

На правах рукописи

Горобчук

**Горобчук Алексей Геннадьевич**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПЛАЗМОХИМИЧЕСКИХ ТЕХНОЛОГИЙ  
МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ**

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы  
и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Новосибирск – 2016

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук (ИВТ СО РАН), г. Новосибирск.

Научный консультант: доктор физико-математических наук,  
профессор **Григорьев Юрий Николаевич**

Официальные  
оппоненты:

**Воеводин Анатолий Федорович**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, ИГиЛ СО РАН, г. Новосибирск,  
главный научный сотрудник

**Князева Анна Георгиевна**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, Национальный исследовательский  
Томский политехнический университет, г. Томск,  
профессор кафедры Физики высоких  
технологий в машиностроении

**Чекмарев Сергей Федорович**,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, ИТ СО РАН, г. Новосибирск,  
главный научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», г. Красноярск.

Защита состоится «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2017 г. в \_\_\_\_\_ часов на заседании диссертационного совета ДМ 003.046.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук по адресу: 630090, г. Новосибирск, пр. Академика Лаврентьева, 6, конференц-зал ИВТ СО РАН.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительных технологий Сибирского отделения Российской академии наук:  
<http://www.ict.nsc.ru/ru/structure/discouncil/gorobchuk-ag>

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
кандидат физико-математических наук, доцент



Лебедев А.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность работы.** Процессы плазмохимического травления (ПХТ) получили широкое распространение в производстве изделий микроэлектроники [1, 2]. Низкотемпературная плазма газового разряда используется для финишной очистки поверхности полупроводниковых пластин, планаризации их поверхности, снятия резиста, изготовления тонких неорганических масок, формировании транзисторных элементов интегральных схем и других операций. Поверхностные слои материалов обрабатываются в плазмохимических реакторах травления (ПХР) [3, 4], где в зоне высокочастотного разряда в результате диссоциации молекул исходной газовой смеси образуются химически активные частицы и радикалы, осуществляющие процесс травления. В зависимости от обрабатываемого материала в качестве рабочих газов используются различные галогеносодержащие газы  $CF_4$ ,  $SF_6$ ,  $C_3F_8$ ,  $HBr$ ,  $CBrF_3$ ,  $CClF_3$  или их смеси с  $O_2$ ,  $H_2$  и др., многие из которых характеризуются как токсичные, канцерогенные, коррозионные, горючие, окисляющие и др. Однако замены им в операциях плазмохимического травления пока не найдено. Для реализации различных механизмов плазменного травления применяются специальные схемы ПХР, имеющие определенную технологическую направленность [3, 4]. Для получения качественного изделия и обеспечения высокого их выхода в многооперационном технологическом процессе равномерность обработки полупроводниковых пластин на любых операциях должна быть не хуже 98.5 – 99% [1]. В настоящее время при выполнении операций травления плазмохимические процессы не имеют альтернатив. В этой связи задачи исследования и оптимизации процессов ПХТ важны и актуальны для развития технологий микроэлектроники. Однако большое число параметров и сложная взаимосвязь факторов сильно затрудняют изучение сложного комплекса физико-химических процессов в ПХР. Плазмохимическое травление характеризуется медленными течениями газов с малыми числами Рейнольдса, небольшими градиентами температуры, слабыми электрическими токами, многочисленными газофазными и гетерогенными химическими реакциями и т.д. Выделить среди этих факторов основные с помощью экспериментальных методов весьма затруднительно. Широкие возможности для исследования и оптимизации сложных процессов ПХТ предоставляет математическое моделирование. Для получения адекватных результатов здесь необходимы соответствующие физико-математические модели, отражающие наиболее существенные стороны процесса плазмохимического травления, разработке и исследованию которых посвящена диссертация.

**Цель диссертационной работы** состоит в разработке математических моделей плазмохимических технологий микроэлектроники, методов численного моделирования и поиске новых способов оптимизации и управления технологическими процессами плазмохимического травления. Для достижения поставленной цели разработана обобщенная численная модель технологических процессов плазмохимического травления, используемых в производстве изделий микроэлектроники, отражающая наиболее существенные механизмы этих процессов. С помощью разработанных численных алгоритмов решен ряд задач по исследованию и оптимизации процессов травления образцов в различных газовых смесях.

**Основные результаты и их научная новизна** состоят в следующем.

1. Разработана обобщенная физико-математическая модель для описания технологических процессов плазмохимического травления в двумерной постановке. Модель включает новые, ранее не рассматривавшиеся при моделировании реакторных процессов элементы, повышающие прогностические возможности модели и раскрывающие основные физические механизмы ПХТ, в частности, сложный теплообмен с учетом ИК-излучения многоатомных молекул, эффекты разреженности, термодиффузии, адекватную многокомпонентную кинетику газофазных реакций, расширенную кинетику гетерогенных реакций. Для расчета теплового излучения и поглощения в характерных для ПХТ газовых смесях предложена оригинальная методика на основе экспоненциальной модели полосы, дающая хорошее совпадение с экспериментальными данными. Прямые расчеты аксиально-симметричного ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении позволили учесть особенности электрон-молекулярных взаимодействий низкотемпературной плазме в процессе ПХТ. Модель полностью соответствует мировым тенденциям развития математического моделирования плазмохимических технологий в микроэлектронике.

2. Предложены эффективные численные алгоритмы решения уравнений многокомпонентной гидродинамики реагирующей смеси газов, моделирования ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении, а также параллельные алгоритмы ускорения расчетов многокомпонентной химической кинетики и аксиально-симметричного разряда. Новые дискретные краевые условия для завихренности на непроницаемых поверхностях реакционной камеры позволили проводить исследования в режиме пониженного давления с учетом эффектов скольжения. На основе метода экспоненциальной подгонки впервые предложена безусловно монотонная разностная схема для интегрирования уравнений ВЧ-разряда в двумерной постановке.

3. Исследованы механизмы травления кремниевых образцов в плазме тетрафторметана в распространенных схемах ПХР — *pedestal* и *stadium* в изотермическом приближении и выполнена оптимизация их технологических режимов работы. Впервые показана возможность оптимизации равномерности травления образцов с помощью кольцевых протекторов, и даны рекомендации относительно выбора конструкционных материалов, из которых изготовлены элементы конструкции реактора.

4. Проанализировано влияние неизотермичности и разреженности рабочей среды на скорость и качество травления образцов в планарном ПХР *stadium*. Впервые исследованы особенности теплообмена с учетом ранее не рассматривавшихся эффектов разреженности, теплового излучения многоатомных рабочих газов и термодиффузии.

5. В рамках единой численной модели впервые выполнено сравнение наиболее распространенных моделей химических кинетик травления кремния в тетрафторметане в ПХР радиальной схемы. Исследованы особенности теплообмена в широкоапертурной реакционной камере.

6. Для реактора радиальной схемы выполнена численная оптимизация скорости травления кремния по составу бинарной смеси  $CF_4/O_2$ , и изучена ее чувствительность к влиянию адсорбционных слоев  $CF_2$ ,  $CF_3$ . Впервые показано, что хемосорбция кислорода на кремнии приводит к гистерезису на графике зависимости скорости травления от концентрации фтора. Рассмотрен процесс пассивации кремния ненасыщенными радикалами типа  $CF_x$  при плазмохимическом травлении в  $CF_4/H_2$ . Среди конкурирующих процессов на поверхности кремния в качестве преобладающего выделена адсорбция радикала  $CF_2$ , слой которого при 40% добавке  $H_2$  полностью покрывает поверхность образца, что прекращает процесс травления.

7. Исследовано влияние характеристик ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления кремния в смеси  $CF_4/O_2$ . Рассмотрена эффективность диссоциации исходной газовой смеси  $CF_4/O_2$  в условиях пониженной электронной плотности в ВЧ-разряде. Исследовано влияние структуры ВЧ-разряда, рассчитанное с применением различных подходов, на качество травления кремниевых образцов.

**Достоверность** результатов диссертационной работы основывается на использовании адекватных физико-математических моделей для основных составляющих технологии плазмохимического травления; обеспечена тщательным тестированием реализованных численных алгоритмов с контролем практической точности, в частности, с помощью исследований сходимости на последовательности вложенных сеток и устойчивости численных

решений, практическим исследованием сходимости получаемых численных решений к точным решениям, и т. п.; подтверждается удовлетворительным согласованием результатов с экспериментальными и численными данными аналогичных исследований других авторов.

**Научная и практическая ценность работы** состоит в создании и верификации продвинутой численной модели для описания технологических процессов плазмохимического травления в многокомпонентных газовых смесях, которая может служить для поиска новых способов управления плазменными процессами, оптимизации и совершенствования существующего технологического оборудования, а также создания нового оборудования для субмикронной технологии микроэлектроники. Предложенная численная модель позволяет рассматривать задачи, направленные на совершенствование и освоение более тонких технологических норм производства интегральных схем, переход на кремниевые подложки большего типоразмера, в которых предъявляются повышенные требования к равномерности их обработки. Это позволит существенно увеличить объёмы выпуска продукции и снизить себестоимость ее производства, повысить эффективность использования энергии и сократить выбросы вредных газов в атмосферу. Автором разработаны и экспериментально обоснованы оригинальные экономичные численные методы с применением параллельных вычислительных алгоритмов для решения двухмерных задач многокомпонентной гидродинамики и влияния высокочастотного разряда, рассматриваемого в гидродинамическом приближении, применительно к технологическим процессам плазмохимического травления. Полученные результаты могут быть использованы в качестве рекомендаций по усовершенствованию технологии производства микросхем, для развития численных моделей плазмохимического травления, а также в качестве методической основы для моделирования других задач о течениях многокомпонентных смесей молекулярных газов в физико-химических превращениях. Предложенная модель полностью соответствует современному уровню исследований в области плазменных технологий микроэлектроники, а созданный пакет программ найдет применение при разработке гибких адаптивных технологических процессов.

Исследования, представленные в диссертационной работе, являются составной частью научно-исследовательских работ ИВТ СО РАН. Их выполнение было поддержано грантами Российского фонда фундаментальных исследований в рамках проектов №96-01-01642, №01-01-00827, №03-01-00160, №05-01-00359, №07-01-00315, №08-01-00116, №11-01-00064, №14-

01-00274. Представленные в диссертации результаты также получены в процессе исследований по междисциплинарным интеграционным программам фундаментальных исследований СО РАН №2000-43, №2003-2, №2009-26, №2012-47 и программы Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ РФ №НШ-2314.2003.1, №НШ-9886.2006.9, №НШ-931.2008.9, №НШ-6068.2010.9, №НШ-6293.2012.9, №НШ-5006.2014.9, №НШ-7214.2016.9.

