

На правах рукописи

Худайбергенов Гамзат Жапарович

МОДЕЛИРОВАНИЕ АРГОН-СИЛАНОВОЙ ПЛАЗМЫ ВЧЕ РАЗРЯДА

Специальность: 01.04.08 – физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Омск – 2003

Работа выполнена в Институте сенсорной микроэлектронике СО РАН и
в Омском государственном университете

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
доцент Струнин Владимир Иванович

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор
Марусин Владлен Васильевич
Старший научный сотрудник
кафедры технической физики,
к.ф.-м.н.
Луценко Юрий Юрьевич

Ведущая организация: Институт Теплофизики
им. С.С. Кутателадзе СО РАН,
г. Новосибирск

Защита состоится 29 декабря 2003 года в 14³⁰ часов на заседании диссертаци-
онного совета ДС 212.025.01 при Томском политехническом университете
(634050, г. Томск, пр. Ленина 30)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Томского политехнического
университета.

Автореферат разослан «__» ноября 2003 года

Ученый секретарь диссертационного совета



Орлов А.А.

Актуальность исследования. Физика аморфного состояния твердого тела давно привлекает внимание теоретиков и экспериментаторов. Особенно интенсивно она развивается в последнее время в связи с разработкой технологии изготовления и внедрением в промышленность целого ряда электронных, оптических, механических и тепловых приборов на основе тонких аморфных полупроводниковых пленок. Солнечные элементы на основе пленок аморфного кремния (a-Si:H) обещают быть эффективными и экологически чистыми источниками энергии в ближайшем будущем. В настоящее время в электронике интенсивно развиваются направления, связанные с изготовлением полупроводниковых структур на больших площадях, условно их называют электроникой больших площадей [1]. Гидрогенизированный аморфный кремний - материал, обладающий хорошими электрическими свойствами и фотопроводимостью, которые определяют область применения пленок аморфного кремния в оптоэлектронике. Интерес к пленкам гидрогенизированного кремния определяется, также, целым рядом практических приложений, главным из которых является создание *p-i-n* структур для солнечных элементов и функциональных слоев жидкокристаллических дисплеев. Традиционные методы осаждения тонких пленок, основанные, главным образом, на использовании различных типов электрических разрядов, ограничивают развитие электроники больших площадей. Основной целью настоящих исследований является снижение общих затрат на производство солнечных батарей и увеличение коэффициента преобразования, который может достигать 14% [2]. Одним из путей снижения затрат на производство солнечных элементов, является применение новых способов осаждения тонких пленок аморфного кремния, которые позволили бы увеличить локальные скорости осаждения и решить проблему создания слоев на больших площадях подложек. А для этого, в первую очередь, требуется понимание плазмохимических процессов, происходящих в плазме. Т.е. требуется построение стройной, самосогласованной физико-химической модели. Изучение процессов диссоциации силана позволит успешно контролировать как сам процесс формирования пленок, так и влиять на свойства напыляемых объектов.

Целью работы является: разработка самосогласованной математической модели плазмохимического разложения силана в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряда, с учетом влияния метастабильных состояний возбужденных атомов аргона (далее кратко – метастабильных атомов аргона) и конденсированной дисперсной фазы на химический состав плазмы.

Объектом исследования являются физико-химические процессы, протекающие в газовом разряде аргон-силановой ВЧ плазмы, в процессе осаждения тонких пленок аморфного кремния.

Предметом исследования в диссертационной работе является определение оптимальных параметров осаждения тонких пленок аморфного кремния струйным плазмохимическим способом.

Теоретической и методологической основой данного исследования послужили ряд работ, посвященных вопросам разработки плазмохимических моделей разложения и осаждения тонких пленок аморфного кремния [3,4].

В зависимости от поставленных задач на каждом этапе диссертационного исследования применялись методы математического моделирования, экспериментальной физики, спектрометрических исследований, статистические методы обработки экспериментальных данных.

Научная новизна:

- разработана оригинальная математическая модель плазмохимического разложения силана в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряда, содержащая в себе подмодели кинетики электронного газа и кинетики реакций нейтральных частиц;
- впервые произведен кинетический расчет функции распределения электронов по энергиям (ФРЭЭ) в присутствии конденсированной дисперсной фазы и процесса зарядки пылевых кристаллов в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряда. Установлено, что плавающий потенциал пылевых частиц на 50% превышает среднюю энергию электронов;
- в результате численного моделирования установлено, что в аргон-силановой плазме относительное содержание пыли оказывается меньшим

в 4 раза при высоких давлениях ($0.125-0.250 \text{ Torr}$) и в 6-6.5 раз при давлениях около 0.1 Torr , по сравнению с плазмой чистого силана;

- предложен и обоснован механизм передачи возбуждения от метастабильных состояний аргона к молекулам силана аргон-силановой плазме. На основании экспериментальных исследований определены заселенности метастабильных уровней 3P_2 и 3P_0 аргона в смеси аргон-силан: для 3P_2 ($15.19 \cdot 10^6 \div 18.92 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$), для 3P_0 ($9.50 \cdot 10^6 \div 9.68 \cdot 10^6 \text{ см}^{-3}$).

Практическая значимость работы. В данной работе предложена и апробирована математическая модель плазмохимического осаждения тонких пленок аморфного кремния из аргон-силановой плазмы ВЧЕ разряда. Предложенная модель позволяет учитывать влияние пылевых частиц и метастабильных частиц, как на кинетику электронного газа, так и на химический состав плазмы, прогнозировать химический состав. Информация по характеру протекания процессов в плазме позволит привести соотношение внешних параметров газового разряда таким образом, чтобы оптимизировать осаждение тонких пленок. Результаты моделирования могут быть использованы для получения новых материалов с уникальными электро-физическими свойствами. Кроме этого модель станет хорошим инструментом изучения процессов в газоразрядной плазме и может быть использована в учебном процессе для студентов, изучающих физику химически активной плазмы.

Защищаемые положения:

1. Математическая модель плазмохимического разложения силана в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряда, которая включает 20 компонентов.
2. Результаты расчетов ФРЭЭ аргон-силановой плазмы ВЧЕ разряда с учетом процессов взаимодействия метастабильных атомов аргона и пылевых частиц с молекулами силана и его радикалами. Показано, что влияние метастабильных атомов аргона на ФРЭЭ растет со снижением величины приведенного поля. В ВЧ разряде плотность метастабильных атомов аргона снижается с увеличением объемной доли силана в смеси. Установлено, что пылевые час-

тицы, образующиеся в объеме плазмы в результате коагуляции, являются центрами стока высокоэнергетичных электронов.

3. Результаты расчетов химического состава аргон-силановой плазмы ВЧЕ разряда с учетом процессов взаимодействия долгоживущих возбужденных состояний атомов аргона и пылевых частиц с молекулами силана и его радикалами. Показано, что метастабильные атомы аргона в ВЧЕ разряде аргон - силановой плазмы увеличивают относительную плотность пленкообразующих компонент, образуя дополнительный канал развала силана и его стабильных молекул и радикалов, по сравнению с плазмой чистого силана. Показано, что реакции молекул силана и его радикалов с метастабильными частицами аргона не позволяют высшим силанам накапливаться в объеме разряда.
4. Результаты экспериментальных исследований по определению заселенности метастабильных состояний атомов аргона в аргон-силановой плазме. Установлено, что заселенность метастабильных состояний в смеси аргон-силан ниже, чем атмосфере чистого аргона, что объясняется наличием дополнительного канала девозбуждения метастабильных атомов аргона на молекулах силана и его радикалов.

