

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА

На правах рукописи

Кропоткин Андрей Никитич

**Физические процессы в плазме индукционных разрядов в
реакторах для обработки материалов микроэлектроники**

Специальность 1.3.9. Физика плазмы

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2026

Диссертация подготовлена в отделе микроэлектроники Научно-исследовательского института ядерной физики имени Д.В. Скобелыцына, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова.

- Научный руководитель** — *Волошин Дмитрий Григорьевич,*
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
- Официальные оппоненты** — *Лебедев Юрий Анатольевич,*
доктор физико-математических наук, доцент,
Институт нефтехимического синтеза
им. А.В. Топчиева РАН,
главный научный сотрудник, и.о.
заведующего лабораторией "Плазмохимии и
физикохимии импульсных процессов"(№ 14)
- Мяконьких Андрей Валерьевич,*
доктор физико-математических наук,
Национальный исследовательский центр
«Курчатовский институт»,
ведущий научный сотрудник Отделения
физико-технологических исследований
им. К.А. Валиева
- Кочетов Игорь Валерианович,*
кандидат физико-математических наук,
Государственный научный центр Российской
Федерации «Троицкий институт инновацион-
ных и термоядерных исследований»,
ведущий научный сотрудник отдела
теоретической физики, вычислительной
математики и перспективных разработок

Защита диссертации состоится «17» сентября 2026 г. в 17-00 на заседании диссертационного совета МГУ.013.7 Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова по адресу: 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, стр.2, Физический факультет МГУ, ауд. Н-16.

E-mail: diss.sov.013.7@org.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени М.В.Ломоносова (Ломоносовский просп., д.27) и на портале: <https://dissovet.msu.ru/dissertation/4001>

Автореферат разослан «__» _____ 20__ г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук

И.Н.Карташов

Общая характеристика работы

Актуальность темы диссертационной работы определяется сочетанием фундаментальных проблем физики плазмы и практических задач, возникающих в современных технологиях при плазменной обработке различных материалов. Индукционно-связанные плазменные источники (Inductively Coupled Plasma - ICP) представляют собой один из ключевых классов газовых разрядов, обеспечивающих высокую плотность плазмы при низком давлении (порядка единиц и десятков мТорр) и относительно высокой степени ионизации ($\sim 10^{-3}$), что делает их особо перспективными для технологических приложений в микроэлектронном производстве, нанотехнологиях, включая плазмо-химическое травление металлов и диэлектриков, в частности атомно-слоевое травление (АСТ), напыление тонких пленок из газовой фазы, к примеру, атомно-слоевое осаждение (АСО) и обработку поверхностей различных материалов. Высокая плотность и относительная однородность плазмы, достигаемые в ICP-реакторах, являются критически важными параметрами для процессов травления и осаждения тонких пленок, влияющими на масштабируемость и качество продуктов полупроводникового производства. ICP-источники активно используются для обработки сложных структур с нанометровыми топологическими размерами, где точный контроль над химическими и физическими свойствами плазмы определяет конечное качество изделий.

Наряду с этим, развитие вычислительных методов и моделирования плазмы позволило существенно расширить возможности анализа и оптимизации плазменных процессов без проведения большого числа дорогостоящих экспериментов. Численные модели плазмы становятся неотъемлемым инструментом при проектировании и совершенствовании плазменных реакторов, поскольку они позволяют получить пространственно-временное распределение ключевых параметров плазмы (плотностей и температур частиц) и энергетических спектров ионов для широкого диапазона управляющих параметров и конструктивных особенностей. При этом сложность совокупного самосогласованного описания электромагнитных, термодинамических и кинетических процессов в индукционных разрядах требует разработки новых численных моделей, способных адекватно описывать плазменные характеристики, в том числе с учетом неоднородности температуры и потока нейтрального газа в экспериментальных и промышленных реакторах.

Разработка кинетических схем реакций и проведение расчетов на их основе особенно актуальны для разрядов, содержащих молекулярные и электроотрицательные газы, где до сих пор остается множество нерешенных вопросов как с технологической точки зрения, так и с фундаментальной. Современные исследования показывают, что моделирование плазменных реакторов может служить не только для анализа текущих конфигураций, но и для оптимизации геометрии реактора и режимов работы, что снижает число эмпирических испытаний и ускоряет разработку технологических процессов и новых установок.

Таким образом, разработка самосогласованных численных моделей ин-

дукционных разрядов, сочетающих гидродинамическое описание плазмы с кинетическими расчетами энергетических характеристик ионов, является актуальной задачей как с точки зрения фундаментального понимания физических процессов, так и с точки зрения практических приложений в плазменной обработке материалов. Решение этой задачи способствует расширению области применимости моделей на широкий класс газов и газовых смесей, используемых в технологических плазменных реакторах, а также предоставляет важные инструменты для анализа и оптимизации плазменных процессов, что в совокупности отвечает современным требованиям научно-технического развития и промышленной практики.

Целью данной диссертационной работы является разработка и применение самосогласованной численной модели индукционного разряда, основанной на гидродинамическом описании плазмы с учетом неоднородности температуры и протока нейтрального газа, а также кинетического расчета энергетических характеристик ионов. Это необходимо для детального анализа физических и плазмохимических процессов в индукционных реакторах обработки материалов микроэлектроники и получения на этой основе количественных зависимостей характеристик плазмы от параметров разряда, состава газовой смеси и конструкции реактора. **Задачей** исследования являлось проведение численных расчетов для разрядов в инертных, биатомных и фторуглеродных газах и их смесях, для выявления механизмов, определяющих распределения плотностей и температур частиц, электроотрицательности и ионных потоков. Также одной из задач являлось проведение оценок применимости и ограничений используемых модельных приближений при моделировании индукционных разрядов, применяемых в технологиях обработки материалов микроэлектроники с нанометровой топологией.

Объектом исследования в данной работе являются индукционные разряды, различные конфигурации которых используются для обработки материалов микроэлектроники, например разряды в инертных, биатомных и фторуглеродных газах и их смесях. **Предметом исследования** выступают закономерности формирования пространственно-временных распределений основных характеристик плазмы — концентраций и температур заряженных и нейтральных частиц, электроотрицательности, электрического поля, а также энергетических спектров и потоков на обрабатываемую поверхность ионов — в зависимости от параметров разряда, состава газовой смеси и конструктивных особенностей реактора. При этом учитывается взаимосвязанное влияние электромагнитных, газодинамических и плазмохимических процессов, описываемых в рамках самосогласованной гидродинамической модели.

Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке и реализации самосогласованного численного подхода к моделированию индукционных разрядов в реакторах обработки поверхностей, объединяющего гидродинамическое описание плазмы с учетом неоднородности температуры и протока нейтрального газа и кинетический расчет энергетических характеристик ионов в электрическом поле. Отдельным новым научным результатом работы

является описание индукционного разряда в двухкамерной конфигурации реактора, в рамках которого показано существование и количественно проанализированы большие пространственные неоднородности плотности плазмы, температуры электронов и электрического потенциала между камерами, характерные для широко используемых в промышленности двухкамерных систем, что ранее не рассматривалось в моделях для однокамерных реакторов. Получены новые результаты по моделированию индукционных разрядов в молекулярных электроотрицательных газах Cl_2 и O_2 и их смесях с аргоном с учетом расширенной плазмохимической кинетики, включая учет колебательных состояний молекул кислорода, а также в тройной смеси $\text{O}_2/\text{Cl}_2/\text{Ar}$, включая учет образования радикалов на стенках реактора. Для фторуглеродных газов C_3F_8 и C_4F_8 получены схемы кинетических реакций с учетом наборов сечений электронных процессов, что позволило уточнить описание состава плазмы и электроотрицательности в индукционных разрядах данного типа в широком диапазоне входных параметров. Для газа C_3F_8 это сделано впервые.

Практическая значимость полученных результатов в ходе выполнения данной диссертации заключается в возможности использования разработанной самосогласованной численной модели индукционного разряда для анализа и оптимизации режимов работы плазменных экспериментальных и промышленных реакторов, применяемых в технологических процессах обработки поверхностей различных материалов в инертных, биатомных и фторуглеродных газах и их смесях. Полученные зависимости характеристик плазмы и энергетических спектров и потоков заряженных и активных нейтральных частиц от давления, мощности, состава газа и конструктивных особенностей реактора могут быть использованы при проектировании и модернизации плазменных установок, выборе технологических режимов и интерпретации экспериментальных данных, а также при построении и уточнении плазмохимических схем реакций и транспортных коэффициентов, что позволяет сократить объем экспериментальных исследований и повысить воспроизводимость и управляемость технологических процессов плазменной обработки поверхностей с наноструктурными элементами.