**Представление работы.** Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на XIV, XVI и XVII Международных школах-семинарах по численным методам механики вязкой жидкости (XVI-я и XVII-я в составе научных мероприятий «Вычислительные технологии-98» и «Вычислительные технологии-2000» соответственно, Новосибирск, 1994, 1998, 2000); International conference on the methods of aerophysical research (Novosibirsk, 1996, 2002, 2004, 2007, 2008, 2010, 2014); Международной и Всероссийских (четвертой и шестой) школах-семинарах «Аналитические методы и оптимизация процессов жидкости и газа» (Арзамас-16, 1994; Уфа, 1998; Снежинск, 2002); Международной конференции «Математические модели и численные методы механики сплошных сред» (Новосибирск, 1996); The fifth, sixth and seventh russian-japanese international symposium on computational fluid dynamics (Novosibirsk, 1996; Nagoya, Japan, 1998; Moscow, 2000); Международных конференциях «Сопряженные задачи физической механики и экологии» (Томск, 1994, 1998, 2007); Международной конференции «Всесибирские чтения по математике и механике» (Томск, 1997); Международных конференциях «Математические модели и методы их исследования» (Красноярск, 1997, 1999); 21<sup>st</sup> International conferences on microelectronics (Nis, Yugoslavia, 1997); 8<sup>th</sup> International symposium on computational fluid dynamics (Bremen, Germany, 1999); Международной конференции «Современные проблемы прикладной математики и механики: теория, эксперимент и практика» (Новосибирск, 2001, 2011); Научном семинаре Российско-Германской рабочей группы по вычислительным наукам и высокопроизводительным вычислениям (Новосибирск, 2003); Всероссийской конференции «Проблемы механики сплошных сред и физики взрыва», посвященной 50-летию Института гидродинамики им.М.А. Лаврентьева СО РАН (Новосибирск, 2007); IEEE region 8 International conference on «Computational technologies in electrical and electronics engineering» (Novosibirsk, 2008); Международной научной конференции «Современные проблемы математического моделирования и вычислительных технологий» (Красноярск, 2008); Всероссийской конференции «Математика в приложе-

ниях», приуроченная к 80-летию академика С.К. Годунова (Новосибирск, 2009); Международной конференции «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике», посвященной 110-летию академика М. А. Лаврентьева (Новосибирск, 2010); VII Всероссийской научной конференции «Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики», посвященной 90-летию со дня рождения основателя и первого директора НИИ ПММ ТГУ А.Д. Колмакова (Томск, 2011); V и VI Всероссийских научно-технических конференциях «Проблемы разработки перспективных микро- и наноэлектронных систем» (Подмосковье, 2012, 2014); X International IEEE siberian conference on control and communication (Krasnoyarsk, 2013); Всероссийской конференции по математике и механике, посвященной 135-летию Томского государственного университета и 65-летию механико-математического факультета (Томск, 2013); VII Международном симпозиуме по теоретической и прикладной плазмохимии (Плёт, 2014); Международной конференции «Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики» (Новосибирск, 2014, 2015); The 12th International conference «Gas discharge plasmas and their applications» (Tomsk, 2015); а также на научных семинарах Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН (руководитель член-корреспондент РАН В.В. Пухначев, г. Новосибирск), Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (руководитель академик РАН В.М. Фомин, г. Новосибирск), Института вычислительного моделирования СО РАН (руководители член-корреспондент РАН В.В. Шайдуров, профессор В.К. Андреев, г. Красноярск), Национального исследовательского Томского политехнического университета (руководитель профессор А.Г. Князева, г. Томск), Института теплофизики им. С.С. Кутаталадзе СО РАН (руководитель академик РАН А.К. Ребров, г. Новосибирск), Института вычислительных технологий СО РАН, (руководители академик РАН Ю.И. Шокин, профессор В.М. Ковеня, г. Новосибирск).

**Основные положения, выносимые на защиту.** Работа основывается на оригинальных результатах из следующих разделов специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ по физико-математическим наукам, которые соответствуют трем пунктам паспорта специальности.

Пункт 3 (Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий):

1. Разработан, обоснован и протестирован эффективный конечно-раз-



ностный метод численного моделирования течений многокомпонентных газовых смесей с физико-химическими превращениями в плазмохимических технологиях микроэлектроники в двумерной постановке с применением современных суперкомпьютерных технологий. Предложены новые дискретные краевые условия для завихренности на непроницаемых поверхностях реакционной камеры, позволяющие проводить исследования в режиме пониженного давления с учетом эффектов скольжения.

2. Разработан, обоснован и протестирован эффективный конечно-разностный метод численного моделирования ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении в двумерной постановке с применением современных суперкомпьютерных технологий. На основе метода экспоненциальной подгонки впервые предложена безусловно монотонная разностная схема для интегрирования уравнений ВЧ-разряда в двумерной постановке.

Пункт 4 (Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента):

1. Реализованы эффективные численные методы и алгоритмы в виде комплекса программ для численного моделирования плазмохимических технологий микроэлектроники с возможностью применения в проектно-конструкторских разработках современного технологического оборудования производства микросхем.

2. Создано научно-исследовательское программное обеспечение для моделирования ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении с целью исследования влияния характеристик и структуры разряда на процессы плазмохимического травления.

Пункт 5 (Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента):

1. Получены результаты численного моделирования плазмохимической технологии травления кремния в тетрафторметане на основе бинарной модели кинетики, раскрывающие основные механизмы появления характерной неравномерности травления в распространенных реакторах индивидуального травления. Предложен обоснованный в расчетах способ минимизации неоднородности травления образцов применением протекторов с низкой реакционной способностью.

2. Выполнено исследование распространенных моделей химической кинетики травления кремния в тетрафторметане на основе расчетов реактора радиальной схемы. Показана необходимость применения в однородных

газах более сложных моделей химической кинетики для описания ПХТ.

3. Представлены результаты численного моделирования плазмохимического травления кремния в широко распространенных низкотемпературных плазмах  $CF_4/O_2$  и  $CF_4/H_2$  с использованием многокомпонентных моделей плазмохимических кинетик, воспроизводящие в расчетах экспериментально наблюдаемые кинетические эффекты и количественно подтверждающие сценарии процесса, в частности, эффекта гистерезиса в  $CF_4/O_2$  и процесса полимеризации в  $CF_4/H_2$ .

4. Получены результаты численного моделирования эффективности диссоциации газовой смеси с учетом эффекта снижения электронной плотности в  $CF_4/O_2$ , не оказывающего заметного влияния на эффект повышения скорости травления в газовой смеси  $CF_4/O_2$  по сравнению с чистым тетрафторметаном. Исследовано влияние структуры ВЧ-разряда на однородность плазмохимического травления кремния в  $CF_4/O_2$ , показывающее, что однородное по радиусу распределение электронной плотности обеспечивает более равномерное производство активных частиц и лучшую однородность травления образцов.

**Публикации.** Материал диссертационной работы опубликован в 80 научных работах: 1 – глава в монографии, 47 – статей в журналах и трудах международных и всероссийских конференций (из них 14 статей в журналах, рекомендованных ВАК России), 32 – тезисов докладов.

**Личный вклад автора** состоит в обсуждении постановок задач, разработке адекватных численных алгоритмов и методов решения этих задач, создании и тестировании программ, проведении расчетов и интерпретации результатов численного моделирования, подготовке печатных работ и докладов на конференциях. Результаты совместных работ представлены с согласия соавторов.

**Структура и объем диссертации.** Диссертационная работа состоит из предисловия, введения, пяти глав, заключения и списка литературы, содержащего 179 наименований. Объем работы составляет 308 страниц, включая 63 рисунка и 20 таблиц.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**В предисловии** сформулированы цели и задачи исследования; обоснована научная новизна и практическая ценность работы; приведены основные положения, выносимые на защиту; изложено содержание диссертационной работы по главам.

**Во введении** представлен обзор исследований по численному моделированию технологических процессов плазмохимического травления, применяемых в производстве изделий микроэлектроники. Рассматриваются модели химической кинетики, гидродинамики, тепломассообмена и низкотемпературной плазмы ВЧ-разряда. Обсуждаются численные методы для решения уравнений многокомпонентной гидродинамики и ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении. Проведенный анализ литературных данных показывает, что при численном моделировании ПХТ часто не учитываются важнейшие физические процессы, оказывающие существенное влияние на характеристики травления, в частности, инфракрасное излучение многоатомных молекул, термодиффузия, эффекты разреженности среды, выбор химической кинетики многочисленных газофазных и гетерогенных реакций. Кроме того, из-за сложности и многопараметричности каждой из составляющих процесса при моделировании обычно используются многочисленные упрощения. Поэтому существующие модели ПХТ обладают невысокими прогностическими возможностями и узкими областями применения. В этой связи актуальны исследования, направленные на разработку обобщенной численной модели плазмохимического травления, адекватно воспроизводящей исследуемые процессы и достаточной для реальной их оптимизации.

На основе проведенного анализа литературы по математическому моделированию технологий плазмохимического травления сформулированы требования к создаваемой обобщенной численной модели ПХТ; определены основные элементы математического описания всех составляющих процесса; намечены цели и задачи исследований, результаты которых составляют содержание диссертационной работы.

**Первая глава** диссертации посвящена описанию разработанной физико-математической модели для исследования технологий плазмохимического травления на основе уравнений многокомпонентной гидродинамики (п.1.1.). Течение газовой смеси предполагается аксиально симметричным и рассматривается в рамках модели несжимаемой вязкой теплопроводной жидкости. В п.1.1.1. представлены уравнения движения газовой смеси, и обсуждаются краевые условия на границах расчетной области, включающие в нижнем диапазоне давления ( $p = 0.01 \div 0.1$  торр) условия скольжения, содержащие "вязкую", "диффузионную" и "температурную" составляющие [5]. В п.1.1.2. рассматривается теплоперенос в реакционной камере реактора. Приводится уравнение теплового баланса с учетом условий теплообмена на ограничивающих поверхностях. Рассматривается тепловое излу-

чение в газе, которое в основном диапазоне давления ( $p = 0.1 \div 1.0$  торр) рассчитывается в приближении оптически тонкого слоя, а при пониженном давлении ( $p = 0.01 \div 0.1$  торр) – не учитывается. Вычисление коэффициентов ослабления отдельных компонент смеси проводилось с использованием экспоненциальной модели полосы из [6], дающей хорошее совпадение с экспериментальными данными:

$$\kappa'_{\nu, i, k} = \rho \frac{c_{1, i, k}}{c_{2, i, k}} \left( \frac{100}{T} \right)^{r_{i, k} - s_{i, k}} \exp \left[ - \frac{|\nu_{i, k} - \nu|}{c_{2, i, k}} \left( \frac{100}{T} \right)^{s_{i, k}} \right], \quad (1)$$

где  $\nu$  – волновое число,  $\nu_{i, k}$  – центр  $k$ -ой полосы излучения  $i$ -ой компоненты смеси;  $c_{1, i, k}$ ,  $c_{2, i, k}$ ,  $r_{i, k}$ ,  $s_{i, k}$  – эмпирические постоянные. Обсуждаются краевые условия для уравнения теплового баланса. На непроницаемых границах расчетной области в основном диапазоне давления используется баланс тепловых потоков – теплопроводности, конвективного и лучистого, в диапазоне пониженного давления – условие температурного скачка [5]. В частности, на электроде с образцом краевые условия в приближении бинарной газовой смеси, учитывающие разреженность, имеют вид:

$$u = \Delta_V A \frac{\partial u}{\partial \zeta} + \Delta_D \frac{\partial x_F}{\partial \xi} + \Delta_T \frac{\partial \ln \theta}{\partial \xi}, \quad \theta - \theta_{w2} = \Delta_S A \frac{\partial \theta}{\partial \zeta}; \quad (2)$$