Апробация работы.

Результаты работы докладывались на научных семинарах кафедры экспериментальной физики Омского государственного университета, лаборатории молекулярной кинетики института Теплофизики им. С.С. Кутателадзе. По результатам работы защищены 2 патента, получено 2 свидетельства на регистрацию программ, опубликованы 2 статьи в журнале «Техническая физика», принято участие в научных конференциях: II Всероссийской научно-технической конференции «Компьютерные технологии в науке, проектировании и производстве». Нижний Новгород, 2000; X конференции по физике газового разряда, Рязань, 2000; «Перспективные технологии создания новых материалов для микро- и наноэлектроники». Новосибирск, 2001; 3-Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии, ISTAPC – 2002, г. Плес, Иваново.

Отдельные итоги диссертации вошли в основу проекта конкурса молодых ученых, проведенного корпорацией Самсунг – Samsung Young Scientist Day 13-14 июня 2002 в Новосибирске. Результаты работ опубликованы в ежегодных научных сборниках «Микросенсорика» за 2000-2003 года.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 22 печатные работы, в том числе 2 статьи, 2 патента, 16 тезисов и докладов на конференциях.

Личный вклад заключается в постановке задачи, в выборе методов аналитического решения, в разработке численных алгоритмов для поставленных задач, в написании программ, в проведении расчетов, в разработке математической модели плазмохимического разложения силана в газовой смеси аргон-силан ВЧЕ разряда, в проведении экспериментов по спектрометрическому измерению интенсивностей спектральных линий излучения ВЧЕ разряда аргоновой и аргон-силановой плазмы, интерпретации полученных результатов, подготовке публикаций.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, заключения и списка литературы, изложена на 154 страницах машинописного текста, иллюстрирована 53 рисунками, 11 таблицами. Список цитируемой литературы содержит 152 наименования.

Содержание работы.

Во введении обосновывается выбор темы диссертации, ее актуальность и необходимость дальнейшего изучения, показывается степень ее научной работанности, определяются цель, объект и предмет изучения, формируются задачи исследования, его теоретические основы, отмечаются научная новизна и практическая значимость его результатов.

В первой главе содержится обзор научной литературы, посвященной способам осаждения тонких пленок аморфного кремния. Первая часть этой главы описывает наиболее распространенные способы осаждения тонких пленок, при этом приводятся достоинства и недостатки, указанных методов. Вторая часть первой главы посвящена современным методам моделирования плазмохимических процессов плазмы газового разряда. Ставится вопрос о необходимости ма-

тематического моделирования процессов, происходящих в плазме газового разряда. Производится подробный анализ моделей плазмы, указываются недостатки, достоинства. Раскрывается актуальность выбранной тематики.

Во второй главе произведен расчет функции распределения электронов по энергиям и кинетических коэффициентов для аргон-силановой плазмы газового разряда. Результаты расчета сравнены с экспериментальными значениями скорости дрейфа и характеристической энергии электронов, измеренными в зависимости от величины приведенного поля E/N (E – напряженность поля в В/см, N – концентрация атомов и молекул в см⁻³). Рассмотрено влияние на ФРЭЭ ударов II рода между электронами и тяжелыми частицами, концентрация которых задается параметром N_{II}/N , имеющий высокий порог возбуждения (метастабильное состояние атома Ar_m, энергия возбуждения ~ 11.6 эВ), а также с частицами, имеющий низкий порог. Таковыми являются колебательно-возбужденные молекулы силана (порог возбуждения ~ 0.113 эВ). Результаты расчетов приведены для двух типов разряда: разряда постоянного тока (РПТ) и высокочастотного (ВЧ). Для ВЧ разряда добавка к аргону силана не дает сколько-нибудь заметного изменения ФРЭЭ при $E/N = 2.8 \cdot 10^{-15}$ В·см² (везде далее $\omega/N = 2.41 \cdot 10^{-8}$ см³/с) (см. рис.1,2). Следует отметить, что снижение величины напряженности приведенного поля приводит к росту влияния степени разбавления аргона силаном. Удары II рода с Ar_m в ВЧ плазме аргона слабо влияют на ФРЭЭ как в области низких, так и в области высоких энергий (см. рис.3,4) при $N_{II}/N = 10^{-6}$ и $N_{II}/N = 10^{-5}$. При $N_{II}/N = 10^{-5}$ и малых E/N изменяется вся ФРЭЭ, но изменения существенно слабее, чем в РПТ. Упругие и неупругие потери растут симбатно. Увеличение E/N еще дополнительно снижает роль ударов второго рода (рис.4). Это объясняется тем, что доля быстрых электронов, образовавшихся в сверхупругих процессах, остается прежней (т.к. частота ударов второго рода не меняется) на фоне увеличивающейся плотности высокоэнергетических электронов, получивших энергию от внешнего поля.

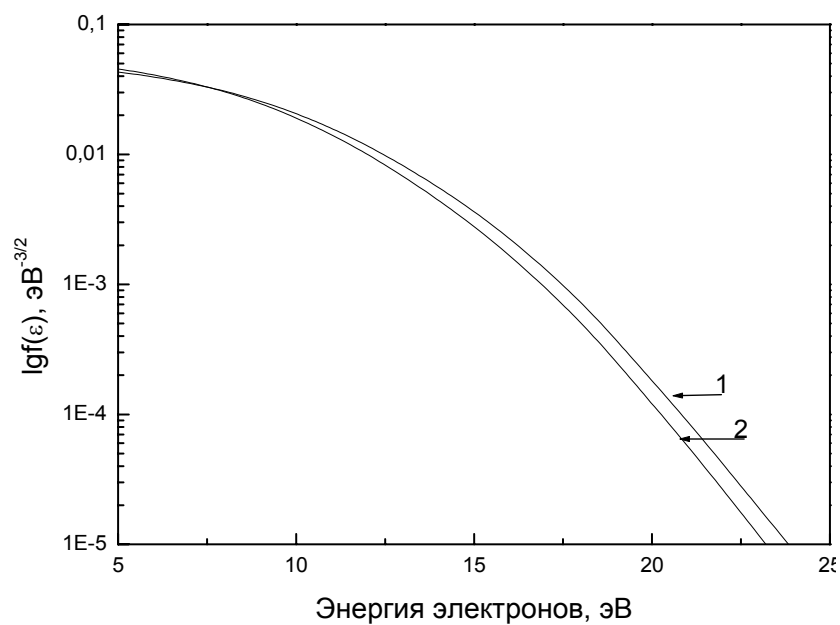


Рис.1. ФРЭЭ в плазме ВЧ разряда для смеси аргон- силан при $E/N = 2.8 \cdot 10^{-15}$ $\text{В} \cdot \text{см}^2$: 1 – ФРЭЭ б/у ударов второго рода; 2 – ФРЭЭ с учетом ударов второго рода; Состав $\text{Ar}+1\%\text{SiH}_4$; $N_{II}/N=10^{-6}$;

