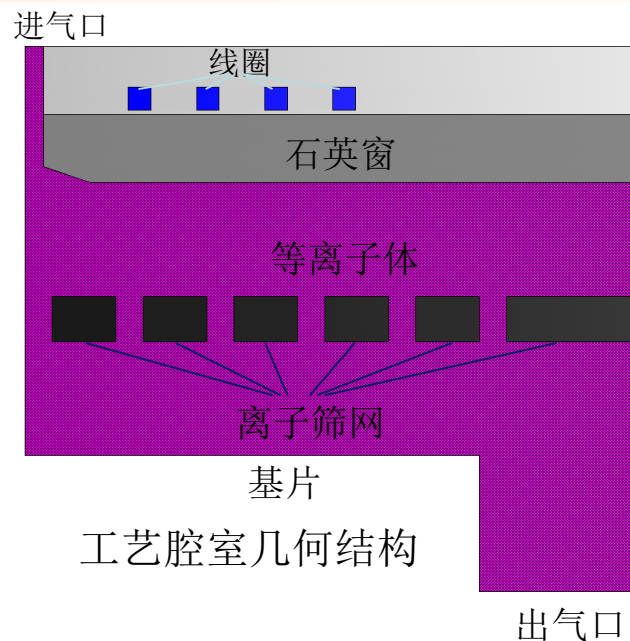
本次采用氩气放电，针对 PECVD 工艺前端等离子体产生过程进行仿真研究，研究腔室内等离子体放电参数分布剖面。

研究内容：

- 有无离子筛网对等离子体参数分布影响；
- 有无流场耦合对等离子体参数分布影响；
- 压强对基片表面参数分布的影响；
- 离子筛网对基片离子能量分布影响。

开展工艺腔室仿真研究的作用：

- 1) 优化腔室结构参数（极板间距、筛网结构等）；
- 2) 优化工艺控制参数（压力、功率、流量等）。



工艺腔室几何结构

等离子体放电参数

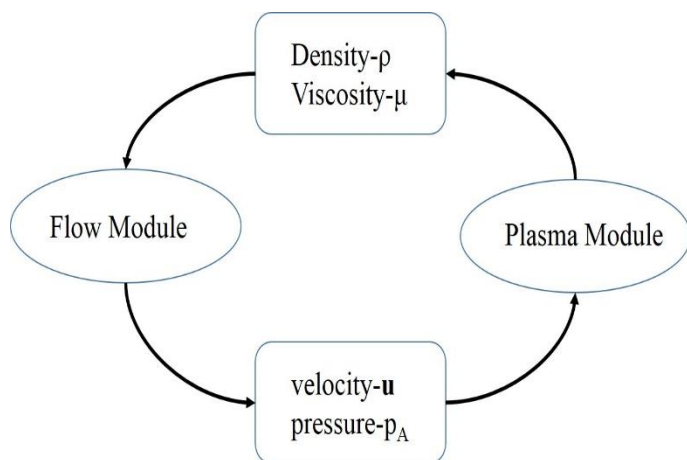
标示	数值	意义
Psp	200W	输入功率
p0	10Pa	放电气压
freq	13.56MHz	放电频率
Q_in	20SCCM	进气流量
T0	300K	气体温度

# 基本假设及研究路线

## 基本假设：

- 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、离子的扩散速度远小于热速度
- 3、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 20SCCM，出气口压力恒定为 10Pa。

## 耦合路线：



等离子体模块为流体模型提供背景气体密度和动力学黏度，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。



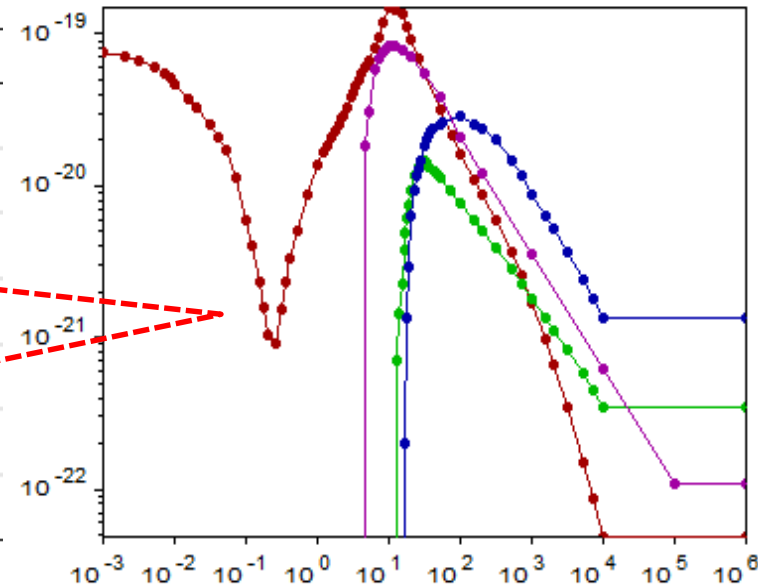
# 仿真模型建立—Ar放电参数

TABLE 1: TABLE OF COLLISIONS AND REACTIONS MODELED

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

TABLE 2: TABLE OF SURFACE REACTIONS

REACTION	FORMULA	STICKING COEFFICIENT
1	$\text{Ar}_s\Rightarrow \text{Ar}$	1
2	$\text{Ar}^+\Rightarrow \text{Ar}$	1



反应6的反应系数为**3.734E+8**  $\text{m}^3/(\text{s mol})$

反应7的反应系数为**1807**  $\text{m}^3/(\text{s mol})$

※secondary emission coefficient (二次电子发射系数) mean energy of secondary electron (平均二次电子能量) 均为 0。