где  $u$  – касательная компонента вектора скорости к поверхности;  $\xi, \zeta$  – радиальная и осевая координаты;  $A$  – отношение радиуса и высоты реакционной камеры;  $\theta, \theta_{w2}$  – температура газа и поверхности соответственно;  $\Delta_V, \Delta_D, \Delta_T$  – коэффициенты "вязкой", "диффузионной" и "температурной" составляющих скорости скольжения;  $\Delta_S$  – коэффициент температурного скачка. Коэффициенты  $\Delta_V, \Delta_D, \Delta_T, \Delta_S$  в свою очередь зависят от чисел Кнудсена  $Kn$ , Пекле для активной компоненты фтора  $Pe_{DF}$ , Прандтля  $Pr$  и коэффициента аккомодации  $q$ . Пункт п.1.1.3. посвящен описанию массообмена в реакционной камере реактора, где приведена система уравнений конвективно-диффузионного переноса компонент смеси с учетом эффекта термомодиффузии [7]:

$$2Pe_{D_i} \left( u \frac{\partial c_i}{\partial \xi} + w A \frac{\partial c_i}{\partial \zeta} \right) = \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \xi \tilde{d}_i \tilde{c}_t \left( \frac{\partial x_i}{\partial \xi} + k_{T_i} \frac{\partial \ln \theta}{\partial \xi} \right) \right) + A^2 \frac{\partial}{\partial \zeta} \left( \tilde{d}_i \tilde{c}_t \left( \frac{\partial x_i}{\partial \zeta} + k_{T_i} \frac{\partial \ln \theta}{\partial \zeta} \right) \right) + G_i, \quad (3)$$

где  $c_i, x_i$  – молярная концентрация и молярная доля частиц  $i$ -го сорта,  $u, w$  – компоненты вектора скорости;  $\tilde{c}_t$  – молярная концентрация газо-

вой смеси,  $\tilde{d}_i$  — коэффициент диффузии многокомпонентной смеси,  $k_{T_i}$  — термодиффузионное отношение,  $Pe_{D_i}$  — диффузионное число Пекле,  $G_i$  — источник частиц  $i$ -го сорта. Здесь молярные концентрации и коэффициент диффузии многокомпонентной смеси нормированы на соответствующие максимальные величины. Обсуждаются краевые условия на границах расчетной области, которые записываются в виде локального баланса потоков соответствующей компоненты.

В п.1.2. представлены модели многокомпонентных химических кинетик в низкотемпературной плазме  $CF_4$  и его смесях с  $O_2$  и  $H_2$ . Основными кинетическими процессами в низкотемпературной плазме принимались — диссоциация компонент исходной газовой смеси электронным ударом с образованием активной компоненты и рекомбинация атомов и радикалов с участием третьего тела. На поверхности образца рассматривались процессы адсорбции атомов и радикалов. В зависимости от состава рабочей смеси и выбранного приближения модели химической кинетики выделялись различные наборы химических реакций, использованных при моделировании плазмохимических технологий травления. Наиболее общими являются модели химической кинетики для смесей газов. Для смеси  $CF_4/O_2$  использовалась модель плазмохимической кинетики из 16 определяющих газофазных реакций и 9 гетерогенных химических реакций, включающих 12 реагентов —  $F$ ,  $F_2$ ,  $CF_2$ ,  $CF_3$ ,  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $O$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $COF$ ,  $COF_2$  [8]. Модель плазмохимической кинетики в  $CF_4/H_2$  содержала 28 определяющих газофазных реакций с участием 11 реагентов —  $F$ ,  $F_2$ ,  $CF_2$ ,  $CF_3$ ,  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $H$ ,  $H_2$ ,  $HF$ ,  $CHF_3$ ,  $CH_2F_2$  [8]. Кинетика гетерогенных реакций на поверхности кремния в общем случае, который возникает в  $CF_4/O_2$ , включала процессы адсорбции радикалов  $CF_2$ ,  $CF_3$  и хемосорбции атомарного кислорода. Процессы хемосорбции и десорбции атомарного кислорода представлялись в виде:  $O \xrightarrow{k_{s1}} O(s)$ ,  $O(s) + F \xrightarrow{k_{s2}} O + F$ , где  $k_{s1}$ ,  $k_{s2}$  — константы скоростей гетерогенных реакций. Для характеристики интенсивности хемосорбции атомарного кислорода на кремнии используется параметр  $\alpha_s = k_{s1}/k_{s2}$ , который оценивался по соотношению прилипающих на образец частиц из потоков атомов фтора и кислорода к его поверхности.

В п.1.3. для описания пространственного распределения плотности электронов, определяющего скорости генерации химически активных частиц и зависящего от характеристик ВЧ-разряда, рассматривается модель аксиально-симметричного разряда в гидродинамическом приближении, включающая уравнения непрерывности для электронов и положительных ионов, уравнение баланса энергии электронов и уравнения Пуассона для электри-

ческого потенциала. Обсуждаются краевые условия на границах расчетной области для электронной и ионной плотностей, а также электронной температуры.

**Во второй главе** диссертации приводятся численные алгоритмы, реализующие предложенную модель.

В п.2.1. рассматривается эффективный численный алгоритм решения уравнений многокомпонентной гидродинамики, основывающийся на методе конечных разностей. Ввиду наличия в уравнениях ведущих эллиптических операторов 2-го порядка по пространственным переменным для аппроксимации уравнений использовалась неявная итерационная конечно-разностная схема стабилизирующей поправки [9], имеющая точность  $O(\Delta_\tau + h_1^2 + h_2^2)$ , где  $h_1, h_2$  – шаги сетки в радиальном и аксиальном направлениях,  $\Delta_\tau$  – итерационный параметр. Полученные в результате дискретизации решения системы линейных алгебраических уравнений имеют трехдиагональные матрицы с диагональным преобладанием и решаются экономичным методом прогонки. Представлены краевые условия для завихренности, основанные на разложении функции тока вблизи твердой стенки второго порядка аппроксимации по пространственным переменным, допускающие их обобщение на режим пониженного давления с учетом эффектов скольжения. Например, в точке  $(n, m)$ , расположенной на твердой стенке, перпендикулярной направлению  $\zeta$ , на расстоянии  $\xi_n$  от оси симметрии это условие записывается в виде:

$$\omega_{n,m}^k \sim \frac{(1 - \delta_{2,m-1})^3 \psi_{n,m-2}^k + \delta_{2,m-1}^3 \psi_{n,m-1}^k - (\delta_{2,m-1}^3 + (1 - \delta_{2,m-1})^3) \psi_{n,m}^k}{\xi_n h_{2,m-1}^2 \delta_{2,m-1}^2},$$

где  $\delta_{2,m} = 1 + h_{2,m}/h_{2,m-1}$ ,  $h_{2,m}$  – шаг сетки в направлении  $\zeta$ . Приведены особенности организации вычислительных алгоритмов, используемых при моделировании плазмохимических технологий травления в различных приближениях.

В п.2.2. рассматривается задача численного интегрирования уравнений высокочастотного разряда в гидродинамическом приближении с малым параметром при старшей производной, характеризующаяся наличием пограничных слоев с большими градиентами искомых величин, ведущих к неравномерной сходимости решения. На основе метода экспоненциальной подгонки предложена безусловно монотонная разностная схема для интегрирования данных уравнений. Для решения уравнений непрерывности электронов и ионов и уравнения энергии электронов, записанных для полных потоков частиц, использована неявная экспоненциальная разностная

схема, обобщенная на двумерный случай и обеспечивающая положительные значения расчетных концентраций плазменных компонент и электронной температуры [10]. В ней потоки частиц вычисляются по экспоненциальным формулам, в частности, радиальная компонента потока имеет вид:

$$j_{l_{\xi_{i+1/2,j}}^{k+1}} = -\frac{z_{l_{i+1/2,j}}^{k+1}}{\Delta_{\xi_{i+1/2}}} \cdot \frac{\rho_{l_{i+1,j}}^{k+1} \tilde{D}_{l_{i+1,j}}^k \exp\left(z_{l_{i+1/2,j}}^{k+1}\right) - \rho_{l_{i,j}}^{k+1} \tilde{D}_{l_{i,j}}^k}{\exp\left(z_{l_{i+1/2,j}}^{k+1}\right) - 1},$$

где  $\Delta_{\xi_{i+1/2}} = \xi_{i+1} - \xi_i$ ,  $z_{l_{i+1/2,j}}^k = -s \text{Pe}_{RF_l} \tilde{\mu}_{l_{i+1/2,j}}^k (\varphi_{i+1,j}^k - \varphi_{i,j}^k) / \tilde{D}_{l_{i+1/2,j}}^k$ . Здесь  $\rho_l$ ,  $\tilde{\mu}_l$ ,  $\tilde{D}_l$  – плотность, подвижность и коэффициент диффузии частиц сорта  $l$ ;  $\varphi$  – потенциал;  $\text{Pe}_{RF_l}$  – число Пекле.

В п.2.3. с целью ускорения вычислений предложены эффективные параллельные алгоритмы моделирования многокомпонентной химической кинетики и ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении на многопроцессорной системе с применением MPI. Для повышения эффективности решения системы дифференциальных уравнений конвективно-диффузионного переноса большой размерности предложено покомпонентное распараллеливание вычислительного алгоритма. Конечно-разностный аналог двумерного уравнения переноса для  $i$ -ой компоненты решается на отдельном процессоре, что позволяет вычислить концентрации всех компонент одновременно и рассматривать самые детализированные кинетические модели в двумерной постановке. При распараллеливании расчетов ВЧ-разряда использовалась как декомпозиция расчетной области, так и распараллеливание по уравнениям в отдельной подобласти, при котором каждое из уравнений (для электрического потенциала, концентраций электронов и ионов, электронной температуры) решалось на отдельном процессоре. Это позволило распределить данные по процессорам однородно, и существенно уменьшить время счета до выхода характеристик разряда на периодический режим.

В третьей главе диссертации на основе бинарной модели кинетики рассматриваются различные физические эффекты, оказывающие существенное влияние на процесс плазмохимического травления. Обсуждается влияние различных факторов на скорость и неоднородность травления кремниевых образцов в низкотемпературной плазме  $CF_4$ , а также возможность их оптимизации в широком диапазоне рабочих режимов.

В п.3.1. моделировался процесс плазмохимического травления в изотермическом приближении. Для описания рабочей среды использовалось

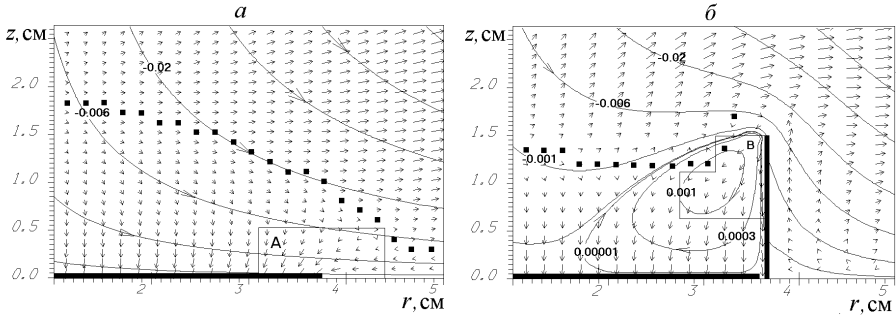


Рисунок 1 — Распределение изолиний функции тока и полного потока активной компоненты в центральной части ПХР *stadium*: (а) без протектора, (б) с кольцевым протектором. Параметры:  $p = 0.2$  торр,  $Q = 30 \text{ см}^3/\text{мин}$  ( $Re = 0.396$ ).

