文章编号: 1001-4322(2006)01-0155-05

感应耦合等离子体的1维流体力学模拟

王 帅, 毛 明, 王友年

(大连理工大学 物理系 三束材料改性国家重点实验室, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 采用双极扩散近似的流体力学模型,通过数值模拟方法研究了射频感应耦合等离子体(ICP)中等离子体密度和电子温度等物理量的空间分布,其中射频源的功率沉积由动力学理论给出。分析了不同的射频线圈的驱动电流和放电气压对等离子体密度和电子温度空间分布的影响。在低气压下,等离子体密度基本上保持空间均匀分布。随着放电压强的增加,等离子体密度的分布呈现出明显的空间不均匀性。当线圈电流增大时,等离子体密度和电子温度都随着增大。

关键词: 感应耦合等离子体; 流体力学; 等离子体密度; 电子温度

中图分类号: O531 文献标识码: A

射频感应耦合等离子体(ICP)源由于具有等离子体密度高、工作气压低以及由外界参量控制和装置结构 简单等优点,已在等离子体辅助加工领域[13]中得到广泛应用。特别是对于半导体芯片刻蚀工艺,利用这种等 离子体可以得到很高的刻蚀速率和很好的定向刻蚀。在等离子体辅助加工过程中,工艺的质量在很大程度上 取决于等离子体与工件的相互作用过程,而这些过程又和放电装置中的一些物理量,如等离子体密度、电子温 度、射频电源的能量沉积等密切相关。 因此自从开展 ICP 研究以来,其放电的各种参量的变化规律一直是人 们关注的重点。通过建立适当的理论模型来模拟 ICP 的放电过程和物理参量的特性,是一种行之有效的手 段,对改进和优化 ICP 源的设计与工艺过程有着重要的指导作用。20 世纪 80 年代以来,许多作者采用不同的 方法,如动力学方法和流体力学方法,对 ICP 的物理过程进行了广泛研究[46]。特别是在流体力学方法中,把 等离子体看成是一种多成分(电子、离子和中性粒子)的流体,通过求解各自相应的流体力学方程组,可以得到 等离子体中一些宏观物理量(如密度、温度等)的空间分布。根据研究装置的空间特性不同,通常采用 1 维、2 维[5] 和 3 维[10] 流体力学模型。在已有的这些流体力学模拟中[7-13],在计算射频电源的功率沉积时,几乎都是采 用局域欧姆加热近似。而在 ICP 放电中,由于工作气压很低(通常在 $0.133\sim$ 6.67 Pa 范围内),等离子体中的 电子不再仅仅通过碰撞形式从射频电源中获得能量,而主要通过波与粒子相互作用形式获得能量。这时呈现 出一种非局域的效应[14],即等离子体中电流的空间分布不是仅与其所在位置的电场有关,而是与其运动轨迹 上的电场分布相关。由于射频电源的功率沉积分布直接影响着 ICP 中等离子体密度和电子温度的空间分布, 所以采用流体力学方法研究 ICP 的物理特性时非常有必要考虑这种非局域加热效应。

本文针对Ar等离子体,在准电中性和双极扩散近似下,对等离子体密度和电子温度采用1维的单流体模型,其中射频电源在等离子体中的功率沉积密度,由动力学理论[15]
(即通过求解线性 Boltzmann 方程和 Maxwell 方程组)来确定。研究了不同的射频电源的驱动电流和放电气压对 ICP 中等离子体密

度和电子温度空间分布的影响。

1 基本方程

设 ICP 放电装置是一个半径为 a 的圆柱型容器,射频线圈缠绕在圆柱的侧面上。射频源的频率为 $13.56~\mathrm{MHz}$ 。假设圆柱的长度远大于其直径,因此所有的物理量仅依赖于径向变量,在轴向上是均匀的。为了简化模拟,可以把等离子体看作是一个宽度为 2a 的无限长平板,一组方向相反的电流片位于 $x=\pm a$ 处,如图 $1~\mathrm{fm}$ 示。

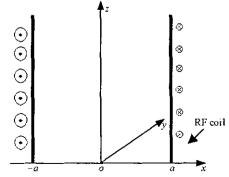


Fig. 1 Schematic diagram of simulation area 图 1 模拟的等离子体区示意图

^{*} 收稿日期:2005-03-08; 修订日期:2005-09-26 基金项目:国家自然科学基金资助课题(110376003)