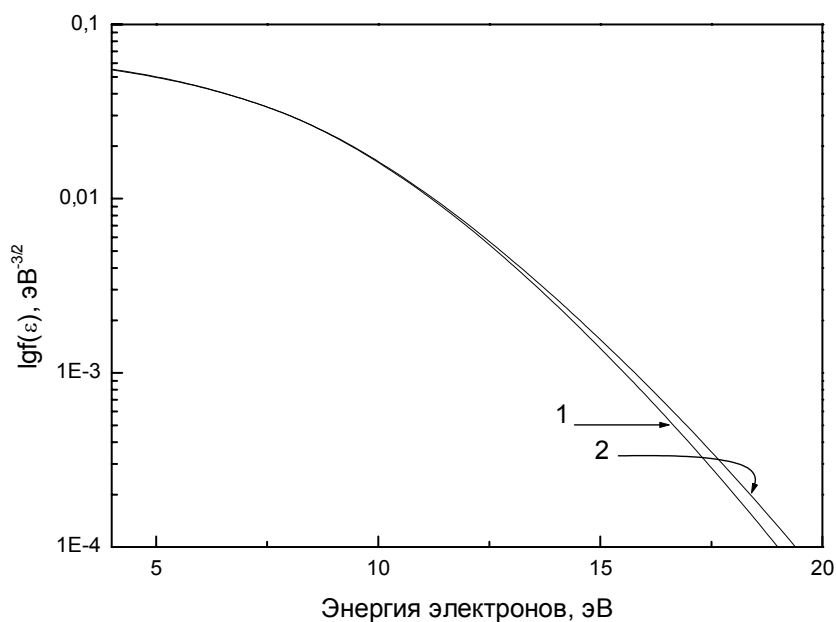


Рис.2. ФРЭЭ в плазме ВЧ разряда для смеси аргон- силан при $E/N = 2.8 \cdot 10^{-15}$ $\text{В} \cdot \text{см}^2$: 1 – ФРЭЭ для состава $\text{Ar}+10\%\text{SiH}_4$; 2 – ФРЭЭ для состава $\text{Ar}+5\%\text{SiH}_4$;

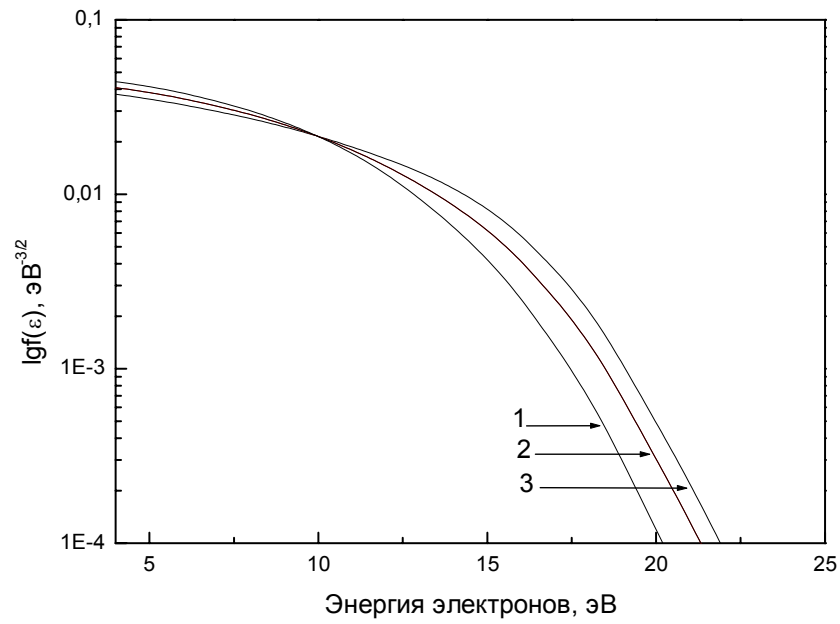


Рис.3. ФРЭЭ в плазме ВЧ разряда в аргоне при $E/N = 1.4 \cdot 10^{-15} \text{ B} \cdot \text{см}^2$: 1 – ФРЭЭ без учета ударов второго рода; 2 – ФРЭЭ с учетом ударов второго рода ($N_{II}/N=10^{-6}$); 3 – ФРЭЭ с учетом ударов второго рода ($N_{II}/N=10^{-5}$);

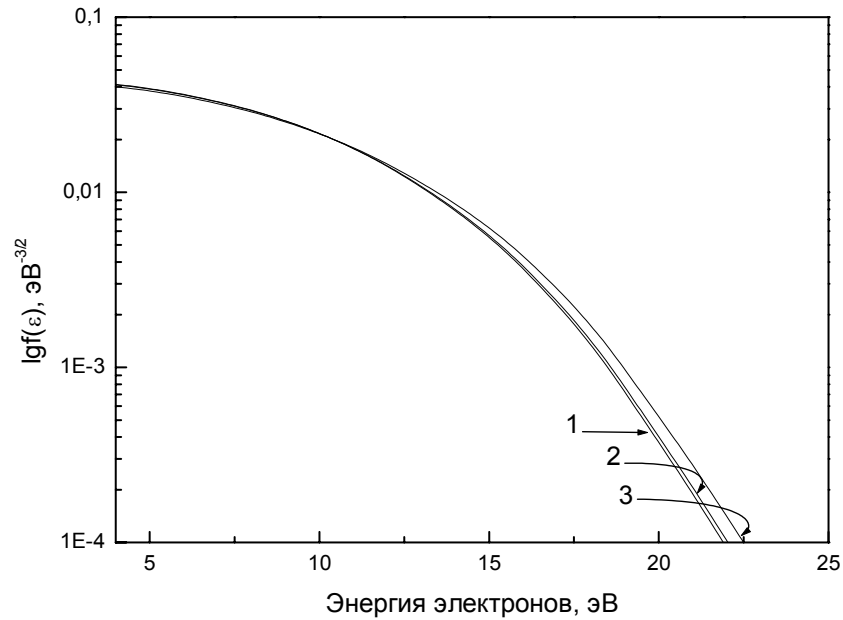


Рис.4. ФРЭЭ в плазме ВЧ разряда в аргоне при $E/N = 2.8 \cdot 10^{-15} \text{ B} \cdot \text{см}^2$: 1 – ФРЭЭ без учета ударов второго рода; 2 – ФРЭЭ с учетом ударов второго рода ($N_{II}/N=10^{-6}$); 3 – ФРЭЭ с учетом ударов второго рода ($N_{II}/N=10^{-5}$).

Образование конденсированной дисперсной фазы в результате коагуляции силана и его радикалов в процессе осаждения тонких пленок аморфного кремния приводит к деформации функции распределения (см. рис.5) в результате прилипания высокоэнергетичных электронов к пылевым частицам. Таким образом, из результатов оценки влияния частиц КДФ на ФРЭЭ, а, следовательно, на значения кинетических коэффициентов процессов, протекающих с участием электронов и ионов, и на условия поддержания газовых электрических разрядов следует необходимость учета этих эффектов при моделировании плазмохимических реакций.

