

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Горобчука Алексея Геннадьевича

«Математическое моделирование плазмохимических технологий микроэлектроники»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности 05.03.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Актуальность темы диссертации

В газоразрядной плазме пониженного давления образуется целый ряд частиц, обладающих повышенной химической активностью. Химические реакции этих частиц (свободных атомов, радикалов, ионов) с обрабатываемым материалом, сопровождающиеся образованием газообразных продуктов, и представляют собой процесс плазмохимического травления - ПХТ. Этот процесс получил широкое распространение в производстве изделий микроэлектроники. При плазмохимическом травлении происходит удаление поверхностных слоев материала, причем процесс может дополнительно стимулироваться нагреванием твердого тела, электронной и ионной бомбардировкой, излучением плазмы. Процесс может сопровождаться распылением мишени, проникновением ионов (имплантацией) в образец, нарушением структуры поверхностного слоя, многостадийными объемными и гетерогенными реакциями. Для получения качественного изделия требуется обеспечить однородность процесса травления, однако, большое число технологических параметров, взаимосвязь разных факторов, токсичность используемых газов и др. создают проблемы в изучении комплекса явлений. Выделить определяющие факторы экспериментально – весьма затруднительно. В связи с этим использование математического моделирования как инструмента исследования технологического процесса является перспективным, а задача разработки математических моделей плазмохимических технологий *является актуальной*.

Новизна проведенных исследований и полученных результатов

Диссертационная работа состоит из пяти глав, списка основных обозначений, предисловия, введения и заключения и списка литературы.

Предисловие содержит общую характеристику работы и описание структуры диссертационного исследования.

Во введении представлен обзор известных исследований по численному моделированию процессов ПХТ, применяемых в микроэлектронике. В разделе 1 Введения описаны наиболее популярные кинетические схемы (модели химической кинетики) процесса травления для двух, трех- и четырехкомпонентных моделей газовых смесей. Наборы химических реакций различны в зависимости от состава газа и обрабатываемого образца. Модели для многокомпонентных сред выделены в отдельный раздел, описаны различные упрощения и имеющиеся проблемы в определении параметров реакций, отмечены особенности в моделировании ПХТ кремния и оксида кремния. Автор отмечает, что пренебрежение теми или иными реакциями при моделировании может привести к серьезным ошибкам. В разделе 2 указывается, что при описании гидродинамики в плазмохимическом реакторе долгое время преобладали изотермические приближения. Отмечено, что одномерные модели часто используются при сложной кинетической схеме, в то время как модели, основанные на уравнениях Навье-Стокса, содержат упрощенные реакционные схемы. Подчеркивается, что необходимо учитывать тепловыделение в объем и на поверхностях плазмохимического реактора, а также зависимости вязкости, теплоемкости, теплопроводности, поглощательной способности среды, коэффициентов диффузии от температуры, диффузионный, конвективный и термодиффузионный механизмы переноса. В разделе 3 введения описываются численные методы, используемые разными авторами при моделировании ПХТ. Указывается, что наиболее эффективными в этой области являются конечно-разностные методы. Описываются особенности моделирования ВЧ-разряда в гидродинамическом приближении. На основе анализа литературы автор намечает цели и задачи исследования.

В первой главе диссертации дано описание основных уравнений, входящих в общую модель технологии ПХТ. Эта модель включает уравнения Навье-Стокса в приближении Буссинеска; Записывая их сразу в безразмерной форме, автор затем переводит систему к переменным «функции тока - вихрь». Распределение температуры находится из уравнения теплопроводности, также записанного в цилиндрической системе координат и содержащего дивергенцию плотности радиа-

ционного потока тепла. Расчету радиационного потока автор уделяет особое внимание. Для расчета теплового излучения автором предложена *оригинальная методика*, дающая хорошее согласие с экспериментальными данными. Распределения концентраций реагентов автор предлагает находить из системы уравнений конвективно-диффузионного переноса, содержащих нелинейные источники и стоки компонентов вследствие химических реакций. Выражения для скоростей реакций записываются на основе закона действующих масс. В уравнениях учитываются диффузия и термодиффузия. В разделе 1.2. представлены всевозможные химические реакции, которые в различных комбинациях участвуют при построении редуцированных моделей. Раздел 1.3. содержит информацию о гидродинамическом приближении, используемом при моделировании ВЧ – разряда. Уравнения для потоков ионов и электронов включают диффузионное слагаемое и слагаемое, отвечающие за перенос под действие градиента электрического потенциала.

Предложенная обобщенная модель соответствует современным тенденциям в области моделирования ПХТ.