作者简介:王 帅(1980—),男,硕士,主要从事 ICP 计算模拟方面的研究;shwang@student.dlut.edu.cn。

在一般的 ICP 放电中,由于等离子体密度很高,使得器壁附近的鞘层区非常薄,其厚度远小于放电室的空间尺度。这样在整个放电区,电子密度 n_e 和离子密度 n_i 几乎相等。因此,在模拟中我们采用如下准电中性的近似条件

$$n_{\rm e} = n_{\rm i} = n \tag{1}$$

根据双极扩散近似,等离子体的密度可由扩散方程确定

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma}{\partial x} = R_{\rm i} \tag{2}$$

而

$$\Gamma = -D_{\rm i} \frac{\partial n}{\partial x} + \mu_{\rm i} n E_{\rm s} \tag{3}$$

式中 : Γ 为扩散流密度 ; $E_s = -\frac{1}{en}\frac{\partial (nT_e)}{\partial x}$ 为双极扩散电场 , T_e 是电子的温度 , D_i 和 μ_i 分别为离子的扩散系数和迁移率 $R_i = k_i nN$ 为电离源 , k_i 为电离系数 $R_i = k_i nN$ $R_i = k_i nN$ 为电离系数 $R_i = k_i nN$ $R_i = k_i nN$ $R_i = k_i nN$ $R_i = k_i nN$ $R_i = k_i nN$

电子温度 T。由能量平衡方程确定

$$\frac{\partial}{\partial t}(3nT_{\rm e}/2) + \frac{\partial q_{\rm e}}{\partial x} + \frac{3m_{\rm e}}{M}\nu_{\rm me}(T_{\rm e} - T_{\rm g})n + W - P = 0 \tag{4}$$

而

$$q_{\rm e} = -K_{\rm e} \frac{\partial T_{\rm e}}{\partial x} + \frac{5}{2} T_{\rm e} \Gamma \tag{5}$$

式中: q_e 为能流密度, $K_e=3nD_e/2$ 为电子的热传导系数, D_e 为电子扩散系数[17]。方程(4)左边第三项代表电子与中性粒子弹性碰撞而造成的能量损失,中性气体温度 T_e 取 300 K, ν_{me} 为电子与中性气体的碰撞频率,第四项 $W=\varepsilon_e k_e nN$ 为电子与中性粒子非弹性碰撞而造成的能量损失, $\varepsilon_e=3T_e/2$, k_e 为电子与中性气体原子碰撞时的能量损失系数[7];最后一项 P 为射频电源在等离子体中沉积的功率密度。

在低气压下,为了考虑反常趋肤效应对功率沉积的影响,我们采用了动力学方法求解沉积功率密度 P,即通过求解线性 Boltzmann 方程与 Maxwell 方程组 $^{[15]}$,其表示式为

$$P(x) = \frac{1}{2} \operatorname{Re} \left[E^*(x) j(x) \right] \tag{6}$$

式中: $E(x) = \sum_n E_n \sin(k_n x)$ 为等离子体中的射频电场; $j(x) = \sum_n E_n W_n e^{ik_n x}$ 为电流密度, $k_n = n\pi/2a$ 为波数,系数 E_n 及 W_n 的表示式分别为

$$E_n = \frac{2iB_0}{n\pi} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \left(\frac{k_n}{\omega} + \frac{\mu_0 W_n}{k_n}\right)^{-1} \tag{7}$$

$$W_{n} = \frac{n_{0} e^{2}}{2\omega m_{e}} \int_{0}^{\infty} d\varepsilon \frac{3}{2} G\left(\frac{\Omega_{n}}{\omega}, \frac{\nu}{\omega}\right) \frac{\partial f_{0}}{\partial \varepsilon}$$
(8)

