

3. Воинов О. В. Нелинейная теория динамики вязкой жидкости со свободной границей в процессах смачивания твердого тела // Межд. конф. «Задачи со свободными границами в механике сплошной среды». — Новосибирск, 1991.
4. Voinov O. V. Nonlinear theory of dynamics of a viscous fluid with a free boundary in the process of a solid body wetting // Int. Ser. Numer. Math.— Basel: Birkhäuser Verlag, 1992.— V. 106.— P. 351—358.
5. Воинов О. В. Гидромеханика капиллярных явлений при движении контакта трех фаз по твердой поверхности // VIII Всесоюз. съезд по теорет. и прикл. механике.— М., 1991.
6. Dussan V. E. B. On the spreading of liquids on a solid surfaces: static and dynamic contact lines // Ann. Rev. Fluid Mech.— 1979.— V. 11.— P. 371—400.
7. Пухначев В. В., Солонников В. А. К вопросу о динамическом краевом угле // ПММ.— 1982.— Т. 46, вып. 6.— С. 961—971.
8. Мидлман С. Течение полимеров.— М.: Мир, 1971.
9. Johnson G. C. Flow characteristics of linear, end — blocked dimethylpolysiloxane fluids // J. Chem. Eng. Data.— 1961.— V. 6, N 2.— P. 275.
10. Флори П. Статистическая механика цепных молекул.— М.: Мир, 1971.
11. Воинов О. В. Гидродинамическая теория смачивания.— Новосибирск, 1988.— (Препр./ИТ СО АН СССР; № 179—88).
12. Воинов О. В. Асимптотика свободной поверхности вязкой жидкости при ползущем движении и зависимость краевого угла смачивания от скорости // ДАН СССР.— 1978.— Т. 243, № 6.— С. 1422—1425.
13. Hoffman R. L. A study of advancing interface. I. Interface shape in liquid-gas systems // J. Colloid and Interface Sci.— 1975.— V. 50.— P. 228.
14. Железный Б. В. Экспериментальное исследование динамического гистерезиса краевого угла // ДАН СССР.— 1972.— Т. 207, № 3.— С. 647—650.

г. Тюмень

Поступила 8/II 1993 г.

УДК 537.525

*В. А. Швейгерт, М. И. Жиляев, И. В. Швейгерт*

### МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОСИЛАНОВОЙ ПЛАЗМЫ ВЧ-РАЗРЯДА

Численными методами исследуется моносилановая плазма ВЧ-разряда. Проводится сравнение результатов расчетов кинетики электронов методом Монте-Карло и расчетов в гидродинамическом приближении. Показано, что гидродинамическая модель хорошо работает во всем диапазоне параметров плазмохимического реактора, используемого для осаждения пленок аморфного кремния. В рамках гидродинамического приближения исследуются зависимости от мощности разряда и давления в реакторе важных для осаждения параметров плазмы, таких как частота диссоциации моносилана, энергия и поток ионов на электроды.

1. Введение. Интерес к моносилановой ( $\text{SiH}_4$ ) плазме тлеющего разряда, возникающей в плазмохимических реакторах низкого давления при осаждении тонких пленок гидрогенизированного аморфного кремния ( $\alpha\text{-Si:H}$ ), определяется широким применением этих пленок в качестве технологического материала в микроэлектронике. Для организации стимулированного плазмой осаждения из газовой фазы (PECVD) тонких пленок  $\alpha\text{-Si:H}$  чаще всего используют планарные плазмохимические реакторы с двумя параллельными электродами (diode geometry [1]). Смесь газов подается обычно через отверстие в верхнем электроде, пластина располагается на нижнем (заземленном) электроде. Характерные параметры существующих установок: частота приложенного напряжения  $f = 13,6$  МГц, давление газа  $p = 13,3\text{—}133,3$  Па, межэлектродное рас-

стояние  $D = 1-5$  см, радиус электродов  $R = 5-15$  см, поток газа  $Q = 10-500$  см<sup>3</sup>/мин при атмосферном давлении, удельная мощность разряда  $W = 0,01-1$  Вт/см<sup>2</sup>.