Результаты, приведенные в данной работе, использовались при выполнении ряда грантов РНФ и РФФИ, в том числе в гранте РНФ по разработке процессов атомно-слоевого травления в рамках стратегических инициатив Президента Российской Федерации в научно-технологической сфере в области производства интегральных схем.

Методологической основой работы является численное решение методом конечных элементов самосогласованной системы гидродинамических уравнений для заряженных и нейтральных частиц вместе с электромагнитными уравнениями Максвелла, термодинамическим уравнением и уравнениями Навье-Стокса для нейтрального газа. Для получения функции распределения по энергиям в работе также используется численное решение уравнения Больцмана в двучленном приближении и кинетическим методом Монте-Карло. Верификация модели проводится через сопоставление расчетных данных с экспе-

риментальными зондовыми и спектроскопическими измерениями параметров плазмы.

На защиту выносятся следующие **положения**:

1. Пространственные распределения плотности плазмы, температуры электронов и плазменного потенциала в двухкамерном индукционном реакторе в аргоне существенно отличаются между камерами, различия значений этих величин достигают до двух порядков при давлениях порядка 10–50 мТорр и мощностях разряда 100–1000 Вт, что определяет существенное перераспределение потоков заряженных частиц на обрабатываемую поверхность.
2. Учет нагрева и протока нейтрального газа приводит к снижению плотности плазмы в области обработки поверхности материала по сравнению с изотермическими моделями, причем различие в расчетных значениях концентрации электронов достигает нескольких раз при увеличении температуры нейтрального газа до 600–1000 К.
3. Вклад инерционных членов в уравнение движения ионов становится существенным при давлениях ниже 50–100 мТорр, вследствие чего использование диффузионно-дрейфового приближения приводит к отклонению в расчетах плазменных характеристик до величин порядка десятков процентов по сравнению с решением полного уравнения сохранения импульса.
4. Доминирующий нейтральный радикал в разряде в тройной смеси $\text{Ar}/\text{O}_2/\text{Cl}_2$ при росте доли O_2 и фиксированной доли Ar изменяется от атомарного хлора к атомарному кислороду в области 60–70% O_2 , а максимум скорости травления рутения достигается при содержании кислорода около 80%, что соответствует переходу от хлорсодержащего к кислородсодержащему ионно-радикальному режиму плазмы.
5. При увеличении вкладываемой в индукционный разряд мощности во фторуглеродных газах октафторциклобутана и октафторпропана реализуется смена режима разряда к более равномерному горению во всей области реактора, при котором максимум плотности плазмы смещается из области верхней камеры ближе к области обработки материала, что сопровождается увеличением степени диссоциации исходного газа, увеличением концентрации легких фторсодержащих радикалов и уменьшением доли тяжелых нейтральных и ионных компонент, что в совокупности определяет полимеризующие свойства плазмы.

Достоверность полученных результатов определяется хорошим согласием результатов математического моделирования с экспериментальными данными, а также согласием с результатами, полученными другими авторами в рамках различных теоретических подходов, где такие данные имеются.

Личный вклад автора заключается в следующем. Приведенные в диссертационной работе результаты получены лично автором или совместно с сотрудниками отдела микроэлектроники НИИЯФ МГУ. При этом все представленные результаты численного моделирования получены автором лично. Автором самостоятельно разработана и реализована самосогласованная численная модель индукционного разряда, проведены расчеты, анализ и интерпретация полученных результатов. При непосредственном участии автора проводились постановка задач, выбор и реализация численных методов и подготовка публикаций по материалам диссертационной работы.

Апробация полученных результатов была проведена в процессе докладов на 6 международных конференциях:

1. Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов-2018», МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, Россия, 10–11 апреля 2018 г.
2. 9th Radio-Frequency Discharge Workshop, Дублин, Ирландия, 24–25 июня 2019 г.
3. XLVII Международная (Звенигородская) конференция по физике плазмы и УТС, Звенигород, Россия, 16–20 марта 2020 г.
4. IX Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии, Иваново, Россия, 13–17 сентября 2021 г.
5. 16th International Conference "Gas Discharge Plasma and Their Applications Уфа, Россия, 18–22 сентября 2023
6. 32nd Summer School and International Symposium on the Physics of Ionized Gases (SPIG 2024), Белград, Сербия, 26–30 августа 2024 г.

Основное содержание и результаты диссертации **опубликованы** в 9 печатных работах, из них 7 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ и 2 статьи в других рецензируемых научных изданиях, индексируемых РИНЦ.

Содержание диссертационной работы изложено на 170 страницах и включает в себя введение, обзор литературы, четыре главы, заключение и список литературы. Работа содержит 64 рисунка и 18 таблиц.

Основное содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи диссертационной работы, показаны научная новизна и практическая значимость полученных результатов. Далее приведен подробный **обзор литературы**, касающейся последующих четырех глав диссертации.

В Главе 1: Модель индукционного разряда в аргоне с учетом неоднородности температуры и протока газа разработана и протестирована самосогласованная двумерная гидродинамическая модель индуктивно-связанного плазменного разряда в диффузионно-дрейфовом приближении, включающая уравнения переноса заряженных частиц, уравнения Максвелла, тепловой баланс и течение нейтрального газа. Для расчета функции распределения ионов по энергиям (ФРИЭ) была также использована кинетическая модель Монте-Карло. В разделе 1.1 представлено математическое описание модели индукционной плазмы [A1].

Далее в разделе 1.2 приводятся результаты расчетов в аргоне [A1,A3]. Сперва адекватность построенной модели подтверждается сравнением с экспериментальными данными и опубликованными расчетами для простой цилиндрической геометрии [1,2] и Gaseous Electronic Conference reference cell (GEC) реактора [3]. Геометрия GEC реактора представляет собой стандартизированную систему для сравнения экспериментальных измерений и численных расчетов емкостных и индукционных разрядов, сделанных разными методами и разными научными группами в одинаковых условиях.

Основное внимание в данном разделе уделено двухкамерному индукционному реактору типа "вниз по потоку" отдела микроэлектроники НИИЯФ МГУ [4]. Установлено, что пространственные распределения плотности плазмы, температуры электронов и плазменного потенциала в такой геометрии имеют выраженный немонотонный характер, что проиллюстрировано на примере плотности плазмы на рисунке 1б. Из рисунка видно, что максимум плотности плазмы локализован в верхней камере в области индуктора, а в нижней камере концентрация уменьшается до двух порядков величины. При давлениях 10–50 мТорр и мощностях 100–1000 Вт такие градиенты определяют перераспределение потоков заряженных частиц на обрабатываемую поверхность.

В модель плазмы также включены уравнения нагрева и протока нейтрального газа. На рисунке 1а показано, что температура газа существенно неоднородна и возрастает с увеличением мощности, достигая около 1000 К.

Учет нагрева и протока приводит к снижению плотности плазмы в области обработки поверхности по сравнению с изотермическими моделями, что показано в сравнительных расчетах в таблице 1. Различие в расчетных значениях концентрации электронов достигает нескольких раз.

Таблица 1 – Сравнение значений концентрации электронов и потока ионов с экспериментальными данными из работы [4]. а) Без протока, $T_{\text{gas}} = 500\text{K}$, б) без протока, расчет T_{gas} , в) с протоком, $T_{\text{gas}} = 500\text{K}$, г) с протоком, расчет T_{gas}

	а)	б)	в)	г)	Эксп.
$n_e, 10^9 \text{ см}^{-3}$	0.95	3.30	4.63	2.18	1.54
$F_i, 10^{14} \text{ см}^{-2}\text{с}^{-1}$	1.18	3.86	0.56	2.36	1.78