# 仿真模型—COMSOL数学模型

## 等离子体场—漂移扩散模型

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

电子数密度计算公式

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

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

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

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

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

电子能量计算公式

静电场计算公式（泊松方程）

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} (w_k) + \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) w_k = \nabla \cdot \mathbf{j}_k + R_k$$

重粒子计算公式

(Maxwell-Stefan Equation)



# 仿真模型—COMSOL数学模型

## 电磁场—Maxwell Equation

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

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad \text{电磁场计算公式（频域Maxwell方程）}$$

## 流场—流体方程

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

$$\nabla \cdot (\rho\mathbf{u}) = 0 \quad \text{单相流流动方程}$$

## 离子能量分布—M/C 模型

$$P = 1 - \exp(-v\Delta t)$$

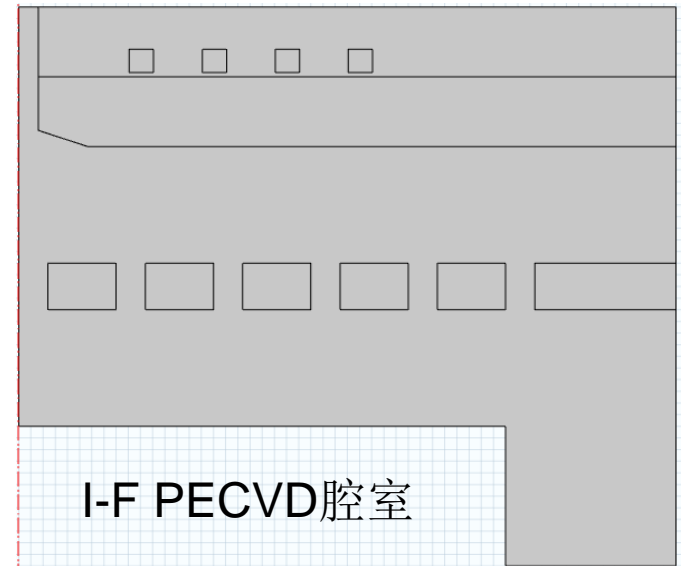
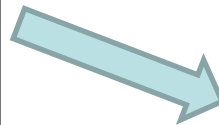
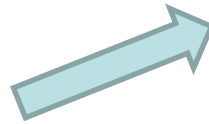
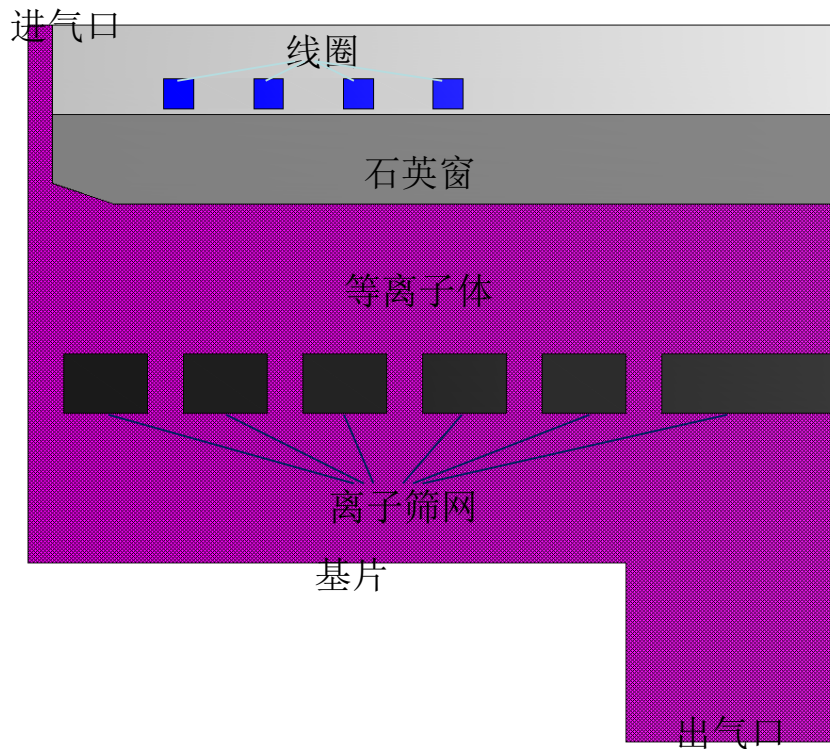
$$f(v_i) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left[-\frac{mv_i^2}{2kT}\right]$$