Оптимизация условий осаждения для получения пленок с заданными свойствами — основная задача как многочисленных экспериментальных работ, так и разнообразных модельных исследований в этом направлении [1]. Для заданной конструкции реактора оптимизация означает выбор параметров осаждения (удельная мощность разряда, давление в камере, температура подложки, поток газа через реактор), обеспечивающих осаждение пленки нужного качества с приемлемой скоростью и однородностью роста.

Условно весь сложный комплекс физико-химических превращений, происходящих в плазмохимическом реакторе, можно свести к трем основным стадиям: 1) генерация в разряде радикалов и ионов за счет неупругих взаимодействий электронов с молекулами и атомами исходной смеси, 2) происходящие на фоне конвективно-диффузионного переноса гомогенные реакции между образовавшимися радикалами, ионами и молекулами исходной смеси (химическая кинетика в объеме), 3) кинетика адсорбированных на поверхности растущей пленки активных частиц (химическая кинетика на поверхности). От модели ВЧ-разряда, описывающей первую стадию превращений, требуется надежное предсказание таких важных для процесса осаждения характеристик, как частота диссоциации силана, энергия и поток ионов на поверхность растущей пленки.

Наиболее полная модель плазмохимического осаждения аморфного кремния из SiH<sub>4</sub> представлена в [4-7], где достаточно основательно проработаны части модели, описывающие химическую кинетику в объеме и на поверхности, электронная кинетика же ВЧ-разряда моделировалась методом Монте-Карло с использованием модельного распределения электрического поля, т. е. решалась несамосогласованная задача.

Возможность и достаточность гидродинамического приближения для описания ВЧ-разряда в указанном выше диапазоне параметров неоднократно (в частности, для электроотрицательных газов типа SF<sub>6</sub>, Cl<sub>2</sub>, применяемых при травлении) обсуждалась в литературе [3, 11, 12]. При низких давлениях ( $p \approx 13,3$  Па) не все условия, формально ограничивающие применимость гидродинамического приближения, можно считать выполненными. Например, длина свободного пробега электронов по отношению к упругим столкновениям  $l_e \approx 0,1$  см мала по сравнению с размером разрядного промежутка  $D$  (обычно несколько сантиметров) ( $l_e \ll D$ ), чего, однако, уже нельзя утверждать по отношению к толщине приэлектродных слоев  $D_k \approx 0,5-1$  см. При этом возникают сомнения по поводу адекватного описания в гидродинамической модели роли  $\gamma$ -электронов, эмиттированных с поверхности электродов. Строго говоря, переход к  $\gamma$ -режиму требует достаточного падения напряжения на слое, величина которого зависит от вкладываемой мощности. Известно, что  $\alpha$ -Si:H-пленки хорошего качества растут при умеренных энерговкладах ( $W \leq 0,1$  Вт/см<sup>2</sup>), но, как показывают результаты расчетов, например, при  $W = 0,1$  Вт/см<sup>2</sup>,  $p = 13,3$  Па,  $D = 4$  см падение напряжения на слое (толщина которого составляет  $D_k \approx 1$  см) достаточно большое ( $\approx 200$  В). Чтобы избежать указанного недостатка по отношению к  $\gamma$ -электронам, в предлагаемой ниже гидродинамической модели рассматриваются две группы электронов.

С целью разрешения всех других спорных вопросов о применимости гидродинамического приближения конкретно для SiH<sub>4</sub>-плазмы в указанном выше диапазоне параметров специально для сравнения проводились расчеты электронной кинетики ВЧ-разряда методом Монте-Карло.