Во второй главе диссертации описываются разностные схемы и численные алгоритмы, использованные автором при численной реализации моделей. В разделе 2.1 представлена неявная конечно-разностная схема стабилизирующей поправки, используемая для решения уравнений многокомпонентной гидродинамики. Для интегрирования уравнений ВЧ – разряда на основе метода экспоненциальной подгонки предложена безусловно монотонная разностная схема (раздел 2.2.). Получаемые в итоге системы алгебраических уравнений решаются итерационным методом Гаусса-Зейделя. Раздел 2.3. посвящен описанию эффективных параллельных алгоритмов, предложенных для ускорения вычислений. Для решения диффузионно-кинетических уравнений используется покомпонентное распараллеливание. При распараллеливании расчетов ВЧ – разряда используется декомпозиция расчетной области.

В третьей главе диссертации на примере модели для бинарной смеси анализируются физические эффекты, оказывающие существенное влияние на процесс ПХТ. В разделе 3.1. описана конструкция ПХР и даны основные технические характеристики реакторов. Процесс ПХТ моделируется в изотермическом приближении: температура берется равной средней температуре по объему реактора. Распределение концентрации фтора рассчитывается из единственного диффузионно-кинетического уравнения. Эффекты неизотермичности (раздел 3.2) анализируются при задании температуры на поверхности электродов и детали. Модель химической кинетики расширена за счет включения газофазных реакций рекомбинации атомарного фтора.

В каждой из редуцированных моделей формулируются граничные условия, описываются способы расчета входящих в модели параметров. Для характеристики качества обработки поверхности вычисляются показатель неоднородности травления. Анализируется гидродинамическая картина течения и распределение концентрации фтора для реакторов двух типов. В разделе 3.3. описываются особенности моделирования ПХТ при пониженном давлении. Эффекты разреженности плазмы учитываются в новом граничном условии. В результате автором выявлено, что в диапазоне рабочих давлений 0.01 ÷ 1.0 торр неоднородность травления определяется диффузией и термодиффузией активной компоненты к поверхности образца и стенками реактора, а также кинетикой поверхностных реакций. Показано, что кольцевой протектор оптимальных размеров позволяет минимизировать неоднородность травления; структура течения определяется вынужденной конвекцией. В исследованном диапазоне давления выявлены области преимущественных механизмов переноса. Определены зависимости скорости и неоднородности травления от технологических параметров. Результаты исследования *являются новыми*.

Четвертая глава диссертации содержит результаты численного моделирования технологии ПХТ кремния в низкотемпературной плазме SF_4 и его смесях с O_2 и H_2 . Расчеты для многокомпонентной смеси выполнены на основе модели, описанной в главе 2, с учетом всех основных процессов теплопередачи. В разделе 4.1. показано, что выбор модели химической кинетики для описания процесса травления кремниевых образцов в плазме тетрафторида углерода существенно влияет на результат. С усложнением кинетики концентрация фтора и скорость травления изменяются. Однако, зависимости средних концентраций фтора и скорости спонтанного травления от температуры образца имеют универсальный вид. В разделах 4.2. и 4.3 численно исследованы различные физические явления, происходящие в газовой фазе и на поверхности кремниевого образца в распространенных газовых смесях SF_4 и кислорода, SF_4 и водорода. Первая модель содержала 16 газофазных реакций, вторая – 28. Проанализирована возможность оптимизации скорости травления по составу бинарной смеси. Как и выше, представлены все параметры моделей и способы их расчета, описаны структура течения и характеристики теплообмена. Изучены распределение

концентрации фтора и распределения массовых потоков вследствие разных механизмов переноса. Полученные результаты в модели многокомпонентной кинетики согласуются с известными экспериментальными данными. Результаты исследования также *являются новыми*

В пятой главе изучается влияние характеристик ВЧ – разряда на процесс ПХТ кремния в смеси CF_4 с кислородом. Проанализировано влияние снижения плотности первичных электронов на эффективность диссоциации исходной газовой смеси. Показано, что понижение средней плотности электронов может существенно снизить скорость травления. Исследовано влияние структуры ВЧ – разряда, рассчитанное с применением различных подходов, на качественные характеристики травления кремниевых образцов.

Результаты получены автором лично или при его определяющем участии в разработке моделей, создании алгоритмов и компьютерных кодов, выборе методов исследования, анализе результатов и подготовке статей.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов, рекомендаций и заключений

Изложенные в диссертационном исследовании положения, выводы и рекомендации являются достоверными. Достоверность основывается на применении хорошо обоснованных физико-математических моделей ПХТ и на тщательном тестировании предложенных и реализованных численных алгоритмов, исследовании сходимости и устойчивости.

Значимость результатов, полученных в диссертации, для науки и практики

Предложенные в работе модели и результаты могут найти применение при проектировании плазмохимических реакторов, для выбора оптимальных режимов имеющихся промышленных реакторов. Модель может служить основой для поиска новых способов управления процессами ПХТ.