离子能量分布（M/C模型）

# 仿真模型—腔体几何简化模型

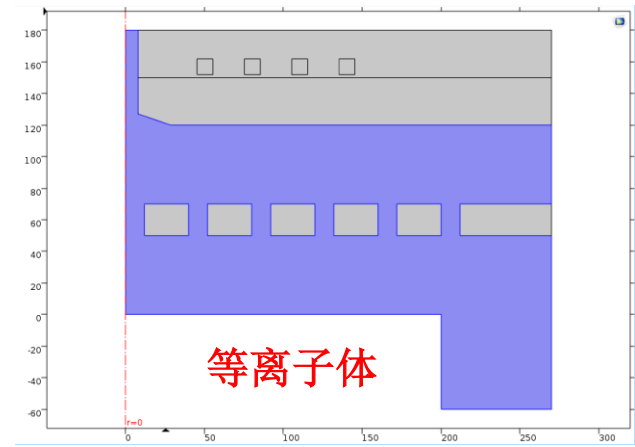
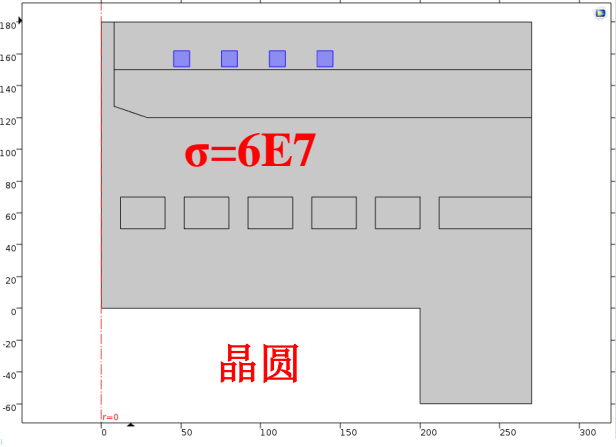
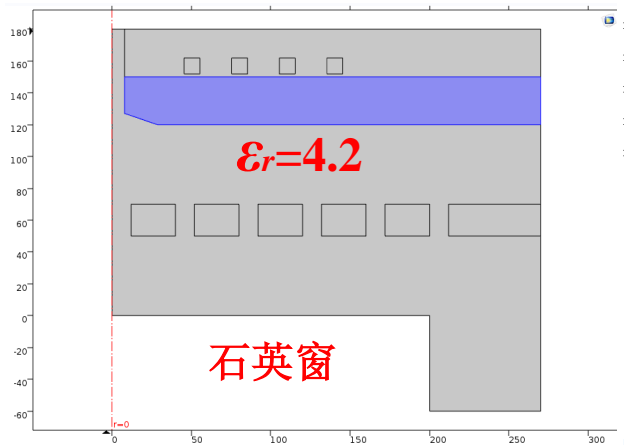
## 模型简介：

本次选用的PECVD腔室是ICP腔室，射频频率为13.56MHz的射频源提供功率激发和维持等离子体。

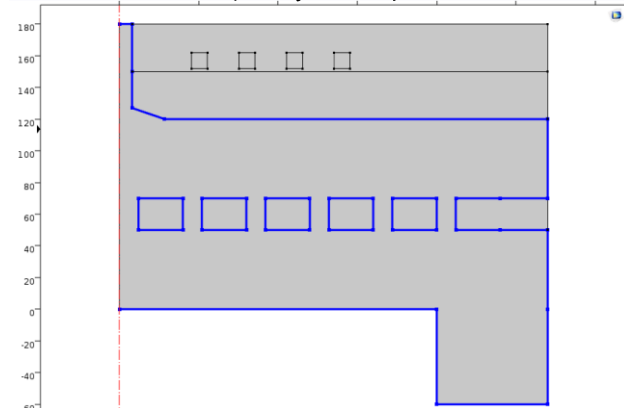


离子筛网作为边界条件不考虑进计算域

# 仿真模型—材料参数及边界条件



## Wall (re, rf)

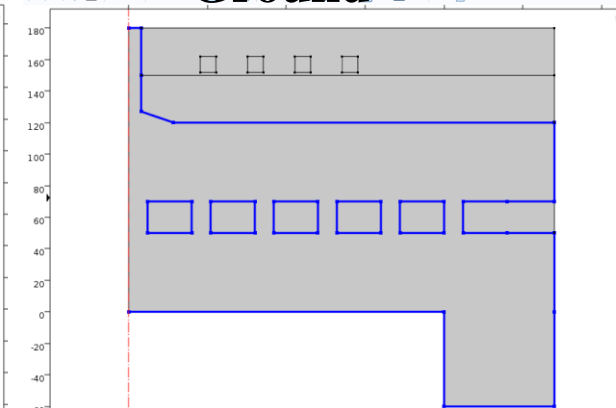


$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1-r_e}{1+r_e} \left( \frac{1}{2} \nu_{e,th} n_e \right) - \left( \sum \gamma_i \Gamma_i \cdot \mathbf{n} + \Gamma_t \cdot \mathbf{n} \right)$$


---

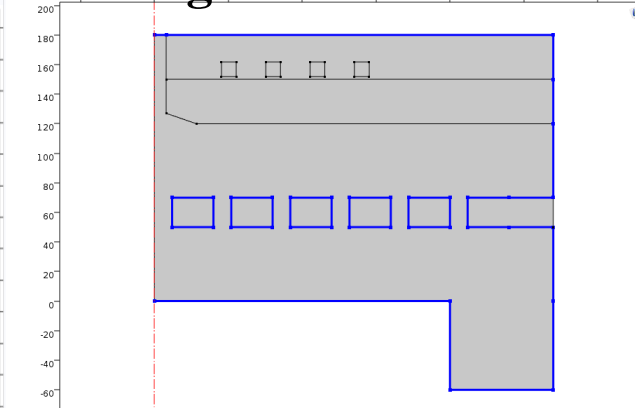

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{\Gamma}_e = \frac{1-r_e}{1+r_e} \left( \frac{5}{6} \nu_{e,th} n_e \right) - \left( \sum \gamma_i \epsilon_i \Gamma_i \cdot \mathbf{n} + \epsilon \Gamma_t \cdot \mathbf{n} \right)$$