 $B_0 = \mu_0 sI$ 是螺管线圈在真空中产生的磁场,I 是线圈的电流,s 是单位长度上线圈的匝数。在(8)式中, $\Omega_n = k_n v$,v 是电子的速度, $f_0(\varepsilon)$ 为电子的能量分布函数(麦克斯韦分布), $\varepsilon = m_\varepsilon v^2/2$ 是电子的能量,函数 G 仅是无量纲参变量 Ω_n/ω 及 $\nu(\varepsilon)/\omega$ 的函数, $\nu(\varepsilon)$ 为碰撞频率。特别是在无碰撞情况下($\nu/\omega \to 0$),函数G的形式为[15]

$$G(\chi,0) = \frac{\mathrm{i}}{\chi^3} \left[-2\chi + (\chi^2 - 1) \ln \left(\frac{1 - \chi}{1 + \chi} \right) \right], \chi = \frac{\Omega_n}{\omega}.$$

对于边界条件,考虑中心处(x=0)的对称性,等离子体密度和电子温度的梯度在该处都为零,即 $\frac{\partial n}{\partial x}=0$, $\frac{\partial T_e}{\partial x}=0$ 。在装置的边界处(x=a),取离子的速度为离子声速 $c_s=\sqrt{T_s/M_i}$,离子流和电子的能流分别为 $\Gamma=$

 ∂x nc_s q_e = $5nT_ec_s/2$,其中 M_i 为氩离子的质量。另外,设在初始时刻,等离子体密度和温度是均匀分布的,其值分别为 n_0 和 T_0 。

在上述边界和初始条件下,我们采用有限差分方法求解方程(2)和(4)。在一次循环中首先求出等离子体密度 n 和电子温度 T_e ,然后将所得的 n 和 T_e 代入方程(6)中求出沉积功率密度 P 的空间分布,再代入到流体力学方程组(2)和(4)中求出新的 n 和 T_e 。如此反复迭代,直到得到稳定的数值解。

2 数值计算结果分析

在以下计算中,假设放电室的半径为 $10~{\rm cm}$,初始等离子体密度和电子温度分别为 $n_0=10^{11}~{\rm cm}^{-3}$ 和 $T_{\rm e0}=1.7~{\rm eV}$ 。图 $2~{\rm Lm}$ 。图 $2~{\rm Lm}$ 不同的线圈电流 I 对等离子体密度分布的影响,其中放电气压为 $0.67~{\rm Pa}$,可以看出随着线圈电流的增加,等离子体密度明显增加。这是由于随着线圈电流的增加,由射频源产生的功率密度沉积随之加大,等离子体获得更高的功率,使得电子的温度增加(见图 6),进而导致气体电离率的增加,这样单位时间内电离更多的电子和离子,等离子体密度也随之增加。另一方面,在放电室的大部分区域内,等离子体密度基本均匀分布。这是由于放电气压较低,在较大的空间范围内,双极电场并不起主要作用,双极扩散效应不是太明显。仅在靠近容器附近,在双极电场的作用下,等离子体快速地向器壁扩散,从而导致等离子体密度的迅速下降。

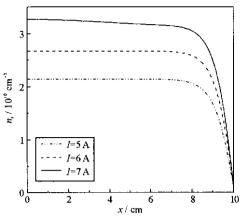


Fig. 2 Electron density profiles for different coil currents and 0. 67 Pa pressure

图 2 不同线圈电流下的电子密度分布,放电气压 $p=0.67~\mathrm{Pa}$

图 3 显示了在给定线圈电流的情况下(I=5 A)放电气压对等离子体密度分布的影响。可以看出,随着放电气压的升高,双极扩散效应将起主导作用,使得等离子体密度始终随着径向距离的增加而下降,呈现出明显的空间分布不均匀性。图 4 进一步显示了双极扩散电场 E_s 的空间分布,其中归一化系数 $E_{so}=1$. $0/\lambda_D$ (V/cm), λ_D 是等离子体的 Debye 长度。可以看出双极扩散电场仅在器壁附近明显存在。

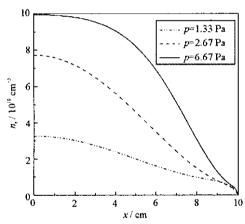


Fig. 3 Electron density profiles for different pressures and 5 A coil current

图 3 不同气压下的等离子体密度分布,线圈电流 I=5 A

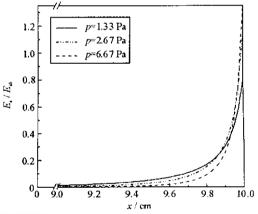
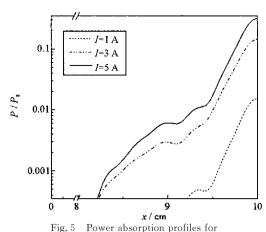