приближение бинарной газовой смеси, в которой выделялись исходный газ и активная компонента. Образование активной среды описывалось процессами диссоциации молекул исходного газа электронным ударом с образованием активной компоненты и рекомбинацией последней с участием третьего тела. Для двух схем аксиально симметричных планарных ПХР индивидуального травления *pedestal* и *stadium* исследованы зависимости скорости и неоднородности спонтанного травления от рабочих параметров промышленных реакторов — давления, расхода газа и ионного тока. Показано, что процесс травления образцов и его однородность определяются диффузией химически активных частиц к образцу и стенкам реакционной камеры и кинетикой поверхностных реакций на них (рисунок 1а). Рассмотрена возможность минимизации неоднородности травления путем применения кольцевых протекторов из материала с низкой химической активностью (рисунок 1б). В частности, для схемы *stadium* показано, что протектор предотвращает диффузию активных частиц с периферии нижнего электрода к образцу, возникающей из-за разности реакционных способностей образца и окружающего электрода. На основе схемы *pedestal* рассматривается влияние неоднородной структуры ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления. Определены оптимальные размеры протектора, обеспечивающие минимальные значения неоднородности травления образцов во всем диапазоне рабочих режимов.

В п.3.2. обсуждаются эффекты неизотермичности, возникающие в процессе плазмохимического травления. Температурный фактор оказывает существенное влияние на морфологию поверхности, скорость и селективность травления. Математическая модель процесса плазмохимического



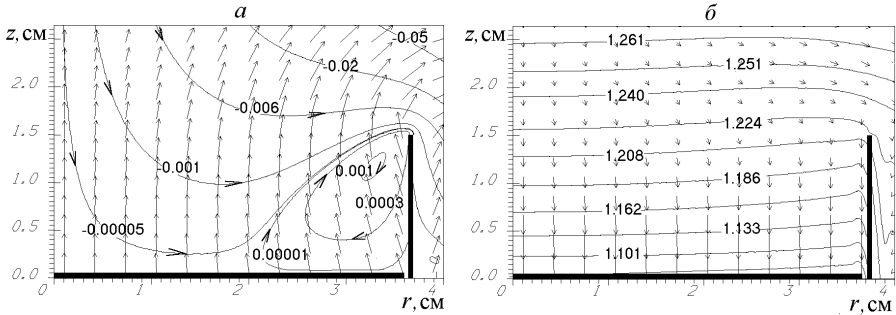


Рисунок 2 — Центральная часть ПХР *stadium*: (а) распределение полного теплового потока  $q_h$  и изолинии функции тока при  $p = 1.0$  торр; (б) распределение полного потока активных частиц  $Q_e$  и изолинии концентрации фтора ( $C_F \cdot 10^{10}$ , Моль/см<sup>3</sup>) при  $p = 0.2$  торр. Другие параметры:  $Q = 50$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_{w2} = 500$  К ( $Re = 0.556$ ,  $Re_T = 0.581$ ,  $Nu = 0.532$  (анод)).

травления, использованная п.3.1., была дополнена уравнением баланса энергии, включающем конвективный перенос, теплопроводность и излучение плазмы. Поглощательная способность среды оценивалась на основе формулы (1) для многоатомных молекул  $CF_4$ , имеющих интенсивные линии в инфракрасной области спектра и наибольшую концентрацию. В расчетах учитывались возникновение свободной конвекции, термодиффузия активных частиц, температурные зависимости констант химических реакций. Численное моделирование процесса плазмохимического травления, выполненное для схемы *stadium*, показало, что наличие температурных градиентов в газе оказывают существенное влияние на качество обработки образцов. В центральной части реакционной камеры реактора над образцом основные механизмы передачи энергии связаны с теплопроводностью и излучением многоатомных молекул рабочих газов в инфракрасной области спектра (рисунок 2а). Их вклады в теплообмен имеют один порядок, существенно превышающий вклад конвекции. Несмотря на относительно небольшие градиенты температуры, термодиффузия химически активных частиц обеспечивает до 20% полного потока на подложку. Найденная при моделировании процесса плазмохимического травления в изотермическом приближении оптимальная конфигурация протектора дает однородные распределения концентрации фтора и полного потока активных частиц на образец в условиях неизотермичности рабочей среды (рисунок 2б). Рассмотрено влияние выбора конструкционных материалов элементов конструкции реактора на однородность травления.

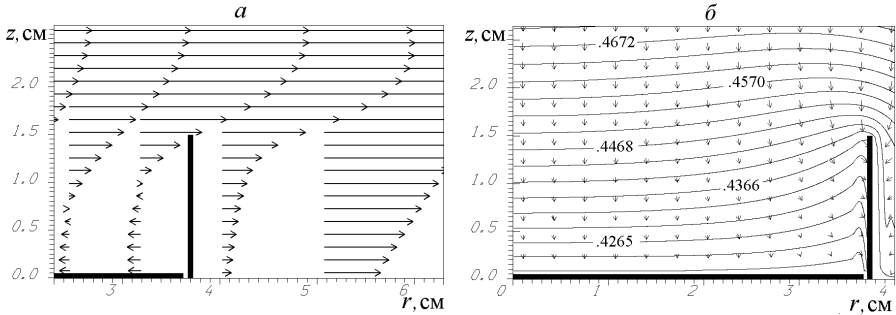


Рисунок 3 – Центральная часть ПХР *stadium*: (а) профиль радиальной скорости при  $p = 0.01$  торр,  $Q = 50 \text{ см}^3/\text{мин}$ ,  $T_{w2} = 400 \text{ К}$  ( $Re = 0.663$ ,  $Kn = 0.058$ ); (б) распределение термодиффузионного потока активных частиц  $Q_t$  и изолинии концентрации фтора ( $C_F \cdot 10^{10}$ , Моль/см<sup>3</sup>) при  $p = 0.05$  торр,  $Q = 50 \text{ см}^3/\text{мин}$ ,  $T_{w2} = 450 \text{ К}$ , ( $Re = 0.601$ ,  $Kn = 0.014$ ).

В п.3.3. рассматриваются эффекты разреженности среды при плазмохимическом травлении на пониженном давлении ( $p = 0.01 \div 0.1$  торр). Понижение рабочего давления до режимов, близких к кинетическим по структуре течения, усиливает вклад конвекции в процессы переноса в реакционной камере реактора. Кроме того, давление оказывает существенное влияние на производство химически активных частиц и ионную бомбардировку поверхности образца. При моделировании процесса плазмохимического травления при пониженном давлении использовалась математическая модель неизотермического процесса, основывающаяся на континуальном подходе в описании движения разреженного газа, но с новыми краевыми условиями для скорости и температуры вида (2), учитывающими разреженность. Численное моделирование процесса плазмохимического травления при пониженном давлении в схеме *stadium* показало, что разреженность среды отражается на профиле радиальной скорости, касательной к электродам. Скорость скольжения максимальна на нижнем электроде и достигает половины характерной конвективной скорости в реакторе ( $0.43 \div 0.54$ ) $w_0$  при  $p = 0.01$  торр (рисунок 3а), где  $w_0$  – скорость газа на входе в ПХР. Однако процесс травления образца определяется диффузией и термодиффузией химически активных частиц. Вклад последней с понижением давления увеличивается, и в нижнем переделе процесс травления осуществляется в равной их степени (рисунок 3б). Протектор повышает однородность травления и в режиме скольжения. С понижением давления концентрация химически активных частиц и скорость спонтанного трав-

ления существенно снижаются, например, снижение давления в 20 раз до уровня  $p = 0.01$  торр при фиксированном расходе газа  $Q = 50 \text{ см}^3/\text{мин}$  дает падение концентрации в 6.6 – 12.6 раз, скорости травления – 6.6 – 11.3 раз.

**В четвертой главе** представлены результаты по численному моделированию технологии плазмохимического травления кремния в низкотемпературной плазме  $CF_4$  и его смесях с  $O_2$  и  $H_2$  на основе многокомпонентных моделей кинетики.

В п.4.1. обсуждается роль выбора модели химической кинетики для процесса плазмохимического травления. Проведено сравнение наиболее распространенных упрощенных моделей для травления кремния в чистом  $CF_4$ . Концентрации компонент смеси находились из системы уравнений конвективно-диффузионного переноса, размерность которой определялось выбранной моделью кинетики (3), включающей 2-, 3- или 4-компоненты для плазмы  $CF_4$  [11]–[13]. На образце учитывалась адсорбция радикалов  $CF_3$ . Тестовые расчеты процесса травления в изотермическом приближении по модели 3х-компонентной кинетики для ПХР радиальной схемы из работы [12] показали удовлетворительное совпадение результатов, полученных в рамках двух независимых численных моделей. Несмотря на увеличение скорости течения газа по сравнению с планарными реакторами индивидуального травления диффузия активных частиц к образцу определяет процесс травления. Усложнение кинетики кардинально меняет расчетные значения концентрации и скорости травления (см. таблицу 1). Настоящими расчетами показана необходимость выбора адекватной модели кинетики на основе экспериментальных данных.

Таблица 1 – Средние по образцу скорость травления и концентрация фтора для 2х-, 3х- и 4х-компонентной моделей химической кинетики в ПХР. Параметры:  $p = 0.512$  торр,  $Q = 340 \text{ см}^3/\text{мин}$ .

$T_s, \text{K}$	$R_s, \text{Å}/\text{мин}$			$C_F \cdot 10^9, \text{Моль}/\text{см}^3$		
	Количество компонент			Количество компонент		
	2	3	4	2	3	4
300	83.05	373.50	624.94	0.17844	0.80833	1.34619
373	189.17	823.89	968.95	0.16869	0.74013	0.86954
473	389.56	1591.27	1377.89	0.15556	0.64741	0.56379
573	608.61	2375.13	1707.10	0.14276	0.56176	0.40903

В п.4.2. исследуется влияние добавки кислорода к активному газу  $CF_4$  на скорость травления кремния. Кислород химически связывает радикалы и ненасыщенные вещества, реагирующие со свободным фтором [14], увеличивая концентрацию химически активных частиц. Для смеси  $CF_4/O_2$

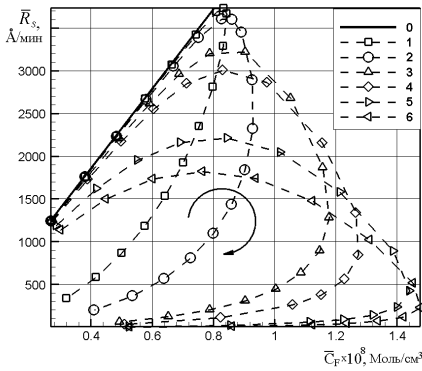


Рисунок 4 – Зависимость средней скорости травления от средней концентрации фтора на кремнии при различной концентрации  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ . Маркерами на кривых обозначена доля  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ , изменяющаяся с шагом в 5% в пределах от 10% до 90% в направлении стрелки. Параметры:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К. Направление течения газа – к центру ПХР. Условные обозначения: 0 –  $\alpha_s = 0.0$ , 1 –  $\alpha_s = 0.3$ , 2 –  $\alpha_s = 1.0$ , 3 –  $\alpha_s = 5.0$ , 4 –  $\alpha_s = 10$ , 5 –  $\alpha_s = 50$ , 6 –  $\alpha_s = 100$ . Параметр  $\alpha_s$  см. в описании п.1.2.