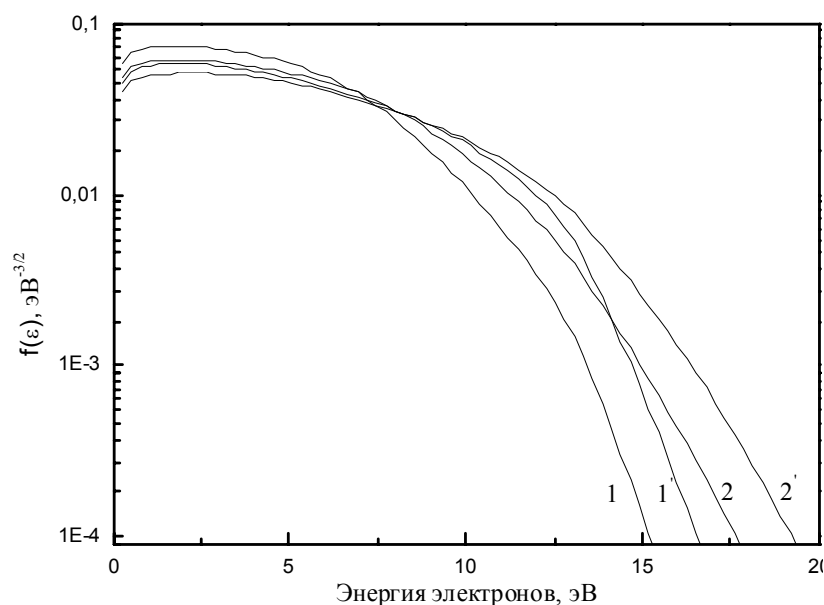


Рис.5. ФРЭЭ в ВЧ разряде аргоновой плазме: 1 и 1' - ФРЭЭ для $E/N = 50 \text{ Тд}$ с КДФ и без КДФ соответственно, 2 и 2' - ФРЭЭ для $E/N = 100 \text{ Тд}$ с КДФ и без КДФ соответственно, $n_d = 3 \cdot 10^7 \text{ см}^{-3}$.

В третьей главе приведены результаты численных расчетов химического состава газовой смеси $\text{Ar} + 5\% \text{SiH}_4$, которая разлагается в плазме ВЧ разряда в кварцевой камере: радиуса $R = 1.25 \text{ см}$ и длиной $L = 5 \text{ см}$ (реальный размер камеры [5]), давление в камере варьируется в интервале $p = 100\text{-}250 \text{ мТорр}$, средне-массовая температура $T = 500 \text{ К}$ и частота генерации ВЧ поля $f = 13.56 \text{ МГц}$.

Приводится обоснование модели: установлено, что для описания химических реакций, протекающих в плазме ВЧ разряда, можно ограничиться 18-ю реагентами (помимо аргона и силана). Кроме этого в модели учитывается уход радикалов и силана в высшие силаны (полисиланы) и пыль Si_yH_n ($y>5$). Образование пыли осуществляется за счет реакции вставки низших силанов в полисиланы, например $\text{SiH} + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11}$, $\text{SiH}_2 + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$, $\text{SiH}_3 + \text{Si}_4\text{H}_{10} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{H}_2$. Принимается во внимание лишь нейтральная компонента плазмы, поскольку в условиях, в которых проведено моделирование ($p=0.100 - 0.250 \text{ Torr}$), реализуется диффузионный режим поддержания разряда $n_i k_r(T_e) \ll (1/\Lambda_D^2) \cdot D_a$, где k_r – коэффициент рекомбинации, Λ_D – диффузионная длина, D_a – коэффициент амбиполярной диффузии, n_i – плотность ионов. Таким образом, для моделирования плазмохимических процессов в процессе осаждения, можно существенно сократить как количество компонентов, так и число химических реакций.

Система уравнений химической кинетики, описывающих, процессы в объеме газового разряда имеет вид:

$$\frac{\partial N_i}{\partial t} + u \nabla N_i = \nabla (D_i \nabla N_i) + \sum_j N_j (n_e K_{ji} + \sum_l K_{jli} N_l) - N_i \sum_j (n_e K_{ij} + \sum_l K_{jli} N_l) \quad (1)$$

где N_i – концентрация i -го компонента, D_i – коэффициенты диффузии, n_e – концентрация электронов, K_{ji} – константы скоростей электронно-индуцированных реакций, K_{jli} – константы скоростей реакций между радикалами, u – скорость потока газа в плазмотроне. Член $u \nabla N_i$ учитывает прокачку газа в разрядной камере. Решение уравнения (1) с конвективным членом, учитывающего прокачку газа, является математически сложной задачей. Но рассматривая задачу на временном отрезке $[0, \tau]$, где $\tau = M_0/Q$, (M_0 и Q масса газа в реакторе и его расход) прокачку можно не учитывать и решать уже существенно нестационарную задачу. Такое приближение, известное как режим идеального вытеснения, имеет место только при отсутствии сильного перемешивания реагирующего газа, в противном случае невозможно ввести параметр τ , определяю-

щий время пребывания газа в реакторе. В условиях эксперимента величина τ составляет $0,1$ с, что гораздо больше времени протекания химических реакций.

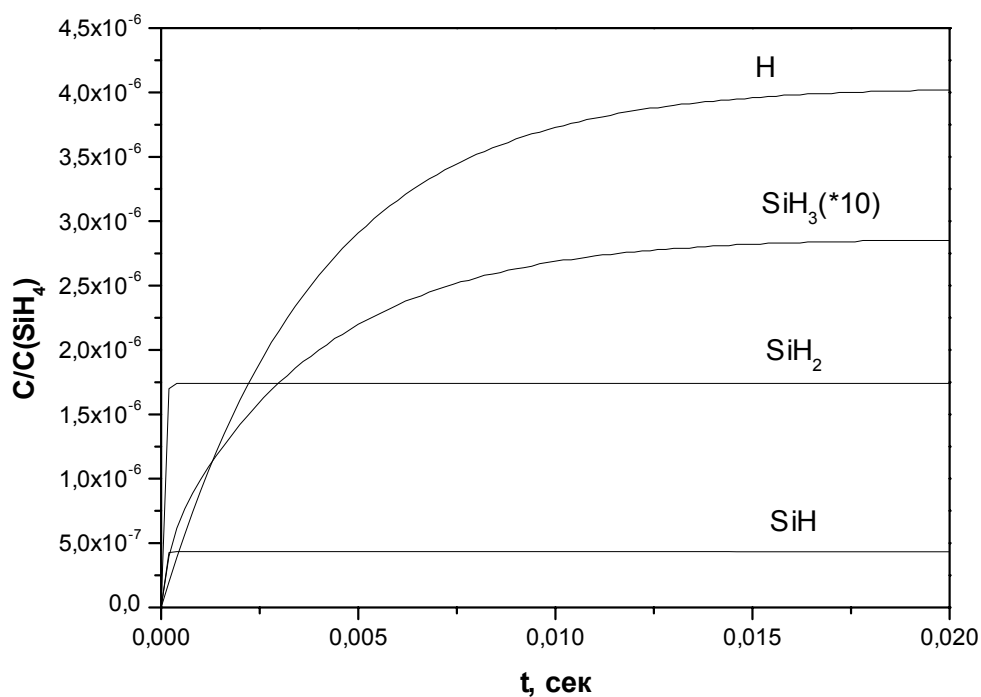


Рис.6. Зависимость концентраций радикалов и водорода от времени.