Fig. 4 Profiles of ambipolar electric field for different pressures and 5 A coil current

图 4 不同气压下的双极扩散电场分布,线圈电流 I=5 A

图 5 显示了射频电源在等离子体中功率沉积的空间分布。其归一化系数 $P_0 = \epsilon_0 \omega_{\rm peo} E_{\rm so}^2$ (W/cm $^{-3}$), ϵ_0 为电常数, $\omega_{\rm peo}$ 为电子等离子体频率。可以看出外界电源提供的功率主要沉积在靠近器壁附近的等离子体区中,而在中心处则较小。随着驱动电流的增加,功率沉积的范围向等离子体中心处逐渐扩大,沉积的功率也明显增加。值得说明的是:尽管功率沉积的区域不是太大,但这种功率沉积过程是由射频电场的反常趋肤效应引起的,在气压较低的放电条件下,这种加热机制对功率沉积的分布起主导作用。我们在求解功率的模型中包含了反常趋肤效应,与局域加热近似模型相比,在低气压条件下,能更准确地反映出功率密度沉积的空间分布,从而使得在此基础上计算得出的电子温度和等离子体密度更加准确。图 6 显示了电子温度的空间分布。与功率沉积相对应,电子温度在器壁附近的值较高,这是由于电子主要在边界区域被射频电场加热。同时由于热传导和热扩散的作用,随着径向变量的减小,电子温度逐渐降低。在中心处区域,电子温度的空间变化比较平缓。

图 7 显示了放电气压对电子温度空间分布的影响。在较高的放电压强下,电子同中性气体的碰撞比较频繁,其能量快速地传给中性气体原子。所以随着放电气压的升高,电子温度则明显下降。



different coil currents and 1.33 Pa pressure

图 5 不同压强下的功率沉积密度分布,放电气压 $p=1.33~\mathrm{Pa}$

3 结 论

本文采用1维的流体力学模型,通过数值方法研究了射频感应耦合等离子体放电装置中的等离子体密度、电子温度、功率和双极扩散电场等物理量的空间分布规律。发现在低气压下,ICP放电可以产生空间均匀分布的等离子体,不均匀性仅在器壁附近发生。随着气压的升高,等离子体密度分布呈现出明显的空间不均匀性。同时随着射频线圈电流的增加,等离子体密度也明显提高。另外,也发现:射频电源的功率沉积主要发生在器壁附近,导致电子温度的值在器壁附近较高;随着放电气压的升高,电子温度则明显下降。

本文只考虑了等离子体中物理量在径向上的变化 规律。实际上,在一般的柱状 ICP 放电装置中,感应

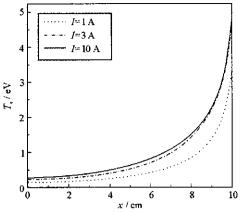


Fig. 6 Electron temperature profiles for different coil currents and 1. 33 Pa pressure

图 6 不同线圈电流下的等离子体温度分布,放电气压 $p=1.33~\mathrm{Pa}$

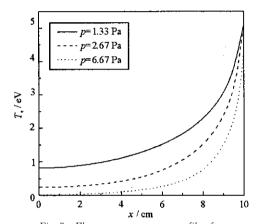


Fig. 7 Electron temperature profiles for different pressures and 5 A coil currents

图 7 不同压强下的电子温度分布,线圈电流 I=5 A

线圈的匝数是有限的,导致等离子体密度和电子温度在轴向上分布是不均匀的。进一步的工作,我们将采用 2 维流体力学模型,来模拟 ICP 放电装置中一些物理量的 2 维空间变化。

参考文献:

- [1] Keller J H, Forster J C, Barnes M S. Novel radio-frequency induction plasma processing techniques [J]. J Vac Sci Tech, 1993, A11: 2487-2491.
- [2] Keller J H. Inductive plasmas for plasma processing [J]. Plasma Sources Sci Techno, 1996, 5: 166-172.
- [3] Lieberman M A, Lichtenberg A J. Principles of plasma discharges and materials processing [M]. New York: Wiley, 1994.
- [4] Ventzek P L G, Sommerer T J, Hoekstra R J, et al. Two-dimensional hybrid model of inductively coupled plasma sources for etching [J]. Appl Phys Lett, 1993, 63: 605-607.
- [5] Stewart R A, Vitello P, Graves D B. Two-dimensional fluid model of high density inductively coupled plasma sources [J]. J Vac Sci Tech, 1994, B12: 478-485.
- [6] Kushner M J, Collison W Z, Kushner M J. A three-dimensional model for inductively coupled plasma etching reactors: azimuthal symmetry, coil properties, and comparison to experiments [J]. J Appl Phys, 1996, 80: 1337-1344.
- [7] Bukowski J D, Graves D B. Two-dimensional fluid model of an inductively coupled plasma with comparison to experimental spatial profiles [J]. J Appl Phys, 1996, 80(5): 2614-2623.
- [8] Lymberopoulos D P, Economou D J. Two-dimensional simulation of polysilicon etching with chlorine in a high density plasma reactor [J]. *IEEE Trans Plasma Sci*, 1995, **23**: 573-580.
- [9] Ostrikov K N, Denysenko I B, Tsakadze E L, et al. Diagnostics and two-dimensional simulation of low-frequency inductively coupled plasmas with neutral gas heating and electron heat fluxes[J]. J Appl Phys, 2002, 92(9): 4935-4946.
- [10] Theodoros P, Kim D, Midha V, et al. Three-dimensional simulation of an inductively coupled plasma reactor[J]. J Appl Phys, 2002, 91 (5): 2687-2696.

- [11] Nam S K, Economou D J. Two-dimensional simulation of a miniaturized inductively coupled plasma reactor[J]. J Appl Phys, 2004, 95 (5): 2272-2277.
- [12] Scheubert P, Awakowicz P, Schwefel R, et al. Fluid dynamic modeling and experimental diagnostics of an inductively high density plasma source [I]. Surf and Coat Tech. 2001. 142-144: 526-530.
- [13] Christlieb A J, Hitchon W N G, Keiter E R. A computational investigation of the effects of varying discharge geometry for an inductively coupled plasma [J]. *IEEE Trans Plasma Sci*, 2000, **28**: 2214-2231.
- [14] Kolobov VI, Economou DJ. The anomalous skin effect in gas discharge plasmas[J]. Plasma Sources Sci Tech., 1997, 6(2): R1-R17.
- [15] Mao M, Wang Y N. Influence of external magnetic field on anomalous skin effects in inductively coupled plasma[J]. *Chin Phys Lett*, 2004, 21(3): 511-513.
- [16] 朱武飚,王友年,邓新禄,等. 负偏压射频放电过程的流体力学模拟[J]. 物理学报,1996,45: 1138-1145. (Zhu W B, Wang Y N, Deng X L, et al. Hydrodynamics simulation of RF discharge courses with negative bias. Acta Physica Sinica,1996, 45: 1138-1145)
- [17] Richards A D, Thompson B E, Sawin H H. Continuum modeling of argon radio frequency glow discharges [J]. Appl Phys Lett, 1987, 50: 492-494.

One-dimension hydrodynamics simulation of an inductively coupled plasma

WANG Shuai, MAO Ming, WANG You-nian
(State Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Electron and Ion Beams,
Department of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: Based on a one-dimensional hydrodynamics model in which the power deposition is calculated through the kinetics theory, the spatial distributions profile of the plasma density and the electron temperature in the inductively coupled plasma (ICP), were simulated and the influences of the discharge pressure and the coil current on the plasma density and electron temperature were discussed. It has been found that at low pressures, the distributions of the plasma density are basically spatial homogeneity, except near the edge of the discharge equipment. As the pressure increases, the plasma density distribution tends to be evidently spatial inhomogeneous. Both the plasma density and the electron temperature increase as the coil current increases.

Key words: Inductively coupled plasma(ICP); Hydrodynamics; Plasma density; Electron temperature