использовалась модель плазмохимической кинетики из 16 определяющих газофазных реакций, включающих 12 реагентов –  $F$ ,  $F_2$ ,  $CF_2$ ,  $CF_3$ ,  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $O$ ,  $O_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ ,  $COF$ ,  $COF_2$  [8]. В качестве основного механизма, снижающего скорость травления, рассматривались процессы адсорбции  $CF_2$ ,  $CF_3$  и хемосорбция кислорода на поверхности кремния. Процессы теплового излучения и поглощения в газе оценивались на основе формулы (1) для степени черноты трехатомных молекул  $CO_2$  и пятиатомных молекул  $CF_4$ , обладающих высокой поглощательной способностью в инфракрасной области спектра.

Зависимость скорости плазмохимического травления от концентрации атомарного фтора имеет гистерезисный характер (рисунок 4), что согласуется с имеющимися экспериментальными данными. Полученные кривые гистерезиса 1–6 травления кремния в плазме  $CF_4/O_2$  подтверждают факт

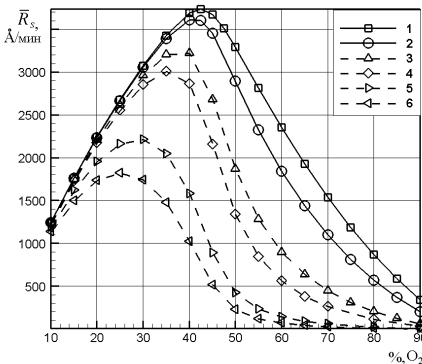


Рисунок 5 – Зависимость средней скорости травления от процентного содержания  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ . Параметры и направление течения: см. рисунок 4. Условные обозначения: 1 –  $\alpha_s = 0.3$ , 2 –  $\alpha_s = 1.0$ , 3 –  $\alpha_s = 5.0$ , 4 –  $\alpha_s = 10$ , 5 –  $\alpha_s = 50$ , 6 –  $\alpha_s = 100$ .

замедления травления кремния атомарным фтором в результате хемосорбции кислорода на поверхности кремния. В отсутствие хемосорбции кислорода на кремнии гистерезис не наблюдается (кривая 0). Изучение эффекта гистерезиса в  $CF_4/O_2$  показало, что хемосорбция  $O$  на кремнии преобладает над процессами адсорбции радикалов  $CF_2$ ,  $CF_3$ . Влияние последних на скорость травления пренебрежимо мало. Отмечено существенное влияние отношения коэффициентов прилипания атомов фтора и кислорода на кремнии (параметра  $\alpha_s$ ) на положение максимумов скорости спонтанного травления и концентрации активных частиц в зависимости от процентного содержания кислорода в смеси (рисунок 5).

В п.4.3. моделируется процесс формирования полимерной пленки  $CF_x$  на поверхности кремниевого образца в плазме  $CF_4/H_2$  и исследуется его влияние на процесс плазмохимического травления. Модель плазмохимической кинетики в  $CF_4/H_2$  содержала 28 определяющих газофазных реакций с участием  $F$ ,  $F_2$ ,  $CF_2$ ,  $CF_3$ ,  $CF_4$ ,  $C_2F_6$ ,  $H$ ,  $H_2$ ,  $HF$ ,  $CHF_3$ ,  $CH_2F_2$  [8]. Кинетика гетерогенных реакций на поверхности кремнии включала процессы адсорбции радикалов  $CF_2$ ,  $CF_3$ .

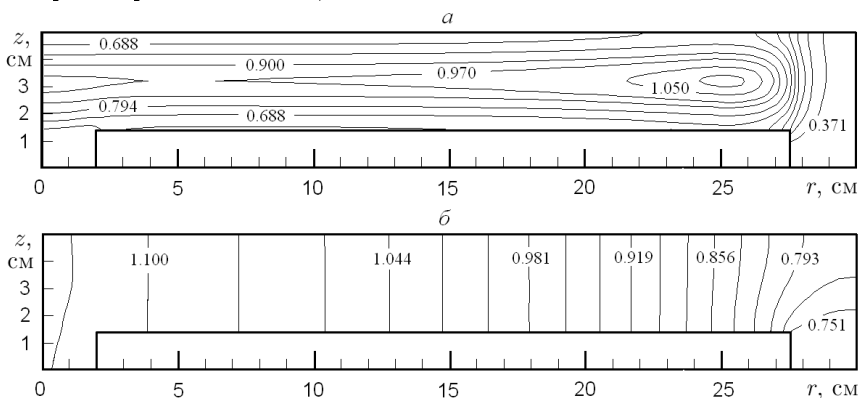


Рисунок 6 – Распределение концентраций компонент смеси в радиальном плазмохимическом реакторе: (а) фтор ( $CF \cdot 10^{10}$  моль/см<sup>3</sup>), (б) фтороводород ( $CHF \cdot 10^8$  моль/см<sup>3</sup>). Параметры режима:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К, 25% доля  $H_2$  в  $CF_4/H_2$ . Направление течения газа – к центру ПХР.

Моделирование процесса пассивации кремния ненасыщенными радикалами типа  $CF_x$  при плазмохимическом травлении в  $CF_4/H_2$  показало, что большая часть атомарного фтора идет на формирование компоненты  $HF$ , существенно понижая скорость травления кремния. Этот результат иллюстрирует рисунок 6, на котором показано, что с продвижением вниз по по-

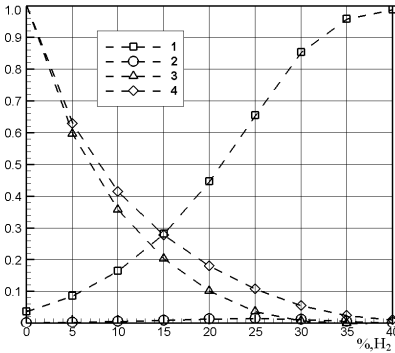


Рисунок 7 — Зависимости долей поверхности образца, покрытых  $CF_2$  и  $CF_3$  соответственно, и нормированных средних скорости травления и концентрации фтора на образце от процентного содержания  $H_2$  в  $CF_4/H_2$ . Обозначения: 1 —  $\nu_{CF_2}$ ; 2 —  $\nu_{CF_3}$ ; 3 — концентрация фтора, 4 — скорость травления.

току концентрация фтора монотонно понижается (рисунок 6а), в то время как концентрация фтористого водорода растет и достигает своего максимума на выходе из реактора (рисунок 6б). Среди конкурирующих процессов пассивации поверхности кремния в качестве преобладающего выделена адсорбция радикала  $CF_2$ , слой которого при 40% добавке  $H_2$  полностью покрывает поверхность образца, образуя полимерную пленку на его поверхности, что полностью прекращает процесс травления (рисунок 7).

Таким образом, добавка окисляющих или восстанавливающих компонент во фторуглеродную плазму позволяют эффективно управлять скоростью и селективностью травления наиболее распространенных полупроводниковых материалов — кремния и диоксида кремния.

**В пятой главе** исследуется влияние характеристик ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления кремния в смеси  $CF_4/O_2$ .

В п.5.1. исследуется влияние эффекта снижения плотности первичных электронов при добавке  $O_2$  в  $CF_4$  на эффективность диссоциации молекул  $CF_4$ , скорость и однородность травления кремниевых образцов. Расчеты выполнены на основе экспериментальных данных [14], описывающих зависимость электронной плотности от концентрации  $O_2$ . Влияние добавки  $O_2$  в  $CF_4$  на электронную плотность не зависит от выбора конструктивной схемы реактора, режимов его работы и может быть представлено в виде:  $\bar{n}_e = \bar{n}_{e0} \times \Theta_e(x_{O_2})$ , где  $\bar{n}_{e0}$  — однородная по объему реактора плотность электронов в отсутствие кислорода,  $x_{O_2}$  — молярная доля кислорода,  $\Theta_e(x_{O_2})$  — зависимость из работы [14].

С увеличением содержания  $O_2$  в  $CF_4$  при постоянных прочих условиях концентрация электронов монотонно уменьшается, что снижает скорости диссоциации и ионизации электронным ударом и приводит к уменьшению

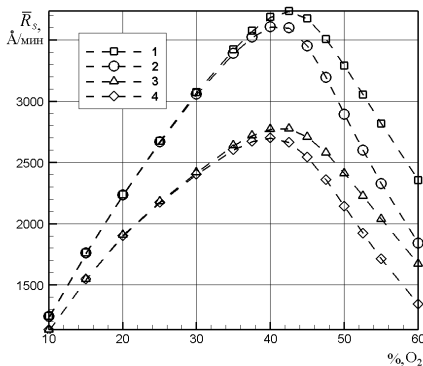


Рисунок 8 — Зависимость средней скорости травления от процентного содержания  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ . Параметры:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К. Обозначения: 1 —  $\Theta_e = 1$ ,  $\alpha_s = 0.3$ ; 2 —  $\Theta_e = 1$ ,  $\alpha_s = 1$ ; 3 —  $\Theta_e = \Theta_e(x_{O_2})$ ,  $\alpha_s = 0.3$ ; 4 —  $\Theta_e = \Theta_e(x_{O_2})$ ,  $\alpha_s = 1$ .

Таблица 2 — Относительные отклонения средних величин скорости травления, концентраций фтора, тетрафторметана и кислорода в зависимости от содержания  $O_2$  в  $CF_4$  при  $\alpha_s = 0.3$ .

$\%, O_2$	$\delta_{\bar{R}_s}, \%$	$\delta_{\bar{C}_F}, \%$	$\delta_{\bar{C}_{CF_4}}, \%$	$\delta_{\bar{C}_{O_2}}, \%$
10	8.95	8.95	2.05	25.98
20	14.79	14.74	8.41	42.07
30	21.22	21.07	22.25	58.75
40	24.88	24.44	44.15	66.49
50	26.66	26.86	68.82	74.99
60	28.90	29.66	81.61	84.58

производства активных атомов фтора. Одновременно снижается средняя скорость травления (рисунок 8). Как видно из графиков, заметное расхождение кривых 1 и 3, 2 и 4 наступает в области максимальных скоростей травления при концентрациях кислорода, больших 30%.