## Ground



$$V=0$$

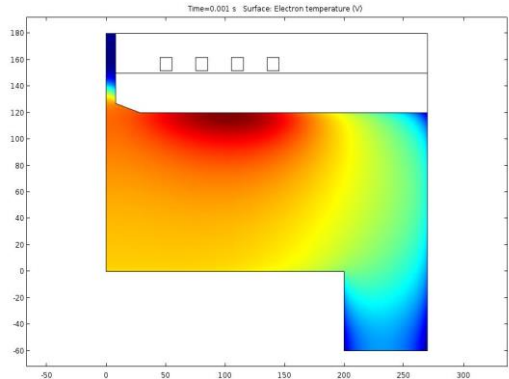
## Magnetic Insulation



$$\mathbf{n} \times \mathbf{A} = 0$$

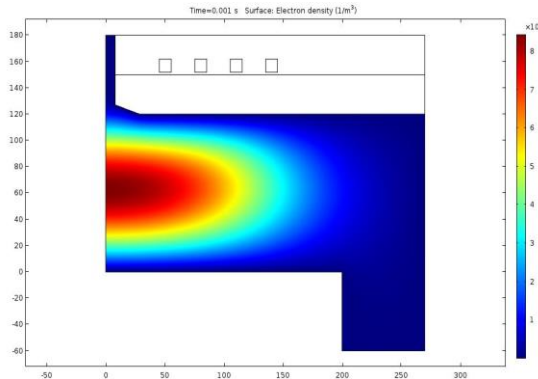
# 仿真结果—离子筛网对放电参数的影响

## Electron emperature

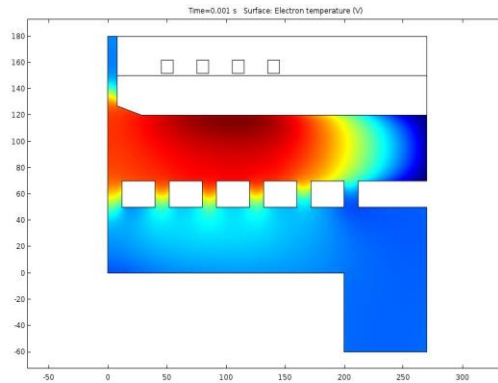
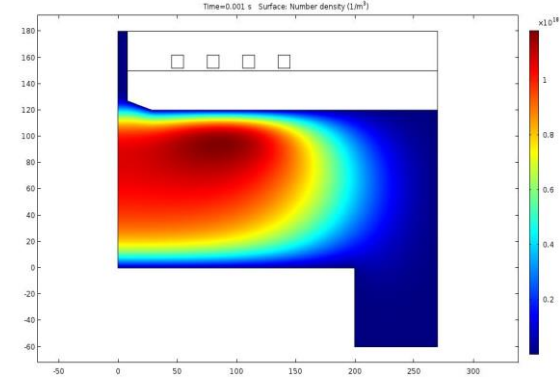


Type

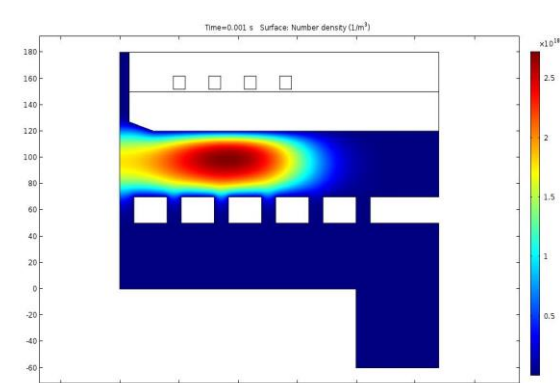
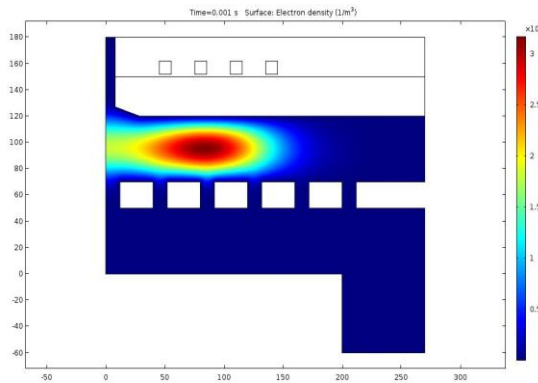
## Electron density