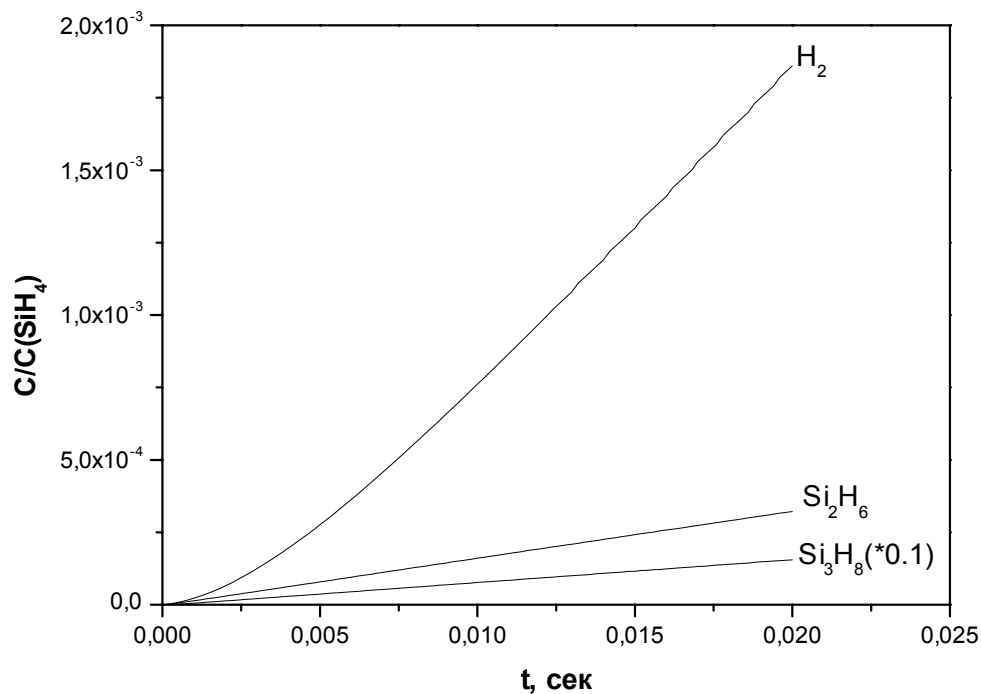


Рис.7. Зависимость концентраций Si_2H_6 , Si_3H_8 и H_2 от времени.

Коэффициенты диффузии рассчитывались по формуле Уилке для многокомпонентных смесей. По итогам, проведенного литературного исследования, уста-

новлено, что наиболее существенный вклад в формирование пленок аморфного кремния приборного качества вносит радикал SiH_3 (силил). Таким образом, необходимо установить, как влияют параметры плазмы: давление, состав и др. на концентрацию силила и других радикалов. В результате обнаружено, что такие компоненты как SiH_2 , SiH быстро (≈ 0.001 сек.) выходят на равновесные концентрации. Тогда как SiH_3 медленно (за время порядка 0.01 сек.) достигает равновесного значения (см. рис.6). Похожим образом ведет себя и атомарный водород. Другой важной особенностью является накопление Si_2H_6 (дисилан), Si_3H_8 и молекулярного водорода в объеме реактора концентрации, которых постоянно увеличиваются (рис.7). Изменение начального состава газа существенно изменяет поведение радикалов, в первую очередь SiH_3 . Реакция $\text{Ar}_m + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H} + \text{Ar}$, являясь дополнительным каналом разложения силана, увеличивает производство силила в сравнении с плазмой чистого силана (см. рис.8). Однако время выхода SiH_3 на равновесный уровень в смеси Ar/SiH_4 увеличивается. Относительная плотность силила в смеси $\text{Ar}+1\%\text{SiH}_4$ превосходит значения SiH_3 для разряда в атмосфере силана, однако время выхода на равновесный уровень растет (рис.9). Это объясняется снижением числа газозависимых процессов силила с другими радикалами, которые идут на образование силанов высших порядков. Активное образование пыли, хотя и оказывает слабое влияние на кинетику основных компонент, может приводить к ухудшению качества пленок. На рис.10 хорошо видно, что разбавление силана аргоном приводит к подавлению образования конденсированной фазы за счет снижения числа газозависимых процессов. В аргон - силановой плазме относительное содержание пыли оказывается меньшим в 4 раза при высоких давлениях ($0.125-0.250$ Torr) и в 6-6.5 раз при давлениях около 0.1 Torr. Таким образом, снижение объемной доли силана в газовой смеси аргон-силан положительно скажется на плотности пленкообразующих компонентов (SiH , SiH_2 , SiH_3), особенно силила, их доля увеличится по сравнению с остальными молекулами и радикалами, а также на концентрацию твердых микрочастиц, как фактора, снижающего качество растущей пленки.

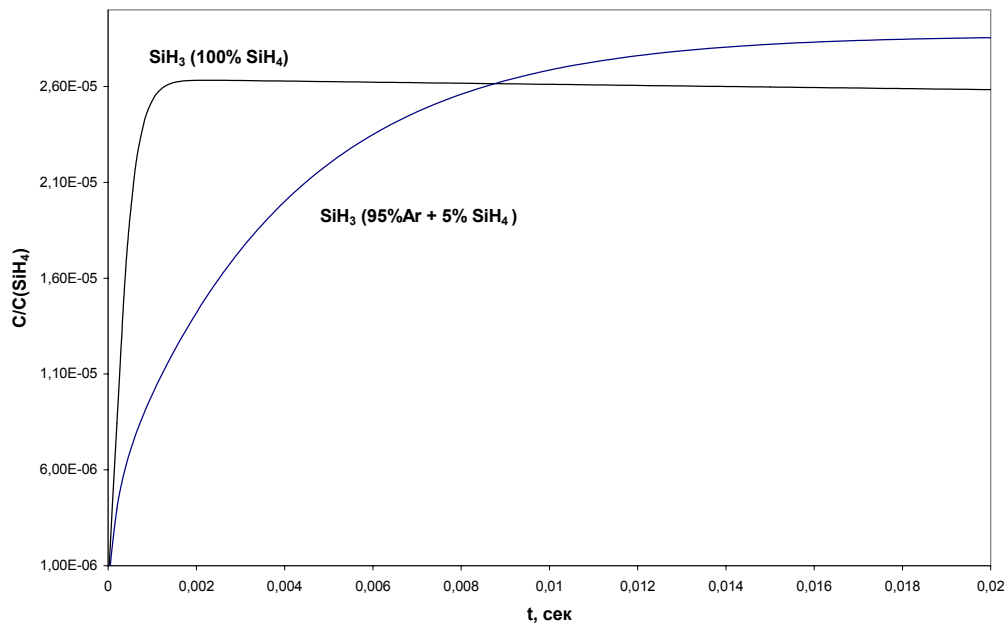


Рис.8. Концентрации силила в зависимости от времени для разных газовых составов при $p=0.125$ Torr.

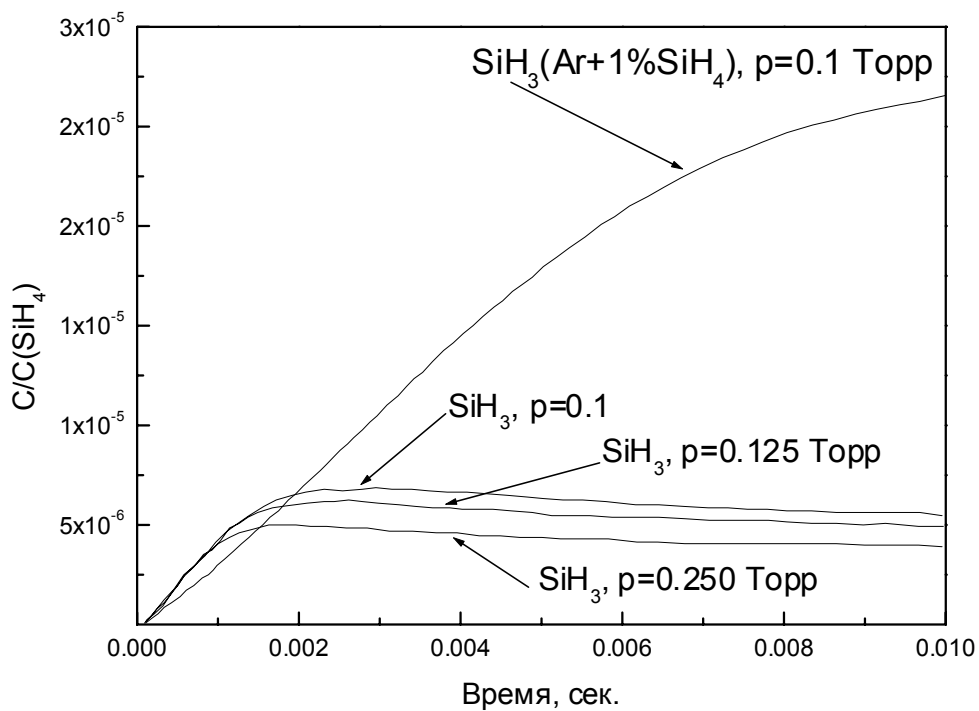


Рис.9. Концентрации силила в зависимости от времени для различных давлений.