Для характеристики снижения средней скорости травления и эффективности диссоциации молекул исходного газа вычислялись относительные отклонения:

$$\delta_{\bar{R}_s} = \left| \frac{\bar{R}'_s - \bar{R}''_s}{\bar{R}'_s} \right|, \quad \delta_{\bar{C}_i} = \left| \frac{\bar{C}'_i - \bar{C}''_i}{\bar{C}'_i} \right|, \quad i = F, CF_4, O_2;$$

где  $\bar{R}'_s, \bar{C}'_i$  — средняя скорость травления и концентрации фтора, тетрафторметана, кислорода соответственно при  $\Theta_e = 1$ ;  $\bar{R}''_s, \bar{C}''_i$  — средние значения с учетом зависимости  $\Theta_e(x_{O_2})$ . В таблице 2 приведены  $\delta_{\bar{R}_s}, \delta_{\bar{C}_F}, \delta_{\bar{C}_{CF_4}}, \delta_{\bar{C}_{O_2}}$  в зависимости от добавки  $O_2$ . С увеличением процентного содержания  $O_2$  в  $CF_4$  в пределах до 60% падение средней скорости травления может составлять до 30%. Тем не менее, скорость травления в газовой

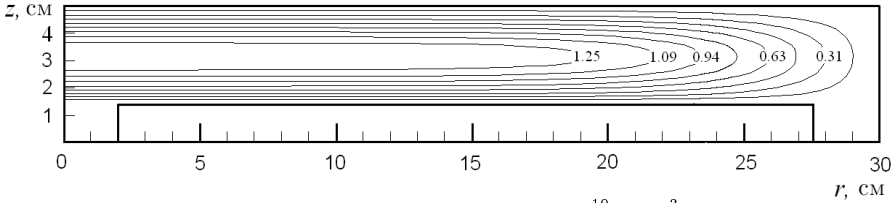


Рисунок 9 — Изолинии электронной плотности  $n_e \cdot 10^{-10} \text{ см}^{-3}$  в плазмохимическом реакторе, рассчитанные в гидродинамическом приближении ВЧ-разряда. Параметры: напряжение  $\phi_0 = 110 \text{ В}$ , частота  $f = 13.56 \text{ МГц}$ , плотность газа  $n = 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ .

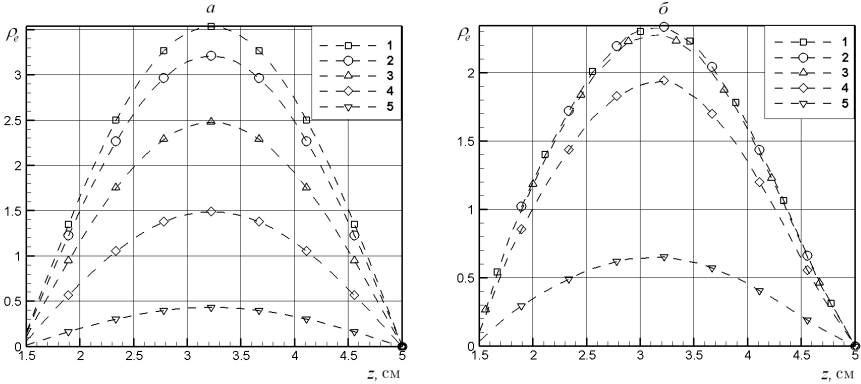


Рисунок 10 — Зависимость электронной плотности от высоты реактора при фиксированном радиусе: (а) распределение (6); (б) расчет в гидродинамическом приближении. Параметры: напряжение  $\phi_0 = 110 \text{ В}$ , частота  $f = 13.56 \text{ МГц}$ , объемная плотность газа  $n = 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ , средняя плотность электронов  $\bar{n}_e = 6 \cdot 10^9 \text{ см}^{-3}$ . Обозначения: 1 —  $r = 2.14 \text{ см}$ , 2 —  $r = 8.14 \text{ см}$ , 3 —  $r = 14.57 \text{ см}$ , 4 —  $r = 21.00 \text{ см}$ , 5 —  $r = 27.43 \text{ см}$ .

смеси остается достаточно высокой по сравнению с чистым  $CF_4$ . Относительные изменения концентраций  $CF_4$  и  $O_2$  показывают, что понижение электронной плотности в ВЧ-разряде, связанное с добавкой  $O_2$ , ведет к увеличению доли компонент исходной газовой смеси. При больших добавках кислорода эффективность диссоциации  $CF_4$  падает практически в двое. Понижение электронной плотности в реакторе приводит к одновременному пропорциональному уменьшению амплитуд средних скорости травления и концентрации фтора на образце с сохранением формы кривой гистерезиса. При этом баланс конкурирующих процессов на образце не изменяется, а, следовательно, не изменяется и сценарий процесса травления.

В п.5.2. исследовалось влияние структуры ВЧ-разряда, рассчитанное с применением различных подходов, на производство активных частиц и ка-



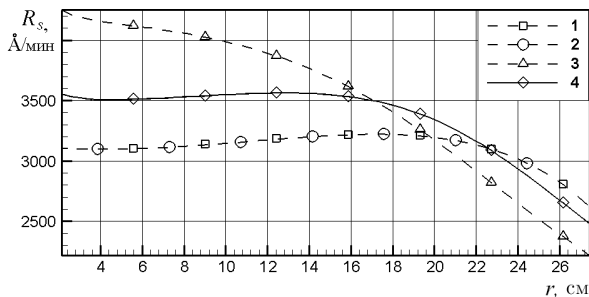


Рисунок 11 — Распределение скорости спонтанного травления по радиусу образца. Кривые 1 – 4 соответствуют распределениям электронных плотностей: 1 – формула (4); 2 – формула (5); 3 – формула (6); 4 – расчет в гидродинамическом приближении. Параметры:  $p = 0.5$  торр,  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин,  $T_s = 300$  К, 30%-содержание  $O_2$ .

чество травления образцов. Рассматривались аналитические модели ВЧ-разряда в диффузионно-дрейфовом приближении, представляющие различные по степени детализации приближения, получившие широкое распространение при моделировании плазмохимических реакторов травления:

$$\rho_e = 1, \quad (4)$$

$$\rho_e = \frac{\pi}{2} \sin(\pi\zeta), \quad (5)$$

$$\rho_e = 2.316 \frac{\pi}{2} J_0(2.405\xi) \sin(\pi\zeta), \quad (6)$$

где  $0 \leq \xi \leq \xi_{RF}$ ,  $0 \leq \zeta \leq 1$ . В (4), (5) область разряда ограничивалась радиусом электродов  $\xi_{RF} = \xi_e$ , а в (6) – размерами реакционной камеры  $\xi_{RF} = 1$ . Проводились также прямые расчеты характеристик низкотемпературной плазмы с использованием гидродинамической модели аксиально-симметричного ВЧ-разряда в трехмоментном приближении, включающей решение уравнения непрерывности для электронов и положительных ионов, уравнение баланса энергии электронов и уравнение Пуассона для электрического потенциала (рисунок 9).

Изменения электронной плотности в радиальном направлении иллюстрируют рисунки 10а, 10б, соответствующие формуле (6) и результатам численного моделирования ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении, наиболее приближенным к реальным в условиях работы реактора. Если не рассматривать крайнее значение  $r = 27.43$  см, поскольку образцы располагаются на некотором расстоянии от внешней кромки электрода, то представленные зависимости показывают, что снижение расчетного распределения электронной плотности по радиусу реактора может составлять

до 17%, в то время как для распределения (6) соответствующая величина достигает 60%. Такое снижение электронной плотности в радиальном направлении оказывает существенное влияние на скорость и однородность плазмохимического травления образцов (см. рисунок 11). Для распределения электронной плотности, рассчитанной в гидродинамическом приближении, профиль скорости травления занимает промежуточное положение между кривыми 1, 2 и 3, рассчитанных с применением различных подходов (кривая 4 на рисунке 11). Таким образом, более однородное распределение электронной плотности по радиусу реакционной камеры обеспечивает равномерное производство активных частиц и лучшую однородность травления образцов. Вариация характеристик ВЧ-разряда не вносит качественных изменений в сценарии процесса травления, но оказывает существенное влияние на интенсивность производства химически активных частиц, скорость и однородность травления образцов.

**В Заключение** представлены основные результаты и выводы диссертационной работы, которые состоят в следующем.

*1. В области разработки и совершенствования математических моделей плазмохимических технологий микроэлектроники:*

1.1. Разработана продвинутая физико-математическая модель для плазмохимических технологий микроэлектроники в двумерной постановке, в которой движение газовой смеси описывается уравнениями многокомпонентной гидродинамики с учетом конвективно-диффузионного теплопереноса. Модель включает новые, ранее не рассматривавшиеся при моделировании реакторных процессов элементы, повышающие прогностические возможности модели и раскрывающие основные физические механизмы ПХТ, в частности, сложный теплообмен с учетом ИК-излучения многоатомных молекул, эффекты разреженности, термодиффузии, адекватную многокомпонентную кинетику газофазных реакций, расширенную кинетику гетерогенных реакций. Для расчета теплового излучения и поглощения в характерных для ПХТ газовых смесях предложена оригинальная методика на основе экспоненциальной модели полосы, дающая хорошее совпадение с экспериментальными данными. Для описания электронной компоненты плазмы используются как аналитические модели ВЧ-разряда в диффузионно-дрейфовом приближении, так прямые расчеты аксиально-симметричного ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении.

1.2. Предложен эффективный численный алгоритм для решения уравнений многокомпонентной гидродинамики на основе неявной конечно-разностной схемы стабилизирующей поправки, реализуемый экономичным ме-

тодом прогонки. Получены новые дискретные краевые условия для завихренности на непроницаемых поверхностях реакционной камеры, обобщенные на режим пониженного давления с учетом эффектов скольжения на этих поверхностях.

1.3. На основе метода экспоненциальной подгонки разработана безусловно монотонная разностная схема для интегрирования уравнений высокочастотного разряда в гидродинамическом приближении в двумерной постановке. Впервые для решения уравнений непрерывности электронов и ионов и уравнения энергии электронов использована обобщенная на двумерный случай неявная экспоненциальная разностная схема, обеспечивающая положительные значения расчетных концентраций плазменных компонент и электронной температуры.

1.4. Предложен параллельный алгоритмы для численного моделирования многокомпонентной химической кинетики, основанный на покомпонентном решении системы уравнений конвективно-диффузионного переноса, который позволяет исследовать самые детализированные модели плазмохимической кинетики из числа существующих в двумерной постановке. Предложен параллельный алгоритм для численного моделирования ВЧ-разряда, включающий как декомпозицию расчетной области, так и распараллеливание по уравнениям, что позволяет проводить серийные расчеты ВЧ-разряда в двумерной постановке в широком диапазоне параметров.

*2. На основе численного моделирования плазмохимического травления кремния в низкотемпературной плазме  $CF_4$  для бинарной модели кинетики:*

2.1. Найдено, что в планарных ПХР характерная неоднородность травления образцов кремния в плазме тетрафторметана в диапазоне рабочих давлений  $0.01 \div 1.0$  торр определяется диффузией и термодиффузией активной компоненты к поверхности образца и стенкам реакционной камеры реактора, а также кинетикой поверхностных реакций на них.

2.2. Показана возможность минимизации неравномерности травления образцов во всем диапазоне рабочих режимов с помощью кольцевых проекторов, в том числе в условиях неизотермичности и разреженности среды. Представлены рекомендации по выбору конструкционных материалов для элементов конструкции реактора.

2.3. Структура течения в реакционной камере при малых числах Рейнольдса определяется вынужденной конвекцией, которая подавляет эффекты плавуности на всех режимах работы реактора.

2.4. При давлении  $0.2 \div 1.0$  торр основной теплоперенос при ПХТ осу-

ществляется теплопроводностью и излучением. Пренебрежение излучением многоатомных молекул в газовой смеси, имеющих интенсивные линии в ИК-области спектра, может привести к существенным погрешностям в расчетах температуры.