## Ars number density



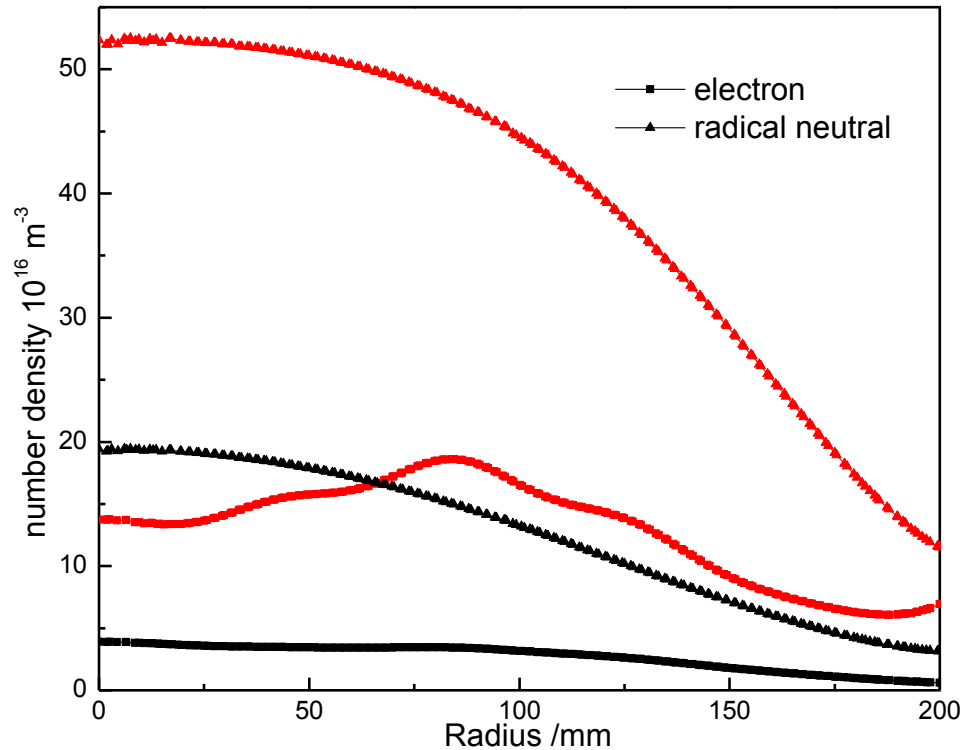
I-F



通过更改几何结构的模型仿真结果对比可知，离子筛网会对放电参数分布产生影响。离子筛网会抑制带电粒子通过，降低基片表面的离子密度。

需要对基片表面的数密度分布做对比分析

# 仿真结果—离子筛网对放电参数的影响



基片上方 10mm 激发态粒子与电子径向分布曲线，红色为无筛网结果，黑色为有筛网的结果。

图中曲线结果显示筛网的存在对带电粒子和激发态原子均有影响，但对带电粒子的影响更大。

通过对比 $n_{wArs}/n_e$ 比值的比值可知增加筛网可以从2倍增大到6倍。从而可知离子筛网对提高基片表面激发态粒子密度具有积极意义。

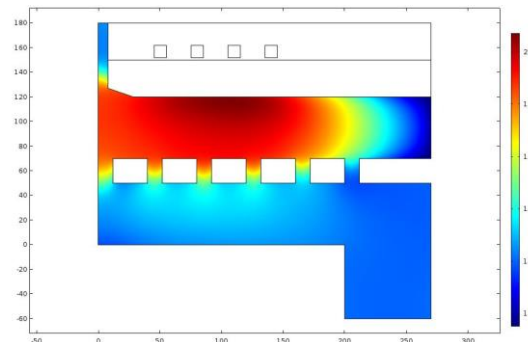
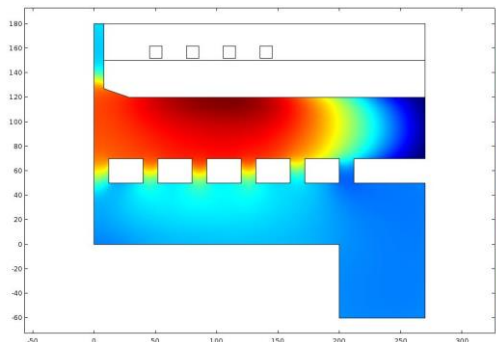
从曲线分布结果中可以看出对筛网的结构进行优化是有必要的！

# 仿真结果—耦合流体模型的影响

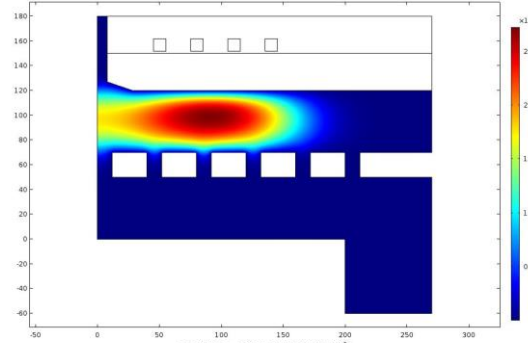
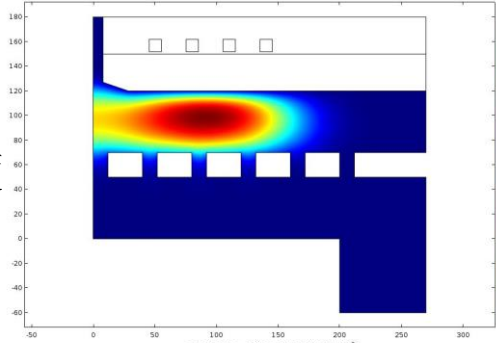
Coupled Without Flow

Coupled with Flow

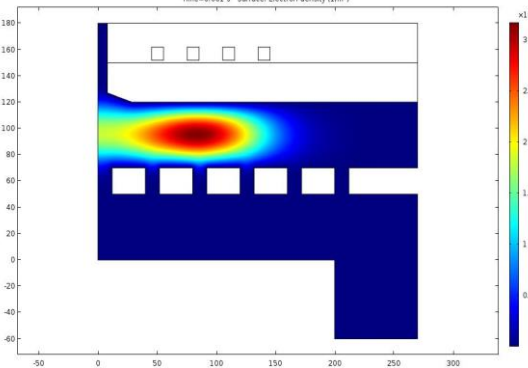
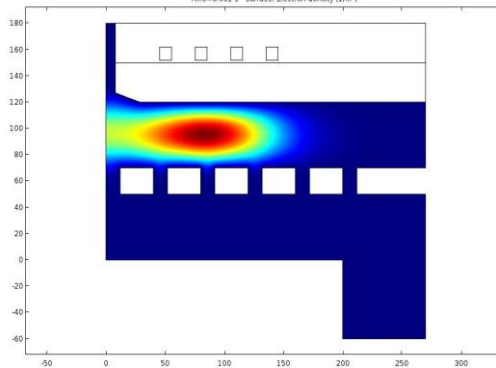
电子温度