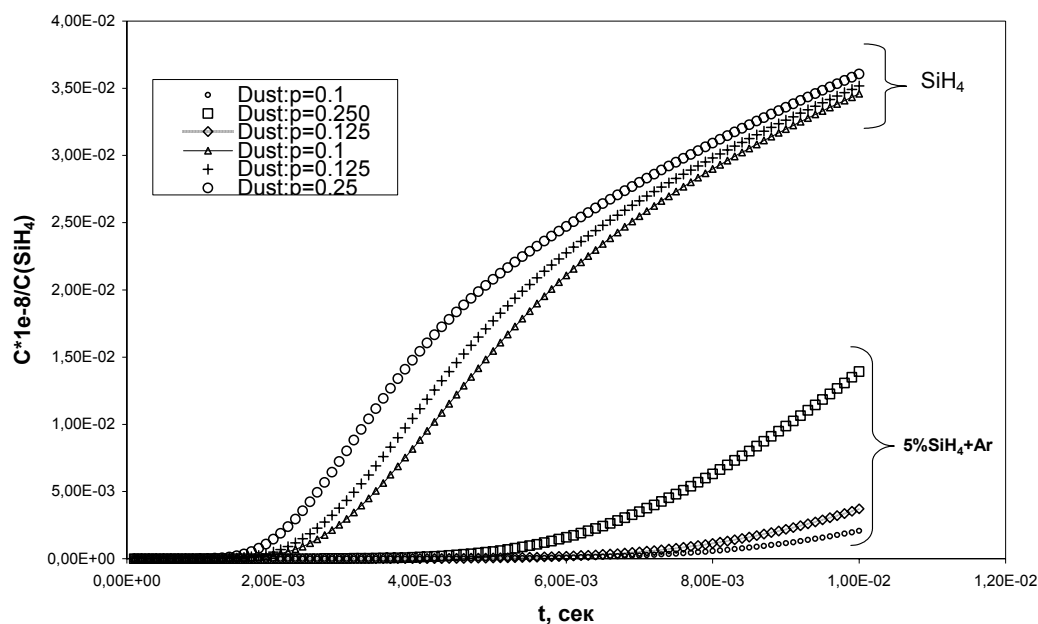


Рис.10. Концентрация пылевых частиц для разных давлений.

Предложенная модель достаточно корректно отражает кинетику химических реакций в активной зоне разряда. Получены концентрации всех основных компонент в аргон - силановой плазме ВЧ разряда. Исследовано влияние аргона на равновесный состав газа. Проведены оценки содержания пыли в разряде.

В четвертой главе описано исследование по спектроскопии плазмы ВЧ разряда. В результате проведенных исследований определены плотности метастабильных частиц. Необходимость данной работы определяется кинетикой образования и гибели метастабильных частиц в химических реакциях. Целью данного исследования являлось: определение методом эмиссионной спектроскопии абсолютных значений заселенности уровней конфигурации $3p^55p$ в ВЧ плазме чистого аргона и смеси аргон – силан; исследование зависимости заселенности метастабильных состояний аргона от давления. При проведении эксперимента в спектре разряда были выявлены 3 линии, соответствующие процессам излучательных переходов ($3p^55p \rightarrow 3p^54s$), при которых происходит распад на метастабильные состояния. Заселенность уровней конфигурации $3p^55p$ определялась по интенсивности спектральных линий, длины волн которых составляют

4164.18 Å, 4181.88 Å и 4200.67 Å. Определение абсолютной заселенности метастабильных состояний 3P_0 и 3P_2 аргона в атмосфере чистого аргона проводилось из уравнения баланса (2), в атмосфере аргона с силаном - (3), в левой части уравнений отмечены процессы идущие на образование метастабильных уровней аргона, в правой части - на девозбуждение:

$$k_1 \cdot n \cdot n_e + \sum_i A_i \cdot n_i = \sum_{i=2}^5 k_i \cdot n_m \cdot n_e + k_7 \cdot n_m^2 + D \cdot \frac{n_m}{\Lambda^2}. \quad (2)$$

$$k_1 \cdot n \cdot n_e + \sum_i A_i \cdot n_i = \sum_{i=2}^5 k_i \cdot n_m \cdot n_e + k_7 \cdot n_m^2 + k_9 \cdot n_m \cdot n_{SiH_4} + k_{10} \cdot n_m \cdot n_{SiH_4} + D \cdot \frac{n_m}{\Lambda^2}, \quad (3)$$

где n_m - заселенность метастабильного состояния, n - концентрация атомов в основном состоянии, n_{SiH_4} - концентрация молекул силана, $k_1 - k_5$, k_7 , k_9 , k_{10} - коэффициенты скоростей процессов рождения и гибели метастабильных состояний аргона, A_i - вероятность перехода, n_i - концентрация атомов уровней конфигурации $3p^55p$, переходящих с излучением на метастабильный уровень, D - коэффициент диффузии. Λ^2 -характерная диффузионная длина; n_e - концентрация электронов, определяемая методом зондовой диагностики. В результате установлена зависимость плотности состояний 3P_0 и 3P_2 от давления (см. рис.11, 12). Результаты расчетов показывают, что заселенность метастабильных состояний аргона падает с ростом давления. Это можно объяснить тем, что с ростом давления увеличивается частота столкновений метастабильных атомов аргона с атомами в основном состоянии. Заселенность метастабильных состояний в атмосфере смеси аргон- силан ниже, чем в атмосфере аргона, что объясняется тушением метастабильных атомов аргона молекулами силана в реакциях $Ar(^3P_{0,2}) + SiH_4 \rightarrow Ar + SiH_3 + H$ и $Ar(^3P_{0,2}) + SiH_4 \rightarrow Ar + SiH_2 + 2H$. На рис.13 продемонстрированы плотности состояний метастабильных атомов аргона $^3P_{0,2}$ в аргон - силановой плазме, которые определены в эксперименте и в ходе численного моделирования. Наблюдается хорошее согласие теоретических расче-

тов с экспериментальными данными, что подтверждает корректность построения физико-химической модели газоразрядной аргон - силановой плазмы.