2.5. При давлении  $0.2 \div 1.0$  торр термодиффузионный поток составляет до 20% полного потока активной компоненты на подложку и при наличии локальных градиентов температуры может критически снизить однородности травления. При пониженном давлении  $0.01 \div 0.1$  торр, несмотря на наличие эффекта скольжения процесс травления определяется диффузионным и термодиффузионным потоками активных частиц. С понижением давления вклад термодиффузии в полный поток активных частиц на образец растет и может достигать 50%, однако скорость спонтанного травления существенно снижается.

2.6. Для двух распространенных схем планарных ПХР — *pedestal* и *stadium* определены зависимости скорости и неоднородности травления от технологических параметров режима травления — давления, расхода газа и ионного тока, позволяющие выполнить настройку режима работы реактора на оптимальные показатели.

3. На основе численного моделирования травления кремния в низко-температурной плазме  $CF_4$  и его смесях с  $O_2$  и  $H_2$ :

3.1. Показано, что структура течения в радиальных ПХР определяется направлением подачи газа в реактор и не зависит от параметров рабочего режима. Несмотря на относительно интенсивную конвекцию, процесс травления образцов в основном осуществляется концентрационной диффузией активных частиц к поверхности образца.

3.2. Сравнение 2х-, 3х- и 4х-компонентных моделей химических кинетик, широко используемых при моделировании процесса травления кремния в  $CF_4$ , показало, что средние значения концентрации фтора и скорости спонтанного травления существенно различаются по абсолютным значениям для различных кинетик. Таким образом, моделирование ПХТ даже в однородных газах требует тщательного отбора и применения более сложных моделей химической кинетики, выбор которых необходимо основывать на сравнении с экспериментом.

3.3. Показана возможность оптимизации процесса травления по составу бинарной смеси в плазме  $CF_4/O_2$ . Добавка кислорода позволяет увеличивать скорость травления в несколько раз, что объясняется замещением фтора кислородом во фторсодержащих радикалах  $CF_x$  с высвобождением дополнительных атомы фтора.

3.4. Найдено, что в результате хемосорбции кислорода на кремнии возникает гистерезисный эффект в зависимости скорости травления от концентрации фтора при различном содержании  $O_2$  в  $CF_4/O_2$ . Без учета хемосорбции кислорода гистерезис отсутствует. Отношение коэффициентов прилипания атомов фтора и кислорода на кремнии оказывают существенное влияние на скорость спонтанного травления и кривую гистерезиса.

3.5. При рассмотрении плазмохимического травления кремния в  $CF_4/H_2$  показано, что с увеличением добавки водорода концентрация фтора и скорость спонтанного травления снижаются. Значительная часть фтора, полученная при диссоциации молекул  $CF_4$ , идет на формирование компоненты  $HF$ , которая выводится из реактора.

3.6. Добавка водорода приводит к образованию полимерного слоя на поверхности образца, состоящего в основном из радикалов  $CF_2$ . С увеличением содержания  $H_2$  до 40% в  $CF_4/H_2$  покрытие поверхности радикалами  $CF_2$  составляет 99%.

3.7. Добавка  $O_2$  в пределах до 40% позволяет увеличивать скорость спонтанного травления в несколько раз, а добавка  $H_2$ , напротив, — полностью прекратить процесс травления, что является эффективным фактором управления режимом травления.

*4. На основе исследования влияния структуры ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления кремния в  $CF_4/O_2$  показано:*

4.1. Снижение электронной плотности в ВЧ-разряде, вызванное добавкой кислорода, приводит к падению скорости спонтанного травления в пределах до 30%. При этом снижение в диапазоне оптимальных скоростей травления, достигаемых при концентрациях кислорода 25 — 40%, превышает 20%. Тем не менее, основной эффект повышения скорости травления в газовой смеси  $CF_4/O_2$  по сравнению с чистым тетрафторметаном по порядку величины сохраняет свое значение.

4.2. Моделирование ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении приводит к увеличению индекса неоднородности травления до 17%, что говорит о необходимости специальных мер для повышения однородности травления, по крайней мере, для широкоапертурных реакторов.

4.3. Вариация электронной плотности по аксиальной координате в различных моделях ВЧ-разряда в диффузионно-дрейфовом и гидродинамическом приближениях не влияет на характеристики процесса травления.

4.4. Численное моделирование ВЧ-разряда, обладающее большой вычислительной трудоемкостью, следует рассматривать как отдельное самостоятельное исследование. При моделировании процессов плазмохимиче-

ского травления для электронной плотности и температуры целесообразно применять аналитические модели, опирающиеся на результаты численных экспериментов или данные измерений.

Разработанная численная модель полностью соответствует современным направлениям в математическом моделировании плазменных технологий микроэлектроники и является наиболее продвинутой среди известных аналогов. Созданный пакет программ позволяет комплексно исследовать процессы плазмохимической обработки в технологических установках, включая широкоапертурные, в которых предъявляются повышенные требования к равномерности обработки пластин большого диаметра, и найдет применение при разработке гибких адаптивных технологических процессов.

Автор выражает искреннюю благодарность доктору физико-математических наук, профессору Юрию Николаевичу Григорьеву за плодотворное сотрудничество, постоянное внимание к работе и обсуждение ее результатов.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] *Орликовский, А.А.* Плазменные процессы в микро- и нанoeлектронике. Ч.1. Реактивное ионное травление / А.А. Орликовский // Микроэлектроника. — 1999. — Т.28. — №5. — С.344-362.
- [2] Введение в процессы интегральных микро- и нанотехнологий: учебное пособие для вузов: в 2 т. / под общ. ред. Ю.Н. Коркишко. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010-2011. — (Нанотехнологии). Т.2: Технологические аспекты / М.В. Акуленок, В.М. Андреев, Д.Г. Громов и др. — 2011. — 252С.
- [3] *Орликовский, А.А.* Плазменные процессы в микро- и нанoeлектронике. Ч.2. Плазмохимические реакторы нового поколения и их применение в технологии микроэлектроники / А.А. Орликовский // Микроэлектроника. — 1999. — Т.28. — №6. — С.415-426.
- [4] *Амиров, И.И.* Травление кремния и диоксида кремния в высокоплотной плазме ВЧИ разряда низкого давления / И.И. Амиров, О.В. Морозов, М.О. Изюмов // Химия высоких энергий. — 2003. — Т.37. — №5. — С.373-379.
- [5] *Волков, И.В.* Анализ коэффициентов скольжения и температурного скачка в бинарной смеси газов / И.В. Волков, В.С. Галкин // Изв. АН СССР. МЖГ. — 1990. — №8. — С.152-159.
- [6] *Edwards, D.K.* Comparison of models for correlation of total band absorption / D.K. Edwards, W.A. Menard // Applied optics. — 1964. — Vol.3. — №5. — P.621-625.
- [7] *Гиришфельдер, Дж.* Молекулярная теория газов и жидкостей / Дж. Гиришфельдер, Ч. Кертисс, Р. Берд. Пер. с англ. Под ред. Е.В. Ступоченко. — М.: Издательство иностранной литературы, 1961. — 932С.

- [8] *Venkatesan, S.P.* Modeling of silicon etching in  $CF_4/O_2$  and  $CF_4/H_2$  plasmas / S.P. Venkatesan, I. Trachtenberg, Th.F. Edgar // Journal of the electrochemical society. – 1990. – Vol.137. – №7. – P.2280-2290.
- [9] *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики / Н.Н. Яненко. – Новосибирск: Наука, 1967. – 196С.
- [10] *Scharfetter, D.L.* Large-signal analysis of a silicon read diode oscillator / D.L. Scharfetter, H.K. Gummel // IEEE Transactions on electron devices. – 1969. – Vol.ED-16. – P.64-77.
- [11] *Бакланов, М.Р.* Влияние массопереноса на равномерность травления в планарном реакторе / М.Р. Бакланов, Ю.Н. Григорьев, С.В. Мелешко, В.Г. Плюхин // Поверхность. Физика, химия, механика. – 1992. – №12. – С.61-69.
- [12] *Dalvie, M.* Modelling of reactors for plasma processing. I. Silicon etching by  $CF_4$  in radial flow reactor / M. Dalvie, K.F. Jensen, D.B. Graves // Chemical engineering science. – 1986. – Vol.41. – P.653-660.
- [13] *Park, Sang-Kyu* A mathematical model for etching of silicon using  $CF_4$  in a radial flow plasma reactor / Sang-Kyu Park, D.J. Economou // Journal of the electrochemical society. – 1991. – Vol.138. – №5. – P.1499-1508.
- [14] *Mogab, C.J.* Plasma etching of  $Si$  and  $SiO_2$  – The effect of oxygen additions to  $CF_4$  plasmas / C.J. Mogab, A.C. Adams, D.L. Flamm // Journal of applied physics. – 1978. – Vol.49. – №7. – P.3796-3803.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

### Монография:

- [1] *Grigoryev, Yu.N.* Numerical simulation of plasma-chemical processing semiconductors / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Micro electronic and mechanical systems. Ed. by Kenichi Takahata. – 2009. – InTech. ISBN 978-953-307-027-8. DOI:10.5772/7012. – P.185-210.

### Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК России:

- [2] *Григорьев, Ю.Н.* Численная оптимизация планарных реакторов индивидуального плазмохимического травления / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 1996. – №2. – С.47-63.
- [3] *Григорьев, Ю.Н.* Численная оптимизация плазмохимического реактора / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Вычислительные технологии. – 1997. – Т.2. – №6. – С.12-23.
- [4] *Григорьев, Ю.Н.* Эффекты неизотермичности в плазмохимическом реакторе травления / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Микроэлектроника. – 1998. – Т.27. – №4. – С.294-303.
- [5] *Григорьев, Ю.Н.* Оптимизация состава смеси для травления  $Si$  в  $CF_4/O_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Вычислительные технологии. Спец. вып. – 2001. – Т.6. – Часть 2. – С.217-224.

- [6] *Григорьев, Ю.Н.* Численное моделирование плазмохимических реакторов / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Вычислительные технологии. Спец. вып. — 2003. — Т.8. — Часть 2. — С.53-73
- [7] *Григорьев, Ю.Н.* Особенности интенсификации травления кремния в  $CF_4/O_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Микроэлектроника. — 2007. — Т.36. — №5. — С.368-379.
- [8] *Горобчук, А.Г.* Влияние ВЧ-разряда на процесс плазмохимического травления кремния в  $CF_4/O_2$  / А.Г. Горобчук, Ю.Н. Григорьев // Вычислительные технологии. — 2007. — Т.12. — №5. — С.51-66.
- [9] *Григорьев, Ю.Н.* Моделирование плазмохимической технологии травления в ВЧ разряде / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Проблемы разработки перспективных микро- и нанoeлектронных систем-2012. Сборник трудов / под общ. ред. академика РАН А.Л. Стемпковского. — М.:ИППМ РАН, 2012. — С.217-220.
- [10] *Григорьев, Ю.Н.* Влияние структуры ВЧ-разряда на неоднородность травления в плазмохимическом реакторе / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Микроэлектроника. — 2013. — Т.42. — №6. — С.454-462.
- [11] *Григорьев, Ю.Н.* Численная модель ВЧ-разряда в плазмохимическом реакторе / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Вычислительные технологии. — 2013. — Т.18. — №5. — С.58-73.
- [12] *Горобчук, А.Г.* Об одной численной схеме экспоненциальной подгонки для решения уравнений высокочастотного разряда в гидродинамическом приближении / А.Г. Горобчук // Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика. — 2014. — №3(29). — С.65-74.
- [13] *Григорьев, Ю.Н.* Моделирование плазмохимической технологии травления кремния в смеси  $CF_4/H_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Проблемы разработки перспективных микро- и нанoeлектронных систем-2014. Сборник трудов / под общ. ред. академика РАН А.Л. Стемпковского. — М.:ИППМ РАН, 2014. — Часть II. — С.137-140.
- [14] *Григорьев, Ю.Н.* Моделирование процесса полимеризации поверхности кремния при плазмохимическом травлении в  $CF_4/H_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2015. — №2. — С.81-86.
- [15] *Горобчук, А.Г.* Моделирование полимеризации поверхности кремния в плазме  $CF_4/H_2$  / А.Г. Горобчук // Известия высших учебных заведений. Физика. — 2015. — Т.58. — №9/3. — С.88-91.