Установлено и показано на рисунке 1б, что увеличение расхода газа уси-

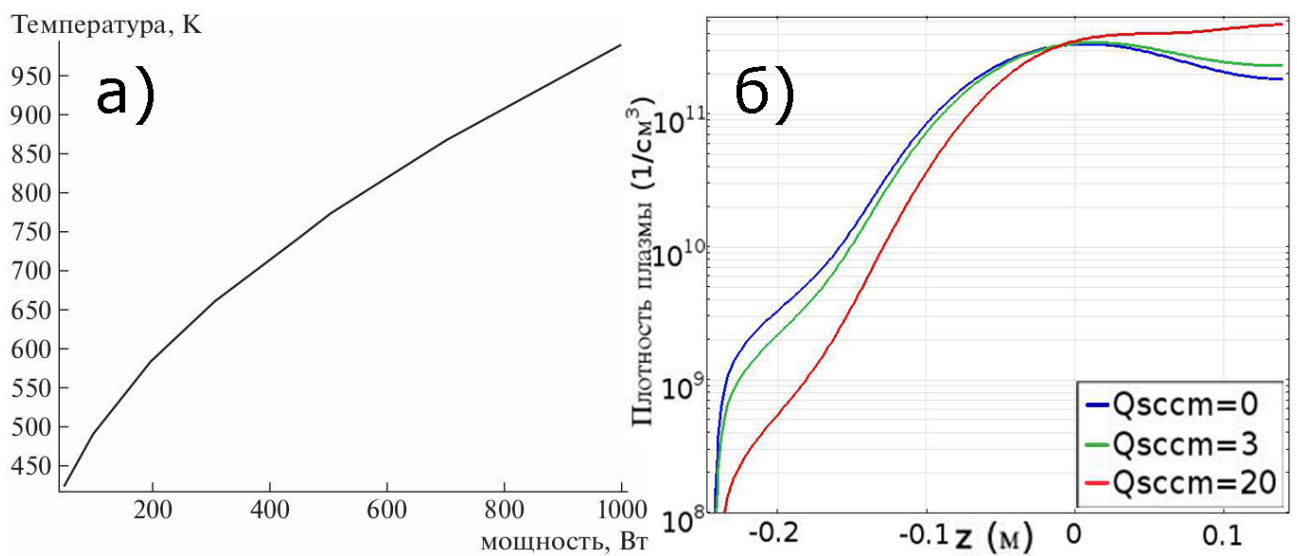


Рисунок 1 – Зависимость температуры газа в центре разряда от вложенной мощности а), профиль концентрации электронов на оси разряда при различных расходах газа б)

ливает генерацию плазмы в верхней камере вследствие роста локального давления, но снижает концентрацию заряженных частиц в нижней камере из-за фиксированной вкладываемой в разряд мощности.

В разделе 1.3 было исследовано влияние дополнительного ВЧ смещения на нижнем электроде на параметры плазмы [A2]. Рост амплитуды напряжения приводит к увеличению отрицательного самосмещения, изменению толщины приэлектродного слоя и росту плотности плазмы в зоне обработки (порядка 10^9 см^{-3} для $V_{\text{rf}} = 215 \text{ В}$). На основе пространственно-временного распределения электрического поля рассчитаны функции распределения ионов по энергиям, приведенные на рисунке 2. Показано, что максимум ФРИЭ определяется суммой плазменного потенциала и напряжения самосмещения, а форма спектра зависит от столкновений ионов в приэлектродном слое.

Таким образом, разработанная модель адекватно описывает плазменные характеристики двухкамерного индукционного реактора, влияние нагрева и протока газа, а также позволяет рассчитывать потоки и энергетические спектры ионов на поверхности подложки.

В Главе 2: Влияние инерции и подвижности ионов на результаты расчетов в диффузионно-дрейфовых моделях в разделе 2.1 выполнено сравнение результатов моделирования индуктивно-связанного плазменного разряда в двух постановках: с использованием диффузионно-дрейфового приближения для ионов и с решением полного уравнения сохранения импульса ионов [A2, A4]. Рассмотрены две геометрии реакторов: цилиндрическая камера с плоской индукционной катушкой и двухкамерный реактор "вниз по потоку".

Показано, что вклад инерционных членов в уравнение движения ионов становится существенным при давлениях ниже 50–100 мТорр. В этом диапазоне использование диффузионно-дрейфового приближения приводит к заметным отклонениям в расчетах плазменных характеристик по сравнению с решением

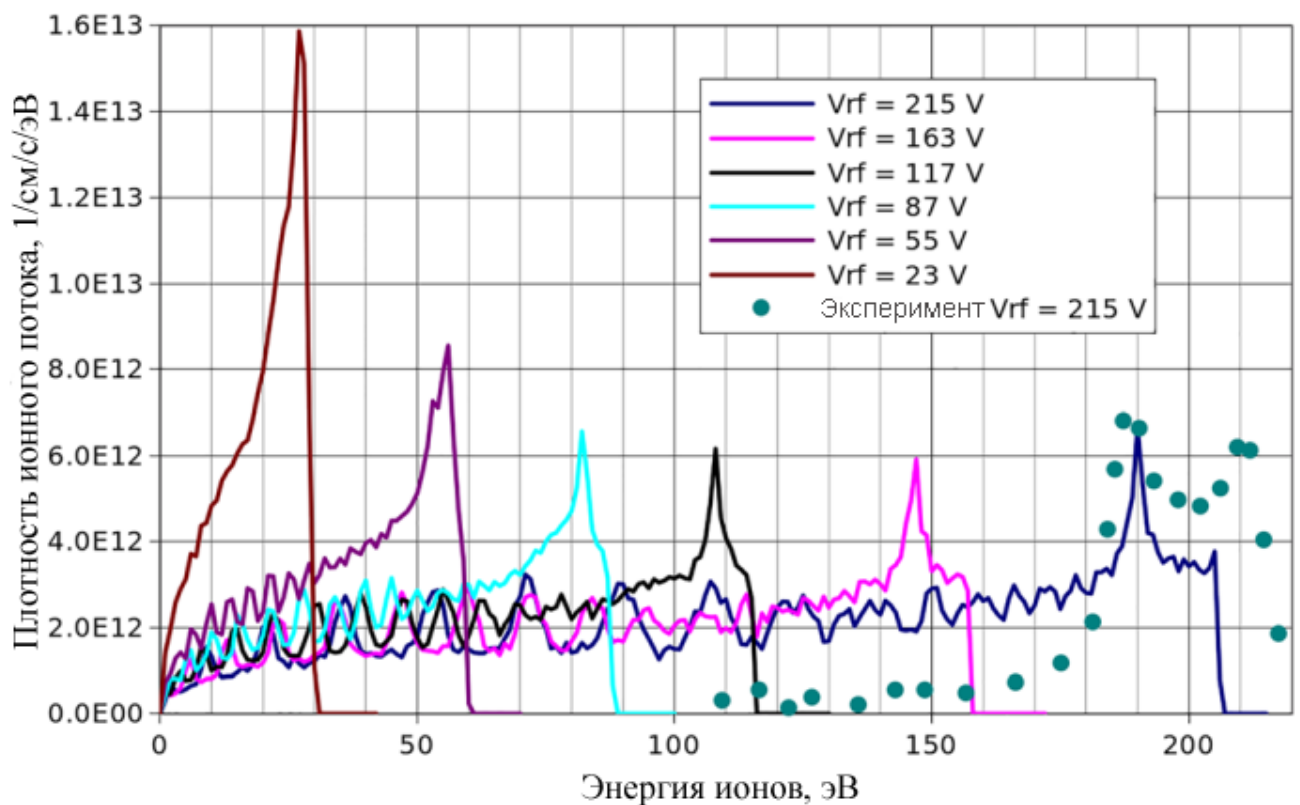


Рисунок 2 – Функция распределения ионов по энергиям на нижнем электроде при различных ВЧ напряжениях

полного уравнения сохранения импульса.

Для цилиндрической геометрии при давлении 10 мТорр и мощности 500 Вт установлено, что учет инерции ионов приводит к росту концентрации плазмы вследствие уменьшения скорости ухода ионов на стенки. Относительное отличие плотности плазмы достигает около 22% в центре разряда и до 60% вблизи стенок (рисунок 3а). При этом температура электронов незначительно уменьшается.

Для двухкамерной геометрии показано, что влияние инерции носит более сложный характер. В верхней камере под индуктором плотность плазмы возрастает, тогда как в нижней камере уменьшается из-за замедленного переноса ионов между камерами. При давлении 10 мТорр отличие между двумя моделями превышает 10% в верхней камере и достигает 45% в нижней (рисунок 3б). При давлении 100 мТорр различия становятся несущественными.

В разделе 2.2 исследовано влияние выбора модели подвижности ионов на результаты гидродинамического расчета. Для разряда в аргоне рассмотрены три подхода: использование экспериментальной зависимости $\mu_{i,N}(E/N)$, расчет через коэффициент диффузии и соотношение Эйнштейна, а также приближение Dalgarno [5].

Показано, что рассчитанные значения подвижности ионов существенно различаются по величине и пространственному профилю, что приводит к значительным различиям в распределениях концентрации электронов и температуры электронов.