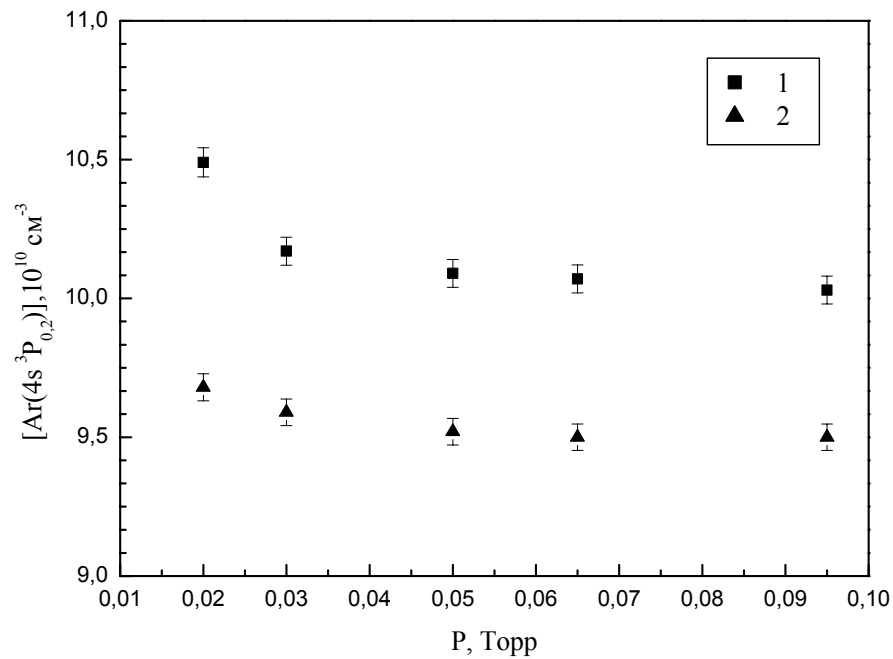


Рис.11. Зависимость заселенности состояния $^3P_{0,2}$ от давления в чистом аргоне: 1- $Ar(4s^3P_2)$; 2- $Ar(^3P_0)$.

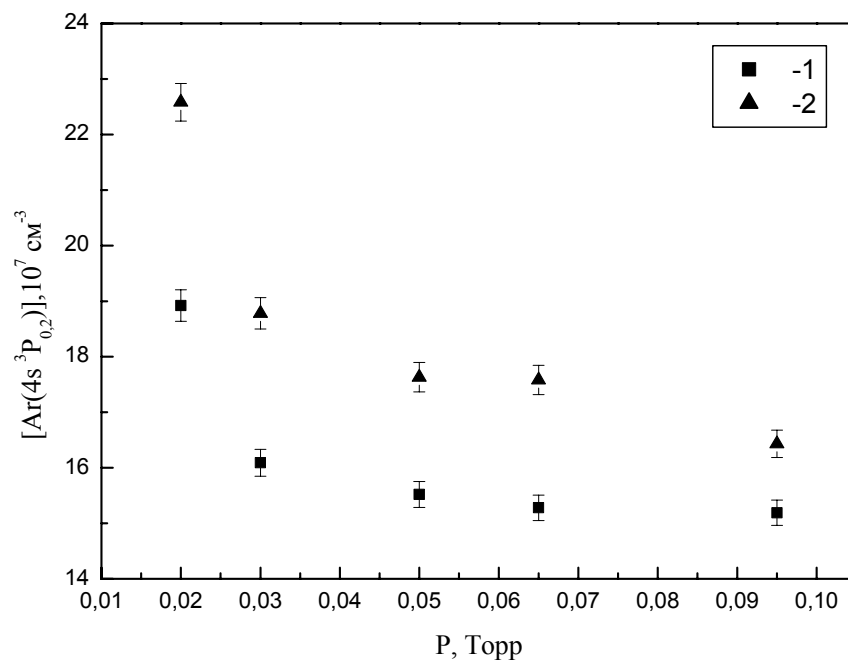


Рис.12. Зависимость заселенности состояния $^3P_{0,2}$ от давления в смеси $Ar+SiH_4$: 1- $Ar(4s^3P_0)$; 2- $Ar(^3P_2)$.

Действительно, баланс метастабильного аргона определяется совокупностью химических реакций с нейтральными атомами, силаном и его радикалами и

взаимодействием с электронами. Поэтому плотность метастабильных состояний во многом определяется частотой столкновений с другими атомами и молекулами, например в реакции с молекулярным водородом, который быстро накапливается в объеме и достигает концентрации сравнимой с концентрацией исходных веществ. Получено удовлетворительное согласие экспериментальных данных и теоретических расчетов по предложенной модели. Кроме того, проведены оптические исследования гидрогенизированных пленок a-Si:H на стекле [6], пленок полученных струйным плазмохимическим методом (образцы №1-3) и стандартным PECVD методом (компания Самсунг). В пленках, полученных струйным методом, обнаружены нанокристаллические включения в пленке (см. табл. 1), это объясняется высоким давлением в плазмотроне (~ 0.5 Torr, скорость роста пленок, при этом составляет ~ 1 мкм/мин.). На основе приведенной модели, предложено снизить давление в камере до 250 м Torr и сократить время пребывания аргон-силановой смеси в активной зоне разряда за счет сокращения длины разрядного промежутка ($R=1.25$ см, $L=2.5$ см), это приведет к снижению образования полисиланов в активной зоне разряда, а следовательно, образование пылевых микрочастиц, выпадающих на подложку.

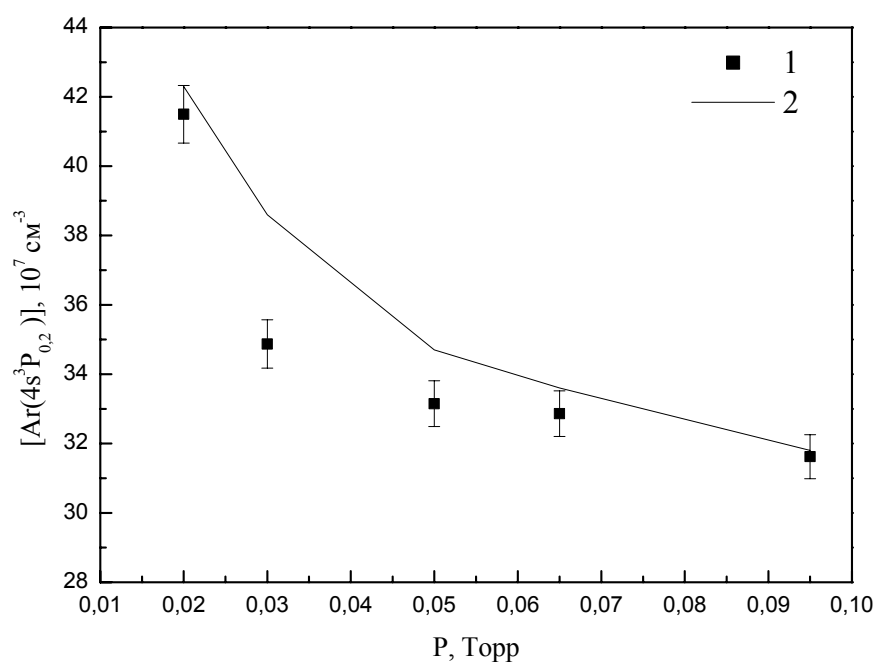


Рис.17. Зависимость заселенности состояния $^3P_{0,2}$ от давления в смеси Ar+SiH₄: 1-Ar ($4s^3P_{0,2}$)- эксперимент [4]; 2- Ar ($4s^3P_{0,2}$)- численный расчет [5].

Таблица 1. Объемная доля кристаллической фазы и средний размер кристаллитов в пленках [6].

Образец	Размер нанокрист. включений, А	Объемное содержание нанокрист. фазы, ат. %	Концентрация зародышей, см ⁻¹
Samsung	Нет	<4	Нет
№1	9	84	$2.7 \cdot 10^{20}$
№2	10	84	$1.7 \cdot 10^{20}$
№3	13	91	$1.6 \cdot 10^{20}$

После изложения оригинальных глав в работе приведены **выводы, заключение и список литературы.**

Выводы. Заключение.