激发态数密度



电子数密度



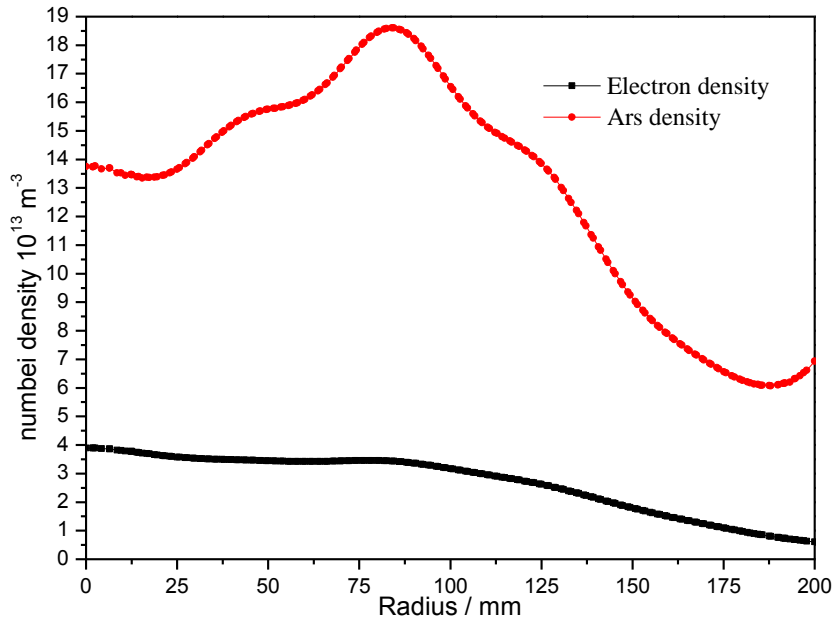
空间分布显示流  
场耦合的影响不  
大。



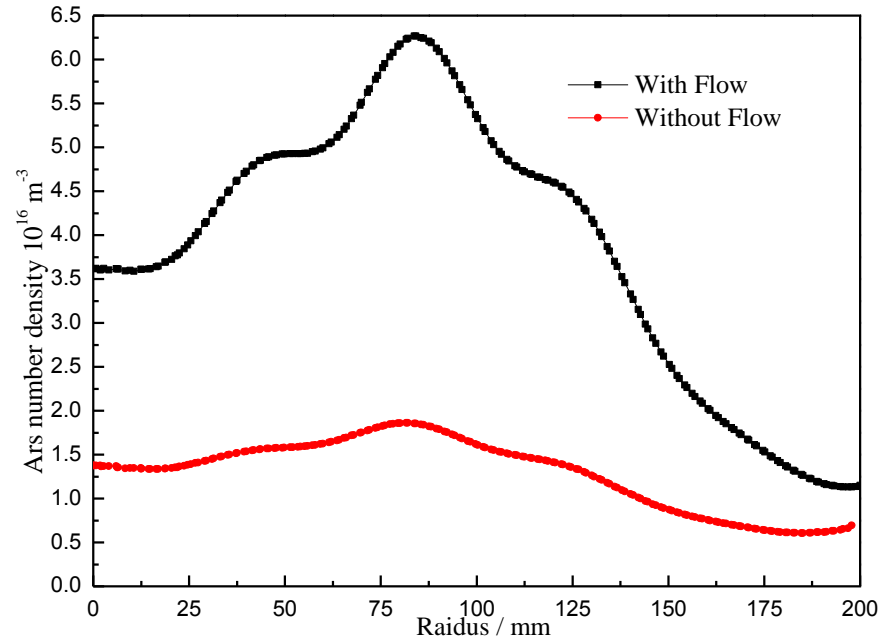
需要对基片表面  
的数密度分布做对比  
分析。



# 仿真结果—耦合流体模型的影响



基片上方 10mm 激发态粒子与电子晶圆径向分布曲线



基片表面激发态原子数密度径向分布曲线

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虽然有所降低，但通过优化筛网结构结果显示耦合流场对增加密度有积极作用，也表明耦合流场耦合的必要性。