Установлено, что уменьшение подвижности ионов приводит к росту плот-

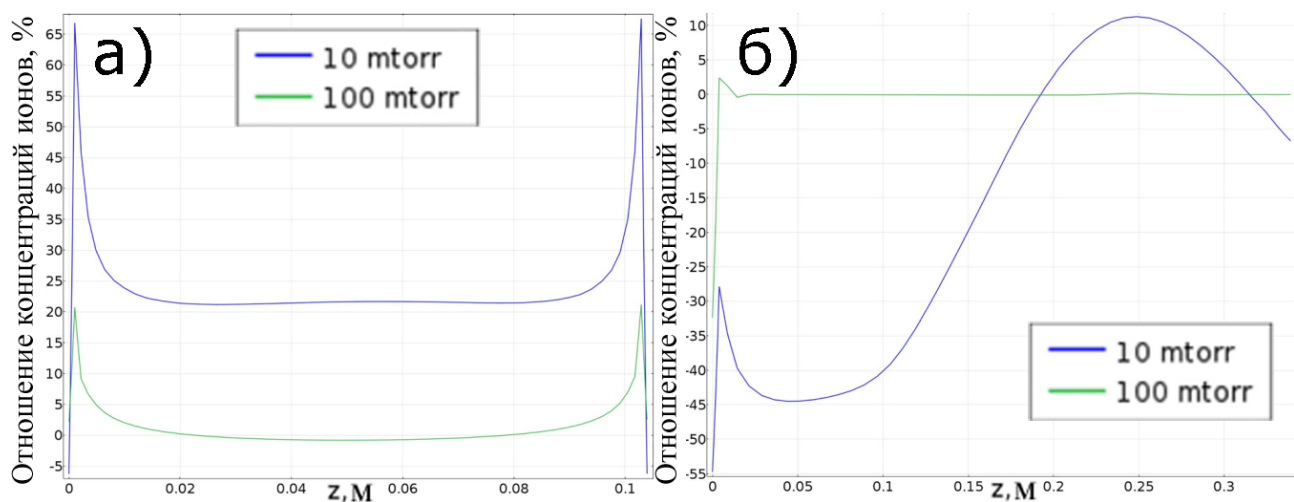


Рисунок 3 – Относительная разность концентрации ионов на оси симметрии для двух значений давления 10 и 100 мТорр, а) цилиндрическая и б) двухкамерная геометрии

ности плазмы за счет снижения потерь заряженных частиц на стенках. Для рассмотренного режима различие в максимальной концентрации электронов между разными способами задания подвижности достигает кратных величин (рисунок 4).

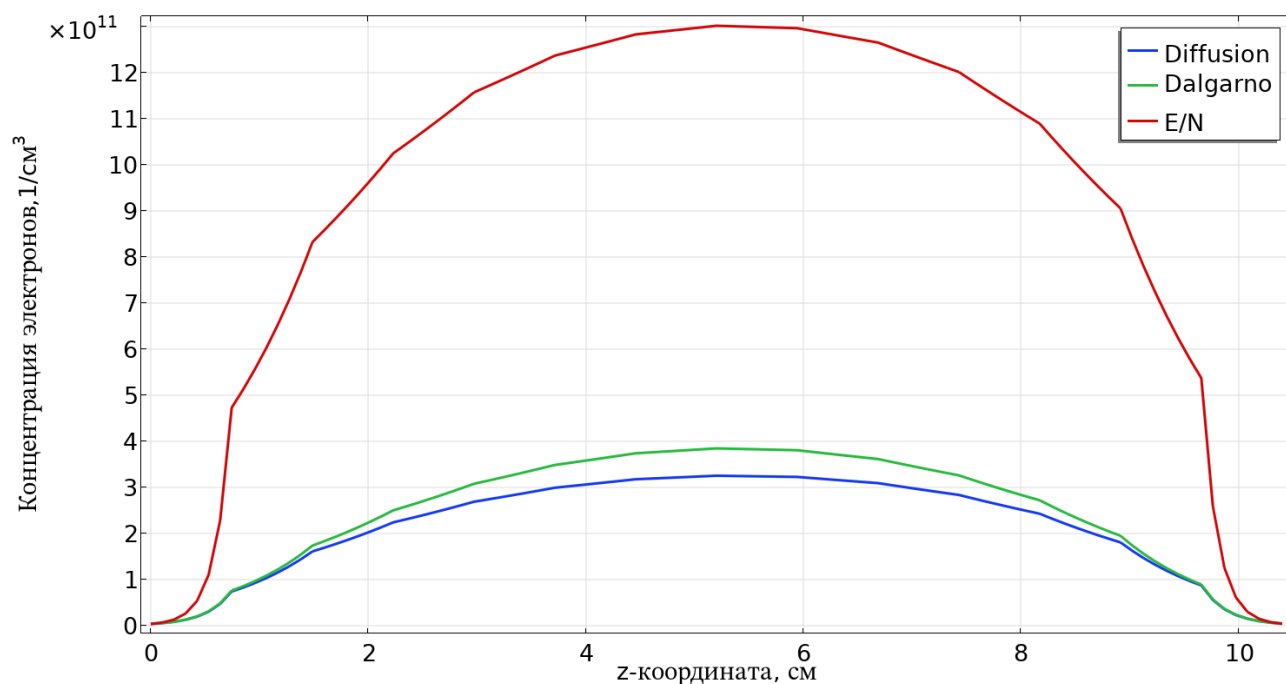


Рисунок 4 – Рассчитанные концентрации электронов вдоль оси z для трех случаев задания подвижности ионов

Полученные результаты показывают, что способ задания подвижности ионов является одним из ключевых факторов, определяющих точность гидродинамического моделирования, особенно для молекулярных газов и смесей, где экспериментальные данные по ионной подвижности ограничены или отсутствуют.

В главе показано, что при давлениях ниже 50–100 мТорр учет инерции ионов желателен для корректного описания индукционных разрядов, поскольку использование диффузионно-дрейфового приближения может приводить к отклонениям расчетных параметров плазмы до десятков процентов. Также установлено, что выбор модели подвижности ионов способен изменять рассчитанные концентрации заряженных частиц в разы, что требует аккуратного выбора транспортных коэффициентов при численном моделировании плазменных реакторов.

Глава 3: Индукционные разряды в Cl_2 и O_2 содержащих смесях посвящена моделированию индукционных разрядов в молекулярных газах Cl_2 , O_2 и их смесях с аргоном; представлены результаты самосогласованных расчетов характеристик плазмы, включая результаты с учетом полной схемы колебательной кинетики молекул кислорода, а также анализ особенностей и характеристик разряда в тройной смеси $\text{O}_2/\text{Cl}_2/\text{Ar}$. Кинетические схемы электронных и химических реакций были последовательно верифицированы на литературных экспериментальных данных и использованы далее для моделирования плазмы в установке для травления рутения.

В разделе 3.1 проведена верификация модели для чистого O_2 на экспериментальных данных из работы [6]. Получено хорошее согласие с экспериментом по температуре газа, концентрации электронов (рис. 5 (а)), температуре электронов и степени диссоциации молекулярного кислорода. Показано, что определяющее влияние на концентрацию атомарного кислорода оказывает коэффициент рекомбинации атомов О на поверхности стенок. Для смеси Ar/O_2 выполнено сравнение с экспериментальными данными по ионному потоку [7,8] (рис. 5 (б)) и концентрации атомов кислорода [7]. Показано хорошее количественное согласие модели с измерениями в диапазоне давлений 10–50 мТорр.