Замечания по диссертационной работе

1. В работе не представлены основные уравнения в физических переменных, что затрудняет анализ модели и вызывает ряд вопросов. Так, переход к безразмерным переменным, тем более для моделей, содержащих множество характерных масштабов, задача нетривиальная. Однако автор не уделил внимание этой проблеме. С чем связан выбор автором тех или иных масштабов? Привело ли это к упрощению модели или к минимизации числа параметров, влияние которых необходимо изучить? Чем вызвана необходимость использования в уравнениях для компонентов, участвующих в реакциях, двух видов концентраций (стр. 79) – размерной и безразмерной?
2. В уравнении теплопроводности (стр.75) отсутствуют источники (стоки) тепла, связанные с объемными реакциями и вязкой диссипацией. Во введении автор утверждал, что необходимо учитывать тепловые эффекты реакций. Почему нельзя учесть нагрев поверхности ионной бомбардировкой и тепловыделение вследствие гетерогенных реакций явно (стр.150)? Как связаны температуры T_2 и T_{w2} с теплотами реакций?
3. Реакции диссоциации следует приводить с указанием заряда ионов, у радикалов и активных частиц необходимо указывать соответствующие обозначения (\bullet , $*$) – стр.82-84. В противном случае не ясно, какими уравнениями описывается поведение частиц. Например, в плазме могут существовать и атомы кислорода, и ионы. Реакции образования ионов из нейтральных атомов в работе не выделены. Зависят ли константы скоростей газофазных реакций от температуры (стр.215, 239)? Для удобства в работе следовало бы указать, какой номер i к какому из компонентов смеси относится, например, можно было представить соответствующую таблицу.
4. Имеются вопросы к описанию процессов переноса. Почему подвижности и коэффициенты диффузии считаются независимыми параметрами (например, стр.86)? Почему в уравнениях для ионов не учитывается термодиффузия? Какие основания имеются для пренебрежения перекрестными диффузионными потоками по сравнению с термодиффузией?
5. Для удобства можно было бы сопроводить словесное описание численных алгоритмов условными блок-схемами. Не наблюдается ли изменений в решениях при переходе к параллельным алгоритмам? Можно ли это продемонстрировать хотя бы на простых примерах? Например, декомпозиция расчетной области на подобласти связана с передачей данных между областями с разными разностными сетками, что сопровождается интерполяцией промежуточных результатов. Не приводит ли это к искажению решения в данной задаче? Для параллельного решения диффузион-

но-кинетических уравнений на разных процессорах такой вопрос не возникает, если не учитываются перекрестные диффузионные потоки.

6. Каким образом (из каких физических соображений) определяются коэффициент аккомодации (стр.168-169), коэффициенты прилипания (стр.181)?

7. Каким образом в модели учитываются толщины адсорбционных слоев и изменение размеров обрабатываемой детали в процессе травления (стр.213) или в процесс образования полимерной пленки (раздел 4.3)?

8. В работе довольно много грамматических и стилистических (постоянно повторяющихся, в том числе) ошибок. Например, следует писать «компонентов смеси», а не «компонент смеси», «условия для температуры и концентраций на границе...», а не условия на температуру и концентрацию», «скачок» вместо «скачек» (по всей диссертации) и т.п.

Общая характеристика диссертационной работы

В целом, несмотря на вопросы и отмеченные замечания, диссертация имеет высокий научный уровень и представляет собой законченную научно- квалификационную работу, выполненную на актуальную тему, связанную с разработкой моделей плазмохимических технологий, методов их численной реализации и изучением процессов плазмохимического травления для разных технологических ситуаций.

Результаты диссертационной работы, выносимые на защиту, получены при поддержке Различных грантов РФФИ и программ Перезидента РФ, прошли достаточную апробацию на научных конференциях различного ранга и опубликованы в 80 научных работах соискателя, включая главу в монографии и 14 статей в изданиях, рекомендованных ВАК.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость полученных результатов считаю, что диссертация Горобчука Алексея Геннадьевича «Математическое моделирование плазмохимических технологий микроэлектроники» на соискание ученой степени доктора наук удовлетворяет всем требованиям ВАК, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени по специальности 05.03.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программа.

Официальный оппонент

д.ф.-м.н., профессор кафедры Физики высоких технологий в машиностроении Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», 634050, г. Томск, проспект Ленина, д. 30,
тел. (38-22) 60-63-33,
e-mail: tpu@tpu.ru,
web-сайт: <http://tpu.ru/>,

23 января 2017г.

Князева Анна Георгиевна

Ученый секретарь
Ученого совета ТПУ

О.А. Ананьева