1. Разработана математическая модель плазмохимического разложения силана в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряде. Анализ реакций, протекающих в плазме ВЧ разряда, показал, что можно ограничиться 20-ю компонентами. Модель замыкается уходом радикалов и силана в высшие силаны и пыль.
2. В результате расчетов ФРЭЭ аргон-силановой плазмы ВЧЕ разряда с учетом процессов взаимодействия метастабильных атомов аргона и пылевых частиц с молекулами силана и его радикалами показано, что влияние метастабильных атомов аргона на ФРЭЭ растет со снижением величины приведенного поля. Установлено, что пылевые частицы, образующиеся в объеме плазмы в результате коагуляции, деформируют ФРЭЭ в сторону снижения средней энергии электронов.
3. На основании расчета химического состава аргон-силановой плазмы установлено, что метастабильные атомы аргона в ВЧЕ разряде аргон - силановой плазмы, увеличивают относительную плотность пленкообразующих компонент, образуя дополнительный канал развала силана и его ста-

бильных молекул и радикалов, по сравнению с плазмой чистого силана. Показано, что реакции молекул силана и его радикалов с метастабильными частицами аргона не позволяют высшим силанам накапливаться в объеме разряда.

4. В результате экспериментальных исследований по определению заселенности метастабильных состояний атомов аргона в аргон-силановой плазме установлено, что заселенность метастабильных состояний в смеси аргон-силан ниже, чем атмосфере чистого аргона, что объясняется эффективной передачей энергии возбужденного состояния с метастабильного уровня атома аргона на уровень диссоциации молекулы силана.

Таким образом, диссертация в соответствии с поставленной целью является законченной научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи – построение самосогласованной математической модели плазмохимического разложения силана в аргон-силановой плазме ВЧЕ разряда, направленной на получение тонкопленочных покрытий из аморфного кремния.

Полученная информация по характеру протекания процессов в плазме позволит привести соотношение внешних параметров газового разряда таким образом, чтобы оптимизировать осаждение тонких пленок аморфного кремния и снизить затраты на производство солнечных элементов.

Пленки аморфного кремния находят практическое применение в твердотельной микроэлектронике, главным из которых по нашему мнению является создание *p-i-n* структур для солнечных элементов.

Разработанная программа может быть использована для моделирования процессов плазмохимического осаждения тонких пленок из газоразрядной плазмы любого газового состава и для получения новых покрытий с уникальными электрофизическими свойствами, в частности программа использовалась для моделирования процессов осаждения алмазоподобных покрытий.

Основные публикации по теме диссертации

1. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В., Баранова Л.В. Плазмохимические методы формирования пленок аморфного кремния. // Сборник научных трудов «Микросенсорика». Омск. 2000. Стр. 142-148.
2. Пат. 2165476 RU, МПК 7 С 23 С 16/24, С 16/50. Способ нанесения пленок аморфного кремния и устройство для его осуществления / Баранова Л.В., Струнин В.И., Худайбергенов Г.Ж. - № 99116437/02; Заявлено 27.07.99; Оpubл.20.04.2001 Бюл. №11 – 5 с.: ил.
3. Пат. 2188878 МПК 7 С 23 С 16/24, С 16/50, Н 01 L 21/205. Способ нанесения пленок аморфного кремния и устройство для его осуществления / Баранова Л.В., Струнин В.И., Худайбергенов Г.Ж. и др. - № 2000119336/28; Заявлено 19.07.2000; Оpubл.10.09.2002 Бюл. №25 – 5 с.: ил.
4. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Шкуркин В.В. «Программа расчета энергетического распределения электронов в плазме газового разряда». // Вестник ОмГУ. 2000. Т. 2. С. 27-29.
5. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В.// «Метастабильные состояния аргона и равновесный состав аргон-силановой RF плазмы.» Материалы конференции «Перспективные технологии создания новых материалов для микро- и нанoeлектроники». ISBN: 5-7782-0347-0 Вып.3. стр. 85 -87. Эрлагол. 3 - 7 июля 2001 г.
6. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., // Влияние долгоживущих состояний атомов аргона на ФРЭЭ. II Международный технологический конгресс. ВТТВ-2003 часть 1. Стр. 48-49. Омск. 4 - 6 июня 2003 г.
7. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В. Скорости реакций диссоциации молекулы моносилана в плазме тлеющего разряда. Тезисы докладов X конференции по физике газового разряда. // Часть 2. С. 97-99. Рязань. 2000.

8. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В.// «Моделирование кинетики роста полисиланов в плазме ВЧЕ-разряда» Сборник научных трудов «Микросенсорика». 2002. ISBN 5-8268-0576-5 Стр. 130- 137.
9. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В. // Влияние КДФ на кинетические коэффициенты ВЧ разряда низкого давления. II Международный технологический конгресс. ВТТВ-2003 часть 1. Стр. 60-63. Омск. 4 - 6 июня 2003 г.
10. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В. Расчет химического состава аргон - силановой ВЧ плазмы.// Материалы научной молодежной конференции «Молодые ученые на рубеже третьего тысячелетия». С. 142-144. Омск. 13 - 15 июня 2001 г.
11. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В. Моделирование процесса разложения силана в высокочастотной плазме.// ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 6. С. 109-114
12. Худайбергенов Г.Ж., Струнин В.И., Ляхов А.А., Шкуркин В.В. Расчет химического состава аргон - силановой ВЧ плазмы.// Сборник материалов 3-Международного симпозиума по теоретической и прикладной плазмохимии. ISTAPC-2002. Т.1. С. 203-206. ISBN-5-230-015667. г. Плес (Иваново). 16 - 21 сентября 2002г.
13. Худайбергенов Г.Ж., Байсова Б.Т., Струнин В.И., Струнина Н.Н. //Абсолютные заселенности метастабильных состояний аргона в плазме высокочастотного разряда. ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 30-33.

Список цитируемой литературы.

1. Kushner M. A model for the discharge kinetics and plasma chemistry during plasma enhanced chemical vapor deposition of amorphous silicon. // J. Appl. Phys. 1988. Vol. 63 (8). P. 2532-2551
2. Горбачев Ю., Затевахин М., Каганович И. Моделирование роста пленок гидрированного аморфного кремния из ВЧ разрядной плазмы. // ЖТФ. 1996. Т. 66. С. 89-110
3. Горбачев Ю., Затевахин М., и др. Особенности роста пленок гидрированного аморфного кремния в PECVD-реакторах. // ЖТФ. 2000. Т. 70. С. 77-86
4. Байсова Б.Т., Струнин В.И., Струнина Н.Н., Худайбергенов Г.Ж Абсолютные заселенности метастабильных состояний аргона в плазме высокочастотного разряда. //ЖТФ. 2003. Т. 73. Вып. 8. С. 30-33
5. Струнин В.И., Ляхов А.А., Худайбергенов Г.Ж., Шкуркин В.В. Моделирование процесса разложения силана в высокочастотной плазме.// ЖТФ. 2002. Т. 72. Вып. 6. С. 109-114
6. Болотов В.В., Канн В.Е., Носков А.В. и др. Оптические свойства гидрогенизированных пленок a-Si на стекле, полученных плазмохимическими методами. // Сборник научных трудов «Микросенсорика». 2002. ISBN 5-8268-0576-5 Стр. 21- 32.