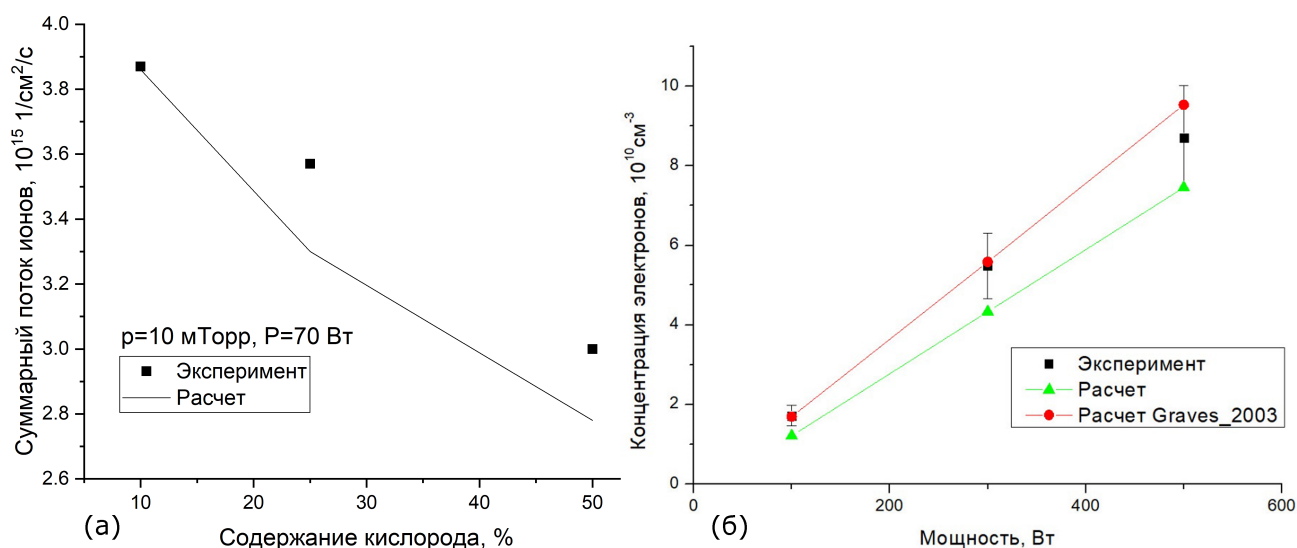


Рисунок 5 – Концентрация электронов в зависимости от мощности при давлении 50 мТорр 100% O_2 (а), ионный поток на стенку камеры в зависимости от состава смеси в сравнении с экспериментом (б)

В разделе 3.2 кинетическая схема для O_2 была расширена включением

34 колебательных уровней молекулы кислорода и реакций VV/VT-обмена (около 2000 реакций суммарно) [A9]. Показано, что учет полной колебательной кинетики практически не изменяет основные плазменные параметры (отличие концентрации электронов не превышает 10%), однако является необходимым для корректного расчета колебательной функции распределения (КФР). На рисунке 6 показано хорошее согласие расчетной КФР с экспериментом.

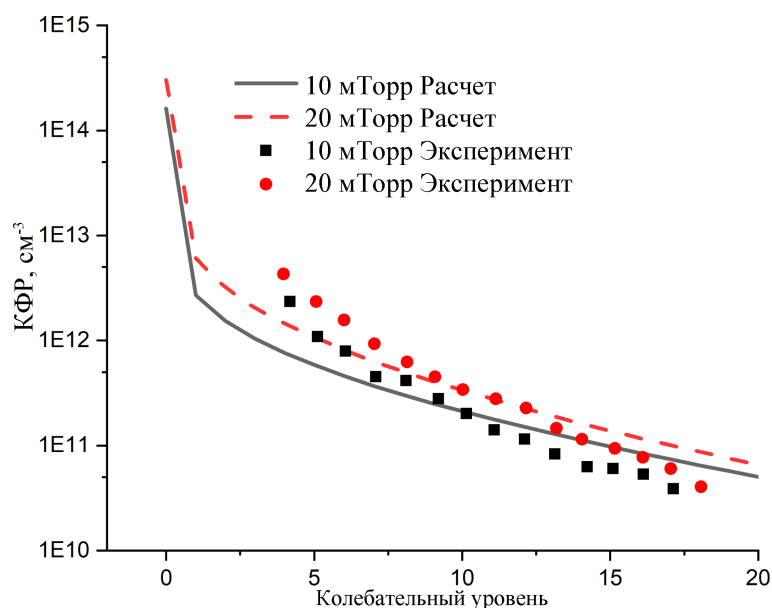


Рисунок 6 – Колебательная функция распределения для двух давлений. Эксперимент и расчет

В разделе 3.3 для разряда в хлоре проведена верификация модели [A8] по экспериментальным данным реактора GEC [9]. Получено качественное согласие по концентрациям электронов и отрицательных ионов в диапазоне давлений 15–50 мТорр и мощностей 167–330 Вт (рис. 7а).

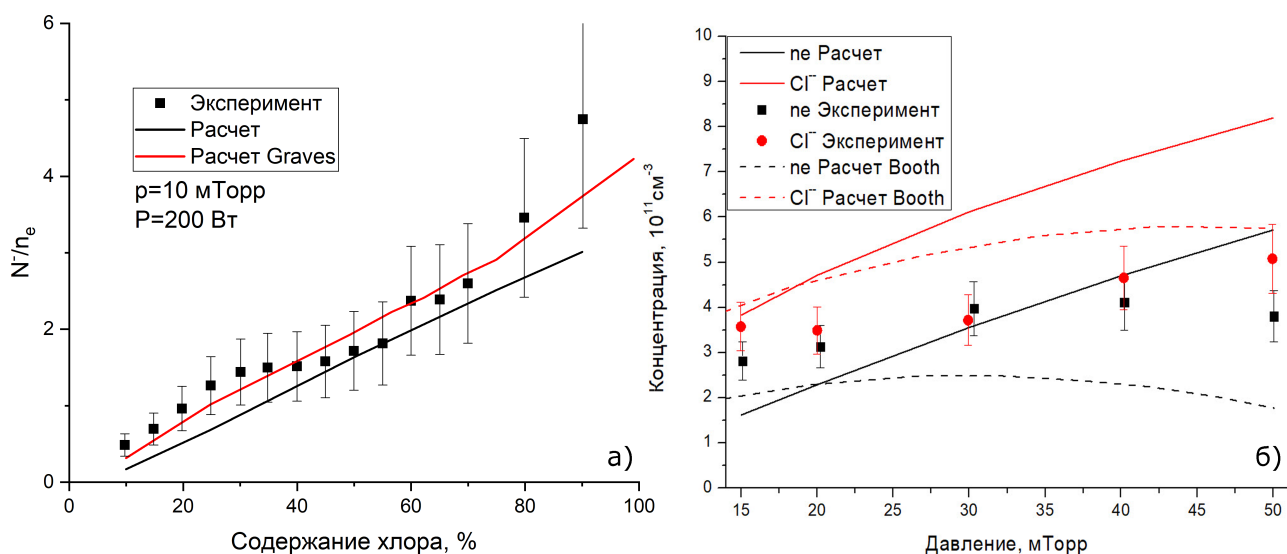


Рисунок 7 – Концентрация электронов и отрицательных ионов в зависимости от давления а), электроотрицательность в зависимости от состава смеси Ar/Cl_2 б)

Показано, что вследствие высокой степени диссоциации Cl_2 необходимо учитывать изменение электронной подвижности при росте доли атомарного хлора. Для смеси Ar/Cl_2 воспроизведены экспериментальные зависимости электроотрицательности (рис. 7б) и концентрации электронов от состава смеси.

В разделе 3.4 на основе ранее верифицированных кинетических схем построена модель плазмы в тройной смеси $\text{Ar}/\text{O}_2/\text{Cl}_2$, применительно к реактору травления рутения [А6]. В список реакций дополнительно добавлены реакции с участием радикальной молекулы ClO и ее иона ClO^+ . Получено хорошее согласие с экспериментальными данными по концентрации ионов (рис. 8а) и концентрациям нейтральных компонентов (рис. 8б).

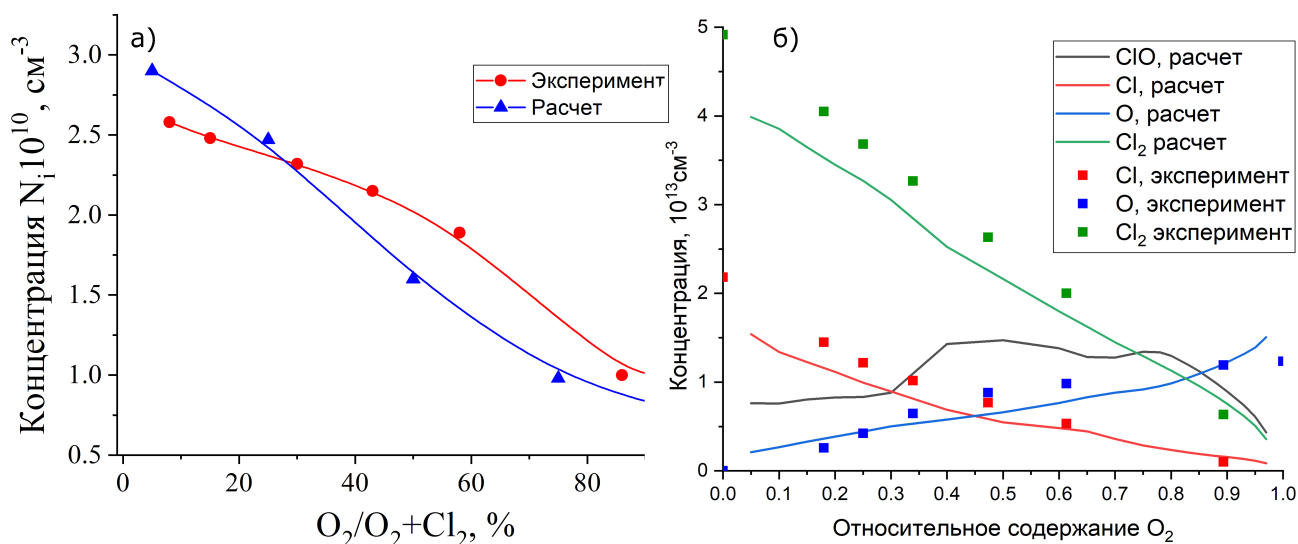


Рисунок 8 – Зависимость концентрации ионов а) и нейтральных компонент б) от добавки кислорода в плазму 50% $\text{Ar}/\text{O}_2/\text{Cl}_2$