#### **Публикации в прочих изданиях:**

- [16] *Григорьев, Ю.Н.* Управление однородностью травления в планарном плазмохимическом реакторе / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Вычислительные технологии. Сборник научных трудов. — 1995. — Т.4. — №12. — Новосибирск: ИВТ СО РАН. — С.87-98.



- [17] Григорьев, Ю.Н. Численная оптимизация плазмохимических реакторов травления с учетом неизотермичности / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Труды III Минского международного форума по тепломассообмену. Тепломассообмен-ММФ-96. 20-24 мая 1996г., Минск, Беларусь. — 1996. — Минск. — Т.3. — С.3-7.
- [18] Grigoryev, Yu.N. Numerical investigation of etching mechanisms in planar plasma-chemical reactors with heat-mass transfer / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of the 8 International conference on the methods of aerophysical research. September 2-6, 1996, Novosibirsk, Russia. — 1996. — Novosibirsk: ITAM SB RAS. — Part 2. — P.89-94.
- [19] Grigoryev, Yu.N. Numerical simulation of plasma-chemical etching reactors / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 21 International conference on microelectronics (MIEL-97). September 14-17, 1997, Nis, Yugoslavia. — 1997. — IEEE. — Vol.2. — P.485-488.
- [20] Grigor'ev, Yu.N. Nonisothermality effects in a plasma-chemical reactor / Yu.N. Grigor'ev, A.G. Gorobchuk // Russian microelectronics. — 1998. — Vol.27. — №4. — P.250-258.
- [21] Grigoryev, Yu.N. Advanced numerical models of plasma-chemical etching of silicon / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of the sixth Japan — Russia joint symposium on computational fluid dynamics. September 21-23, 1998, Nagoya University, Nagoya, Japan. — 1998. — P.68-71.
- [22] Shokin, Yu.I. Advanced optimization of etching processes in radial flow plasma-chemical reactor / Yu.I. Shokin, Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 8th International symposium on computational fluid dynamics (ISCFD-99). September 5th-10th, 1999, Bremen, Germany. — 1999. — University of Bremen.
- [23] Grigoryev, Yu.N. Peculiarities of  $Si$  films etching in  $CF_4$  parent gas / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 22 International conference on microelectronics (MIEL-2000). May 14-17, 2000, Nis, Yugoslavia. — 2000. — IEEE. — Vol.1. — P.289-292.
- [24] Григорьев, Ю.Н. Оптимизация скорости травления в плазмохимическом реакторе по составу исходной смеси  $CF_4/O_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Труды Международной конференции "Математические модели и методы их исследования". 16-21 августа 2001 г., Красноярск, Россия. — 2001. — Красноярск. — Т.1. — С.191-197.
- [25] Grigoryev, Yu.N. Numerical modeling of heat-mass transfer in radial flow plasma-chemical reactor with multicomponent kinetics  $CF_4/O_2$  / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // International conference on the methods of aerophysical research: Proc. July 1-7, 2002, Novosibirsk, Russia. — 2002. — Novosibirsk: Publishing House "Nonparel". — Pt. 1. — P.91-96.
- [26] Grigoryev, Yu.N. Numerical modeling of silicon etching in  $CF_4/O_2$  plasma-chemical system / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 24th International conference on microelectronics (MIEL-2004). May 16-19, 2004, Nis, Serbia and Montenegro. — 2004. — IEEE. — Vol.2 — P.475-478.

- [27] *Grigoryev, Yu.N.* Physical-chemical hydrodynamics and optimization of plasma-chemical reactors for silicon etching / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // International conference on the methods of aerophysical research: Proc. 28 June - 3 July, 2004, Novosibirsk, Russia. – 2004. – Novosibirsk: Publishing House "Nonparel". – Pt. II. – P.83-88.
- [28] *Grigoryev, Yu.N.* Numerical simulation of plasma-chemical reactors / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Notes on numerical fluid mechanics and multidisciplinary design. Computational science and high performance computing. Eds. Egon Krause, Yurii I. Shokin, Michael Resch, Nina Shokina. – 2005. – Springer. Germany. – Vol.88 – P.229-251.
- [29] *Grigoryev, Yu.N.* Numerical investigation of  $O_2$  adsorption in  $Si - CF_4/O_2$  system / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 25th International conference on microelectronics (MIEL-2006). May 14-17, 2006, Belgrade, Serbia and Montenegro. – 2006. – IEEE. – Vol.2 – P.537-540.
- [30] *Grigor'ev, Yu.N.* Specific features of intensification of silicon etching in  $CF_4/O_2$  plasma / Yu.N. Grigor'ev, A.G. Gorobchuk // Russian microelectronics. – 2007. – Vol.36. – №.5. – P.321-332.
- [31] *Grigoryev, Yu.N.* Peculiarities of silicon etching intensification in  $CF_4/O_2$  plasma / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Int. conf. on the methods of aerophysical research: Proc. / Ed. V.M. Fomin. February 5 - 10, 2007. Novosibirsk, Russia. – 2007. – Novosibirsk: Publishing House "Parallel". – Pt. III. – P.129-134.
- [32] *Grigoryev, Yu.N.* Effect of  $O_2$  admixture: competition of electron density and etching rate in  $CF_4/O_2$  plasma-etching process / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 26th International conference on microelectronics (MIEL-2008). 11-14 May 2008, Belgrade, Serbia and Montenegro. – 2008. – IEEE. – Vol.1. – P.205-208.
- [33] *Grigoryev, Yu.N.* Effect of electron density in RF-discharge on etching rate in plasma-chemical reactor / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings 2008 IEEE Region 8 International conference on computational technologies in electrical and electronics engineering (SIBIRCON-2008). July 21-25, 2008, Novosibirsk, Russia. – 2008. – IEEE. – P.322-327.
- [34] *Grigoryev, Yu.N.* Electron density effect on etching rate in plasma-chemical reactor / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // International conference on the methods of aerophysical research: Proc. / Ed. V.M. Fomin. June 30 - July 6, 2008. Novosibirsk, Russia. – 2008. – Novosibirsk: ITAM SB RAS.
- [35] *Grigoryev, Yu.N.* Effect of RF discharge structure on silicon etching in  $CF_4/O_2$  / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings of 27th International conference on microelectronics (MIEL-2010). 16-19 May 2010, Nis, Serbia. – 2010. – IEEE. – P.135-138.
- [36] *Grigoryev, Yu.N.* Development of plasma-chemical etching model based on numerical simulation of RF-discharge / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Int. conf. on the methods of aerophysical research: Proc. / Ed. V.M. Fomin. 1-6 November 2010. Novosibirsk, Russia. – 2010. – Novosibirsk: ITAM SB RAS.

- [37] *Grigoryev, Yu.N.* Effect of RF discharge structure on etching rate in plasma-chemical reactor / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Proceedings 2010 IEEE Region 8 International conference on computational technologies in electrical and electronics engineering (SIBIRCON-2010). July 11-15, 2010, Irkutsk, Listvyanka, Russia. — 2010. — IEEE. — P.542-545.
- [38] *Григорьев, Ю.Н.* Массоперенос активных частиц в плазмохимическом реакторе травления с многокомпонентной кинетикой и неоднородным ВЧ разрядом / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // Фундаментальные и прикладные проблемы современной механики: Сборник материалов конференции. — 2011. — Томск: ТГУ. — С.441-442.
- [39] *Григорьев, Ю.Н.* Моделирование процесса плазмохимического травления кремния в ВЧ разряде  $CF_4/O_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // VI Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии. 5-9 сентября 2011 г., Иваново, Россия. Сборник трудов / Иван. гос. хим.-технол. ун-т. — Иваново, 2011. — С.181-184.
- [40] *Grigoryev, Yu.N.* Numerical modeling of two RF discharge structure in plasma-chemical etching reactor / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // X International IEEE siberian conference on control and communications (SIBCON-2013). September 12-13, 2013, Krasnoyarsk, Russia. — 2013. — IEEE.
- [41] *Grigoryev, Yu.N.* Numerical modeling of plasma-chemical etching technology in  $CF_4/H_2$  gas mixture / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Int. conf. methods of aerophysical research: Proc. / Ed. V.M. Fomin. June 30 - July 6, 2014, Novosibirsk, Russia. — Novosibirsk: Inst. theor. and appl. mech. SB RAS, 2014. URL: [http://www.itam.nsc.ru/users/libr/eLib/confer/ICMAR/2014/pdf/GrigoryevGorobchuk\\_41.pdf](http://www.itam.nsc.ru/users/libr/eLib/confer/ICMAR/2014/pdf/GrigoryevGorobchuk_41.pdf)
- [42] *Григорьев, Ю.Н.* Моделирование плазмохимического травления кремния в смеси  $CF_4/H_2$  / Ю.Н. Григорьев, А.Г. Горобчук // VII Международный симпозиум по теоретической и прикладной плазмохимии. 3-7 сентября 2014 г., Плес, Россия. Сборник трудов / Иван. гос. хим.-технол. ун-т. — Иваново, 2014. — С.164-167.
- [43] *Grigor'ev, Yu.N.* Effect of HF discharge structure on etch nonuniformity in plasma-chemical reactor / Yu.N. Grigor'ev, A.G. Gorobchuk // Russian microelectronics. — 2014. — Vol.43. — №.1. — P.34-41.
- [44] *Grigoryev, Yu.N.* Simulation of the polymerization process on a silicon surface under plasma-chemical etching in  $CF_4/H_2$  / Yu.N. Grigoryev, A.G. Gorobchuk // Journal of surface investigation. X-ray, synchrotron and neutron techniques. — 2015. — Vol.9. — Issue 1. — P.184-189.
- [45] *Gorobchuk, A.G.* Numerical modeling of silicon processing technology in  $CF_4/H_2$  plasma / A.G. Gorobchuk // Int. siberian conf. on control and communications (SIBCON-2015). May 21-23, 2015, Omsk, Russia. — 2015. — IEEE.
- [46] *Gorobchuk, A.G.* Numerical model of plasma-chemical etching of silicon in  $CF_4/H_2$  plasma / A.G. Gorobchuk // Communication in computer and information science. — 2015. — Vol.549. — P.44-52.