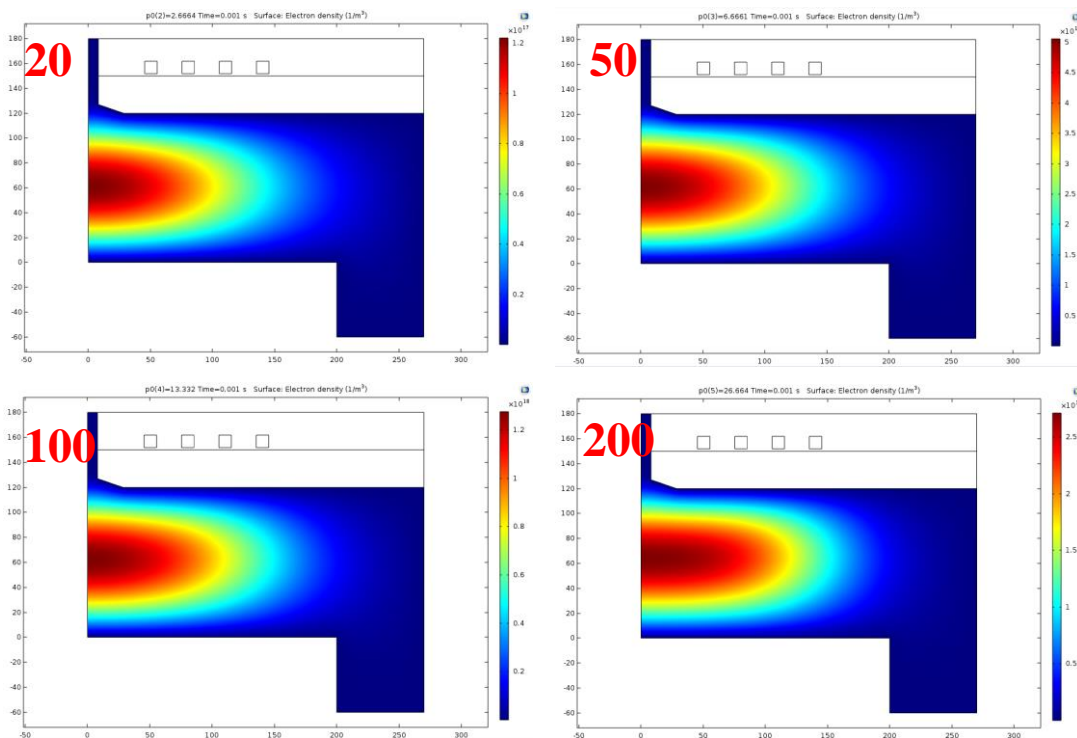


# 仿真结果—气压与离子筛网的影响

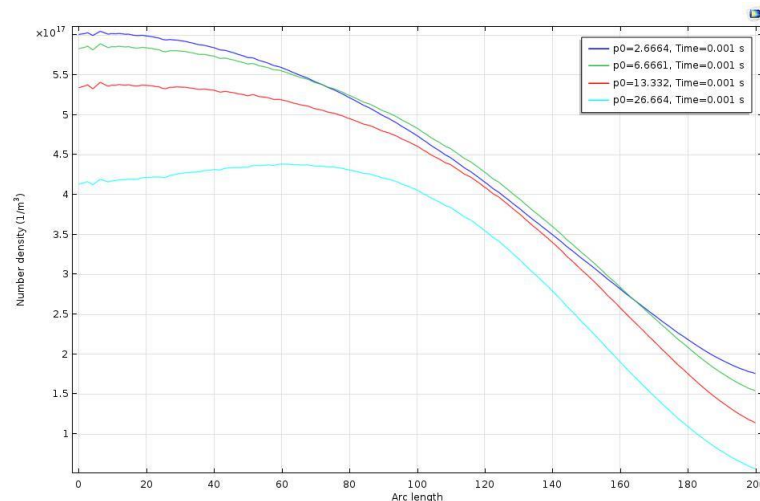
在下表条件下，调整 **气压**，分析对放电结果的影响

压力/mtorr	功率/W	温度/K	$\mu N [1/(V \cdot m \cdot s)]$	分布	$r_e$	$r_f$
<b>20/50/100/200</b>	<b>200</b>	<b>300</b>	<b>5E24</b>	<b>M</b>	<b>4/11</b>	<b>0</b>