Установлено, что увеличение доли кислорода в смеси 50% $\text{Ar}/\text{Cl}_2/\text{O}_2$ приводит к смене доминирующего радикала от Cl к O и перестройке ионного состава потока на поверхность при доле O_2 порядка 60%. Максимальная скорость травления рутения достигается в области перехода между хлорсодержащим и кислородсодержащим режимами разряда, когда одновременно реализуются значительные потоки ионов, атомов Cl и O .

Таким образом, в Главе 3 показано, что разработанная модель адекватно описывает плазменные характеристики в смесях O_2 , Cl_2 и Ar с учетом состава смеси, давления и мощности. Модель была успешно применена для описания ионного и нейтрального состава в плазме для травления рутения, что позволяет делать дальнейшие выводы о механизмах, происходящих на поверхности в данном технологическом процессе.

В Главе 4: Индукционные разряды во фторуглеродных газах рассмотрены процессы в плазме индукционных разрядов во фторуглеродных газах C_4F_8 и C_3F_8 и их смесях с аргоном; приведены результаты построения и валидации плазмохимических схем реакций для этих газов, а также набора сечений для C_3F_8 , и представлены результаты численного моделирования разрядов в указанных газах.

В разделе 4.1 для октафторциклобутана C_4F_8 был сформирован и протестирован набор электронных и химических реакций для моделирования индукционного разряда. Показано хорошее согласие расчетов с экспериментальными данными [10–13] по концентрациям электронов и отрицательных ионов в диапазоне технологически важных параметров.

При моделировании смеси Ar/C_4F_8 установлено, что при малой мощности реализуется режим разряда «вниз по потоку», когда максимум плотности плазмы локализован в верхней части камеры [A7]. При увеличении мощности разряд переходит к более равномерному горению во всем объеме реактора, а максимум плотности плазмы смещается в область обработки материала. Это сопровождается ростом концентрации электронов у подложки (рисунок 9). Следуя технологическим обозначениям [14], эти два режима обозначаются Рецепт 1 и Рецепт 2 соответственно.

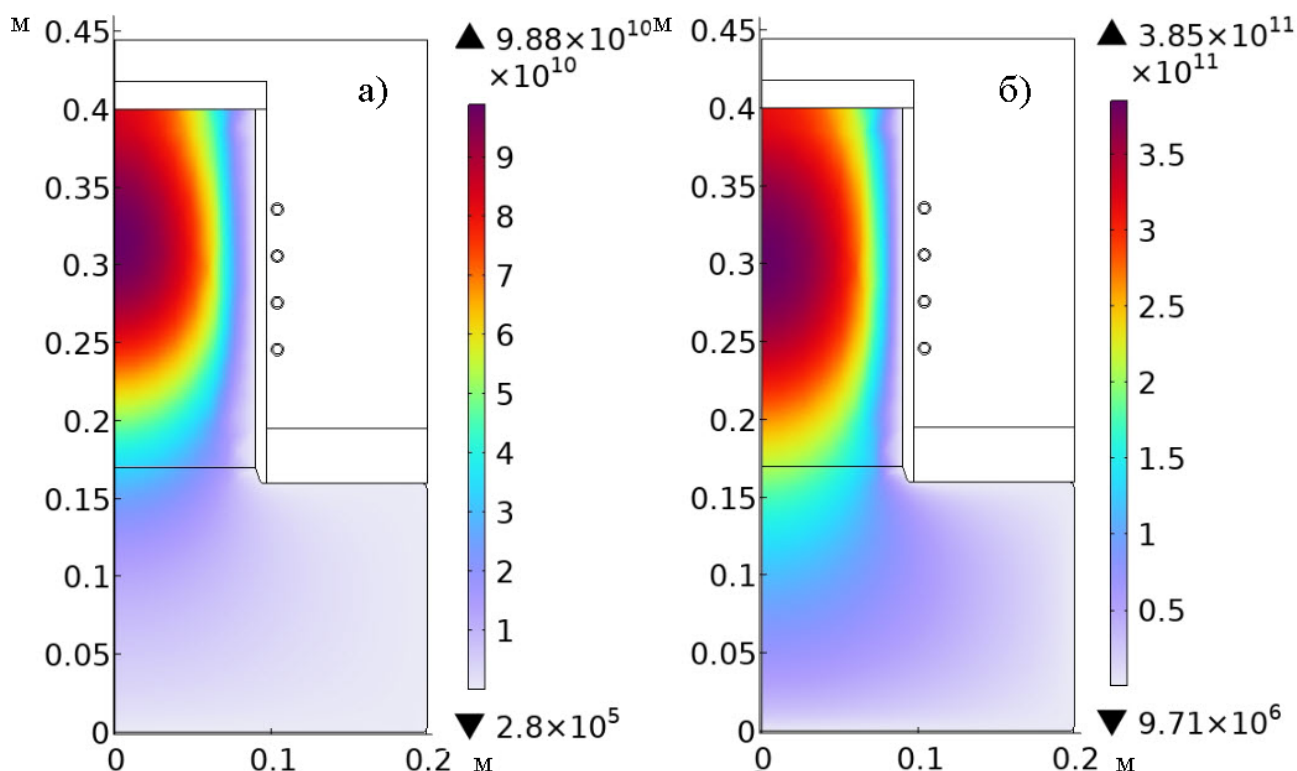


Рисунок 9 – Распределение концентрации электронов в индукционном разряде Ar/C_4F_8 на этапе осаждения фторуглеродной пленки в рецепте 1 (а) и в рецепте 2 (б)

Рост мощности также увеличивает степень диссоциации исходного газа: уменьшается доля тяжелых компонент C_2F_4 , $C_3F_5^+$, а концентрации легких радикалов CF_2 , CF_x , F и легких ионов CF^+ , CF_2^+ возрастают (рисунок 10).

В разделе 4.2 для октафторпропана C_3F_8 , для которого в литературе отсутствовали готовые кинетические схемы, впервые разработан набор электронных и химических реакций с учетом самосогласованного набора электронных сечений столкновения [A5]. В разделе 4.3 была проведена проверка на экспериментальные данные [15,16] с помощью одномерной модели емкостного разряда (данные для индукционных разрядов отсутствуют в литературе), которая пока-

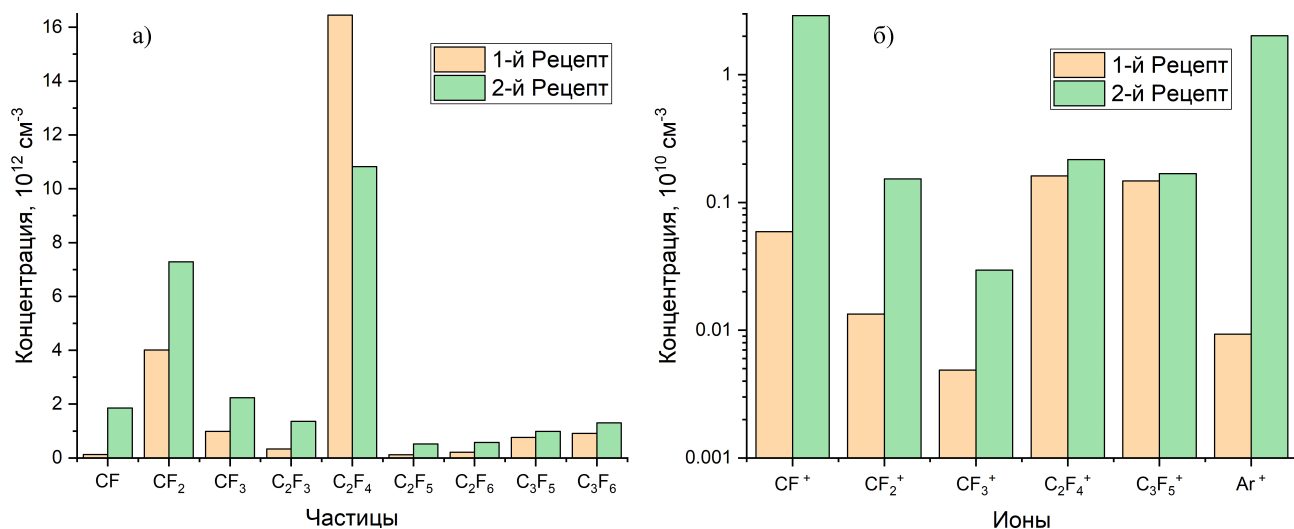


Рисунок 10 – Нейтральный (а) и ионный (б) состав плазмы Ar/C₄F₈ на этапе осаждения фторуглеродной пленки

зала адекватное описание параметров плазмы [A5].

Для емкостного разряда установлено, что он является сильно электроотрицательным при сравнительно низкой степени диссоциации газа. Для индукционного разряда получена качественно иная картина: исходная молекула активно диссоциирует, а плазма формируется уже в смеси радикалов. При этом уменьшается электроотрицательность, подобно разряду в C₄F₈ возрастает степень диссоциации газа, снижается доля тяжелых радикалов и ионов, а основными компонентами становятся легкие радикалы CF₂, CF₃ и ионы CF₃⁺, CF₂⁺ (рисунки 11, 12).

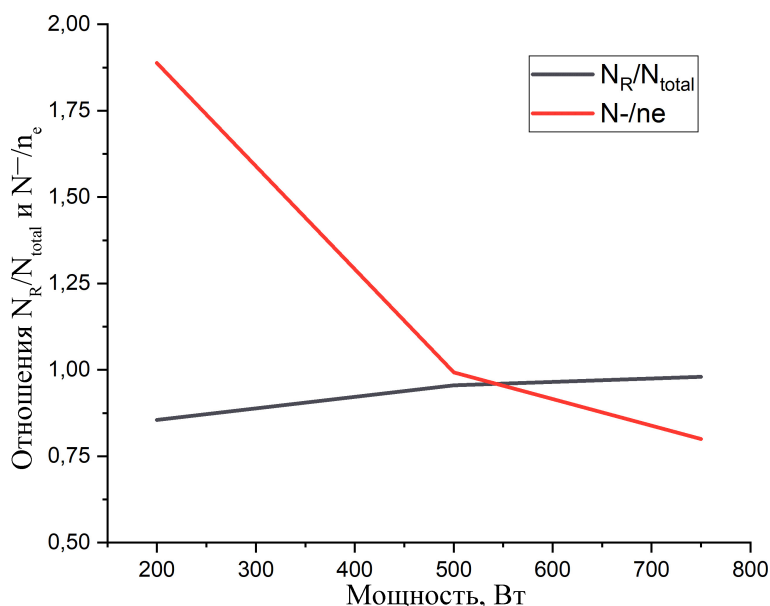


Рисунок 11 – Степень диссоциации и электроотрицательность как функция мощности при давлении 10 мТорр

Таким образом, для обоих фторуглеродных газов — C₄F₈ и C₃F₈ — увеличение вкладываемой в индукционный разряд мощности приводит к росту

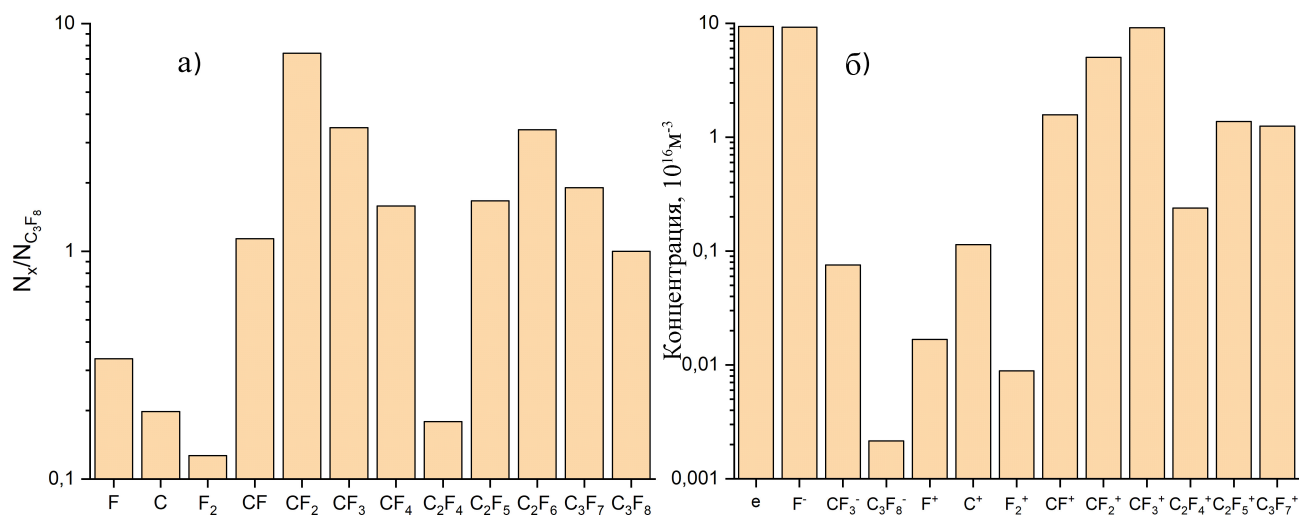


Рисунок 12 – Диаграмма концентраций радикалов (а) и ионов (б) в индукционном разряде C_3F_8

степени диссоциации исходного газа, увеличению концентрации легких фторсодержащих радикалов и уменьшением доли тяжелых нейтральных и ионных компонент, что определяет полимеризующие свойства плазмы. В двухкамерной геометрии в таких газах при увеличении мощности индуктора также происходит смена режима горения разряда в сторону более равномерного горения по всему объему.

Заключение

В диссертационной работе решена актуальная задача разработки самосогласованной численной модели индукционного разряда в реакторах микроэлектроники, обеспечивающей комплексное описание электромагнитных, кинетических, газодинамических и плазмохимических процессов в широком диапазоне параметров и составов газовых смесей. Результаты направлены на углубление понимания механизмов формирования индукционно-связанной плазмы и оптимизацию процессов плазменной обработки материалов.

Отличительной особенностью модели является учет пространственной неоднородности температуры и скорости газа, особенно важный для двухкамерных промышленных реакторов. Дополнительно реализован расчет функции распределения ионов по энергиям методом Монте-Карло в самосогласованном электрическом поле, что позволило определять энергетические спектры ионов, падающих на обрабатываемую поверхность.

Для двухкамерного реактора в аргоне выявлены значительные градиенты плотности плазмы, температуры электронов, потенциала и температуры газа между зонами генерации плазмы и обработки. Показано влияние давления, расхода и нагрева газа на характеристики плазмы и улучшение согласия расчетов с экспериментом при учете газодинамики. Исследовано влияние ВЧ-смещения на нижнем электроде на плотность плазмы и ионные потоки. Установлено, что при давлениях ниже 10 мТорр инерционные эффекты существенно влияют

на распределения частиц, определены области применимости диффузионно-дрейфового приближения и показано значительное влияние неопределенности транспортных коэффициентов ионов на результаты моделирования.

Проведено самосогласованное моделирование индукционных разрядов в электроотрицательных газах Cl_2 , O_2 , их смесях с Ar и смеси $\text{O}_2/\text{Cl}_2/\text{Ar}$ с учетом основных плазмохимических процессов. Для кислородной плазмы реализована схема колебательной кинетики O_2 . Показано, что электроотрицательность, степень диссоциации и состав активных частиц определяются балансом объемных и поверхностных процессов. Для смеси $\text{O}_2/\text{Cl}_2/\text{Ar}$ определены основные механизмы формирования концентраций атомов, положительных и отрицательных ионов.

Выполнено моделирование разрядов во фторуглеродных газах C_4F_8 и C_3F_8 и их смесях с аргоном. Разработаны и верифицированы плазмохимические схемы реакций. Для C_3F_8 впервые реализован самосогласованный расчет характеристик емкостной и индукционной плазмы. Показано влияние давления и мощности на состав плазмы, электроотрицательность и соотношение травящих и полимерообразующих компонентов.