无筛网



不同气压下放电参数剖面分布图

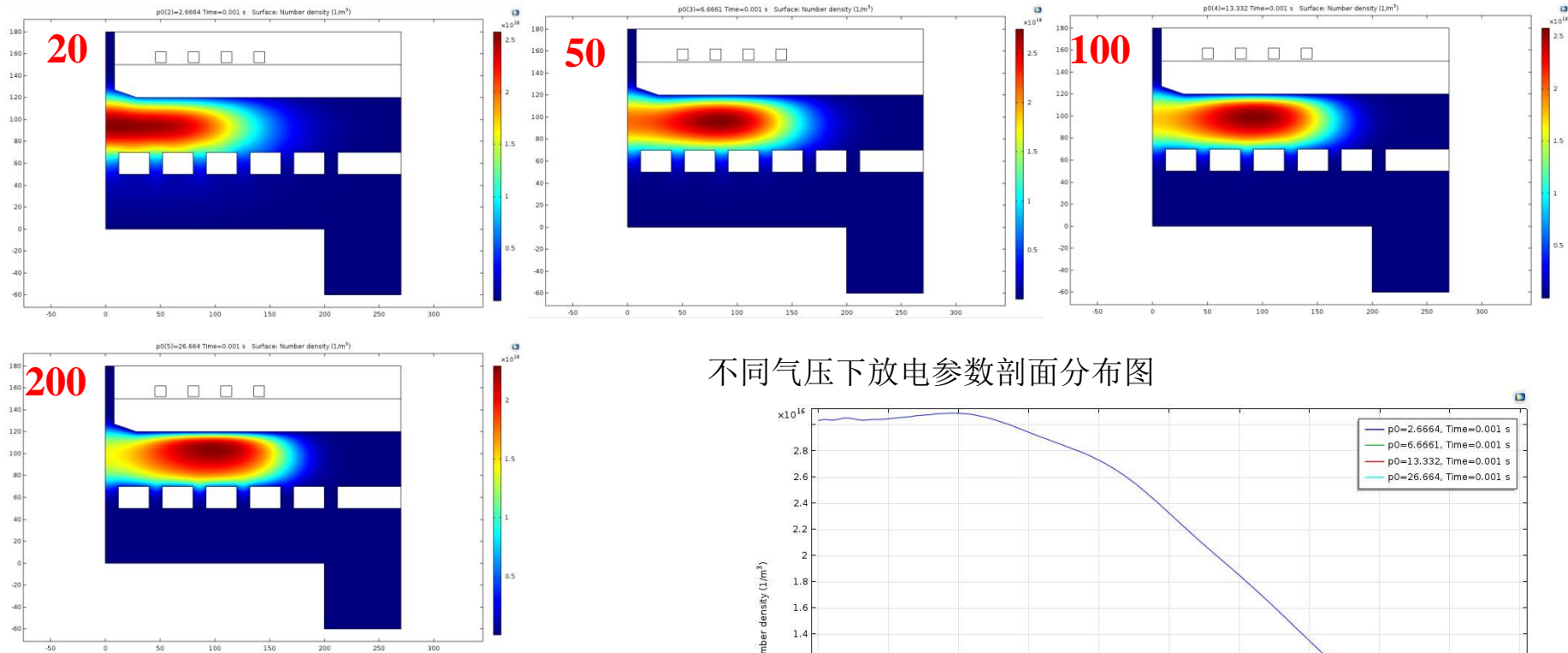


基片表面激发态原子数密度径向分布曲线

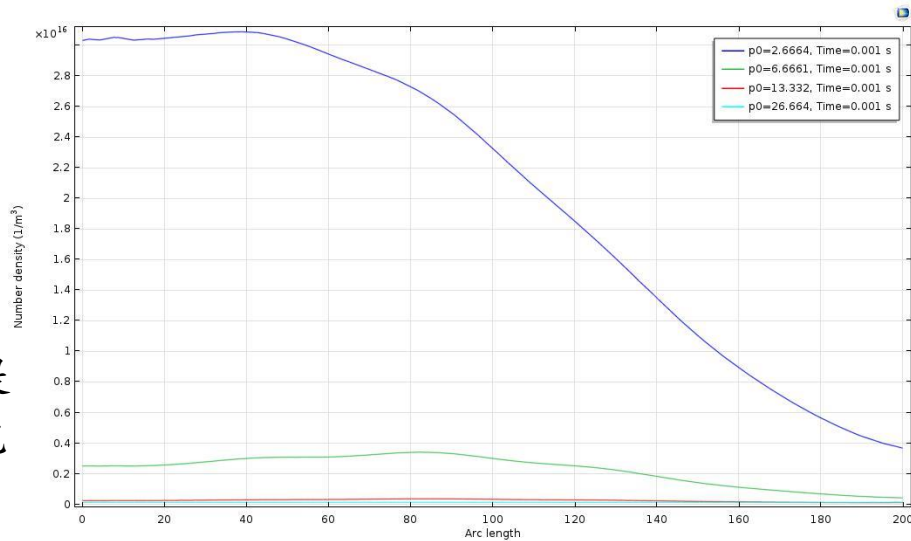
数据显示无筛网结构中增加气压会提高腔室内离子数密度，增加基片表面电子数密度，但会降低基片表面的激发态原子密度。

# 仿真结果—气压与离子筛网的影响

## 带筛网



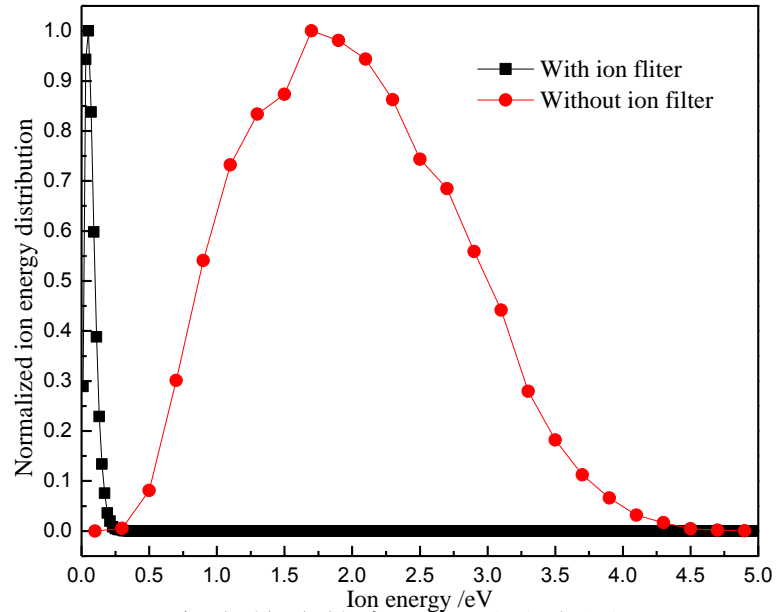
不同气压下放电参数剖面分布图



基片表面激发态原子数密度径向分布曲线

数据显示存在筛网结构中增加气压会提高腔室内离子数密度。但会降低基片表面电子数密度，基片表面的激发态原子密度，20mT的气压能够获得最高的激发态密度。

# 仿真结果—离子筛网对离子能量分布的影响



离子轰击基片的能量演化图

轰击基片的离子能量分布图

通过统计轰击基片的离子能量分布可知离子筛网能够有效的降低到达基片表面的离子能量，这能有效地抑制离子对成膜质量的损伤。

# 小结

- 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度，提高激发态粒子与离子数密度比值，同时得到优化筛网结构的必要性；
- 流场耦合对等离子体放电参数空间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与离子密度比值；
- 气压能够提高腔室内离子密度，增加筛网使激发态数密度与气压负相关关系不再适用，有助于获得最优的工艺条件；
- 离子筛网能够有效的降低到达基片表面的离子能量，这能有效地抑制离子对成膜质量的损伤。

---

**谢谢！**  
**请各位提问与指正！**