Разработанная модель позволяет рассчитывать пространственные распределения концентраций и температур частиц, электроотрицательности, степени диссоциации, энергетических спектров ионов, а также потоков заряженных и активных нейтральных частиц с учетом конструкции реактора и газодинамических эффектов. Практическая значимость работы состоит в возможности применения модели для проектирования и оптимизации ICP-реакторов, выбора режимов травления и осаждения пленок, интерпретации диагностических данных и оптимизации технологических циклов атомно-слоевого травления. Модель использовалась при выполнении проектов РНФ и РФФИ, посвященных травлению рутения, SiO_2 и Si_3N_4 . Перспективы дальнейших исследований связаны с учетом нелокальной электронной кинетики, уточнением транспортных коэффициентов и сопряжением плазменной модели с моделями роста и травления наноструктур.

Список публикаций автора

Результаты диссертации отражены в следующих публикациях в научных журналах, рекомендованных для защиты в диссертационных советах МГУ по специальности и отрасли наук:

[A1]. Кропоткин А. Н., Волошин Д. Г. Моделирование индукционного разряда в аргоне с учетом протока и неоднородности температуры газа // Физика плазмы. — 2019. — Т. 45, № 8. — С. 755–768. ЕДН: FUQQJS

Импакт-фактор 0.876 (РИНЦ). Объем 0.88 п.л., из них 0.7 п.л. вклад автора.

[A2]. Kropotkin A. N., Voloshin D. G. ICP argon discharge simulation: The role of ion inertia and additional RF bias // Physics of Plasmas. — 2020. — Vol. 27,

№ 5. — Р. 053507. ЕДН: OGKCCT

Импакт-фактор 2.2 (JIF). Объем 0.625 п.л., из них 0.5 п.л. вклад автора.

[A3]. Voloshin D. G., Rakhimova T. V., Kropotkin A. N., Amirov I. I., Izyumov M. O., Lopaev D. V., Zotovich A. I., Zyryanov S. M. Plasma density determination from ion current to cylindrical Langmuir probe with validation on hairpin probe measurements // *Plasma Sources Science and Technology*. — 2023. — Vol. 32, № 4. — Р. 044001. ЕДН: ZMEFMH

Импакт-фактор 3.3 (JIF). Объем 0.75 п.л., из них 0.05 п.л. вклад автора.

[A4]. Lopaev D. V., Mankelevich Y. A., Kropotkin A. N., Voloshin D. G., Rakhimova T. V. H⁻ production in hydrogen DC glow discharge // *Plasma Sources Science and Technology*. — 2024. — Vol. 33, № 8. — Р. 085002. ЕДН: QRMBOS

Импакт-фактор 3.3 (JIF). Объем 1 п.л., из них 0.1 п.л. вклад автора.

[A5]. Kropotkin A. N., Voloshin D. G. Construction and validation of C3F8 electron impact and heavy particle reaction scheme for modeling plasma discharges // *Physics of Plasmas*. — 2024. — Vol. 31, № 3. — Р. 033504. ЕДН: JURYLP

Импакт-фактор 2.2 (JIF). Объем 0.81 п.л., из них 0.65 п.л. вклад автора.

[A6]. Амиров И. И., Изюмов М. О., Лопачев Д. В., Рахимова Т. В., Кропоткин А. Н., Волошин Д. Г., Палов А. П. Наноструктурированное травление рутения в трехкомпонентной плазме Cl₂/O₂/Ar // *Микроэлектроника*. — 2025. — Т. 54, № 3. — С. 251–260. ЕДН: PXPXQE

Импакт-фактор 0.824 (РИНЦ). Объем 0.63 п.л., из них 0.15 п.л. вклад автора.

[A7]. Proshina O. V., Kropotkin A. N., Voloshin D. G., Rakhimova T. V., Rakhimov A. T. Fluorocarbon (C₄F₈) assisted plasma-enhanced atomic layer etching of SiO₂ with high repeatability of cycles in industrial ICP reactor. II. Simulation // *Journal of Vacuum Science and Technology A*. — 2026. — Vol. 44, № 2. — Р. 023014. ЕДН: EQFPLZ

Импакт-фактор 2.1 (JIF). Объем 1.1 п.л., из них 0.3 п.л. вклад автора.

А также в других научных изданиях:

[A8]. Амиров И. И., Куприянов А. Н., Наумов В. В., Изюмов М. О., Волошин Д. Г., Кропоткин А. Н., Лопачев Д. В., Рахимова Т. В. Основные аспекты формирования металлизации в субдесятинанометровой технологии изготовления интегральных схем // *Вестник Российского фонда фундаментальных исследований*. — 2023. — Т. 118. — С. 63–77. ЕДН: FYELBA

Объем 0.88 п.л., из них 0.1 п.л. вклад автора.

[A9]. Kropotkin A. N., Chukalovskiy A. A., Kurnosov A. K., Rakhimova T. V., Palov A. P. Numerical model of a gaseous inductive discharge in oxygen, taking into account the complete scheme of the vibrational kinetics of O₂ molecules // *Materials. Technologies. Design*. — 2023. — Vol. 5, № 2(12). — Р. 177–184. ЕДН: MIFKFL

Импакт-фактор 0.222 (РИНЦ). Объем 0.57 п.л., из них 0.4 п.л. вклад автора.

Список литературы

1. Godyak V. Electron Kinetic and Electrodynamic Characteristics of ICP in Stochastic Heating Regime // Electron kinetics and applications of glow discharges / ed. by Kortshagen U., Tsendin L.D. Boston, MA: Springer US, 1998. P. 241–255.
2. Brezmes A.O., Breitskopf C. Fast and reliable simulations of argon inductively coupled plasma using COMSOL // Vacuum. 2015. Vol. 116. P. 65–72.
3. Miller P.A. et al. An Inductively Coupled Plasma Source for the Gaseous Electronics Conference RF Reference Cell // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. United States, 1995. Vol. 100, № 4. P. 427–439.
4. Lopaev D.V. et al. Silicon dioxide and low-k material sputtering in dual frequency inductive discharge by argon ions with energies from 16 to 200 eV // Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing, 2017. Vol. 51, № 2. P. 02LT02.
5. Arthurs A.M., Dalgarno A., Bates D.R. The mobilities of ions in molecular gases // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. 1960. Vol. 256, № 1287. P. 552–558.
6. Kiehlbauch M.W., Graves D.B. Inductively coupled plasmas in oxygen: Modeling and experiment // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2003. Vol. 21, № 3. P. 660–670.
7. Hsu C.-C. et al. Comparison of model and experiment for Ar, Ar/O₂ and Ar/O₂/Cl₂ inductively coupled plasmas // Journal of Physics D: Applied Physics. IOP Publishing, 2006. Vol. 39, № 15. P. 3272–3284.
8. Lee J., Graves D.B. The effect of VUV radiation from Ar/O₂ plasmas on low-k SiOCH films // Journal of Physics D: Applied Physics. 2011. Vol. 44, № 32. P. 325203.
9. Hebner G.A. Metastable chlorine ion temperature and drift velocity in an inductively coupled plasma // Journal of Applied Physics. 1996. Vol. 80, № 6. P. 3215–3220.
10. Hebner G.A., Abraham I.C. Characterization of electron and negative ion densities in fluorocarbon containing inductively driven plasmas // Journal of Applied Physics. 2001. Vol. 90, № 10. P. 4929–4937.
11. Font G.I., Morgan W.L., Mennenga G. Cross-section set and chemistry model for the simulation of c-C₄F₈ plasma discharges // Journal of Applied Physics. 2002. Vol. 91, № 6. P. 3530–3538.
12. Rauf S., Ventzek P.L.G. Model for an inductively coupled Ar/c-C₄F₈ plasma discharge // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2002. Vol. 20, № 1. P. 14–23.
13. Sant S.P. et al. Chemistry in long residence time fluorocarbon plasmas // Journal of vacuum science & technology a. 2009. Vol. 27, № 2. P. 193–208.

14. Shibano D. et al. Fluorocarbon (C₄F₈) assisted plasma-enhanced atomic layer etching (PEALE) of SiO₂ with high repeatability of cycles in industrial ICP reactor. Part I: Experiment // Journal of Vacuum Science & Technology A. 2006. Vol. 24, № 2. P. 022607.
15. Haverlag M. et al. Measurements of negative ion densities in 13.56MHz rf plasmas of CF₄, C₂F₆, CHF₃, and C₃F₈ using microwave resonance and the photodetachment effect // Journal of Applied Physics. 1991. Vol. 70, № 7. P. 3472–3480.
16. Haverlag M. Plasma chemistry of fluorocarbon RF discharges used for dry etching: Phd Thesis 1 (Research TU/e / Graduation TU/e). Applied Physics and Science Education; Technische Universiteit Eindhoven, 1991.