2. Модель. Одномерная модель ВЧ-разряда включает в себя гидродинамическое описание электронов и ионов. Для электронов решаются урав-

нения переноса концентрации и средней энергии, для положительных и отрицательных ионов — уравнения гидродинамики:

$$(2.1) \quad \frac{\partial N_e}{\partial t} - \frac{\partial (\mu_e E N_e + \partial (D_e N_e) / \partial x)}{\partial x} = (\nu_i - \nu_a) N_e + \nu_d N_n - \nu_b N_e N_p;$$

$$(2.2) \quad \frac{\partial N_e U_e}{\partial t} - \frac{\partial (\mu_u E N_e U_e + \partial (D_u N_e U_e) / \partial x)}{\partial x} = eE \left( \mu_e E N_e + \frac{\partial D_e N_e}{\partial x} \right) - \nu_u N_e U_e;$$

$$(2.3) \quad \frac{\partial N_p}{\partial t} + \frac{\partial N_p V_p}{\partial x} = \nu_i N_e N_p - \nu_b N_e N_p - \beta N_p N_n;$$

$$(2.4) \quad \frac{\partial N_n}{\partial t} + \frac{\partial N_n V_n}{\partial x} = \nu_a N N_e - \nu_d N_n - \beta N_p N_n;$$

$$(2.5) \quad \frac{\partial V_p}{\partial t} + \frac{\partial V_p^2 / 2}{\partial x} = \frac{eE}{M_p} - W_p N V_p;$$

$$(2.6) \quad \frac{\partial V_n}{\partial t} + \frac{\partial V_n^2 / 2}{\partial x} = \frac{-eE}{M_n} - W_n N V_n.$$

Распределение потенциала  $\Phi$  описывается уравнением Пуассона

$$\frac{d^2 \Phi}{dx^2} = 4\pi e (N_e + N_n - N_p), \quad E = - \frac{d\Phi}{dx}.$$

Здесь  $N_e$ ,  $N_n$ ,  $N_p$  — концентрации электронов, отрицательных и положительных ионов;  $\nu_i$ ,  $\nu_a$ ,  $\nu_d$ ,  $\nu_u$  — частоты ионизации, прилипания, отлипания и неупругого рассеяния электронов;  $\mu_e$ ,  $D_e$  — коэффициенты подвижности и диффузии электронов;  $\nu_b$ ,  $\beta$  — коэффициент электрон-ионной и ион-ионной рекомбинации;  $\mu_u$ ,  $D_u$  — коэффициенты подвижности и диффузии для  $U_e$  — средней энергии электронов;  $M_p$ ,  $M_n$ ,  $W_p$ ,  $W_n$  — массы и частоты рассеяния положительных и отрицательных ионов.

Для определения транспортных коэффициентов, фигурирующих в уравнениях (2.1), (2.2), использовалась функция распределения электронов по энергиям в однородном электрическом поле  $f_0(\epsilon)$ , которая рассчитывалась из кинетического уравнения в двучленном приближении:

$$- \frac{\partial}{\partial \epsilon} \left( \frac{2e^2 E^2 \epsilon \partial f_0}{3mN\sigma_t \partial \epsilon} \right) = \text{St} \{f_0\}.$$

Здесь  $\sigma_t$  — транспортное сечение рассеяния;  $m$  — масса электрона; столкновительный член  $\text{St} \{f_0\}$  включает в себя только неупругие столкновения. Погрешность двучленного приближения в неоднородных постоянных электрических полях обсуждается в [2]. В граничных условиях к (2.1), (2.2) учтена инжекция электронов с электродов под действием ионно-электронной эмиссии [3]

$$\frac{N_e V_t}{4} - \mu_e E N_e - \frac{\partial D_e N_e}{\partial x} = \gamma N_p V_p,$$

$$\frac{N_e V_t U_e}{4} - \mu_u E N_e U_e - \frac{\partial D_u N_e U_e}{\partial x} = \gamma N_p V_p U_e,$$

где  $V_t$  — тепловая скорость электронов;  $\gamma$  — коэффициент ионно-электронной эмиссии.

Особенность предлагаемой модели состоит в том, что в ней рассматриваются две группы электронов. Одна из обоснованных претензий к общепринятой гидродинамической модели — некорректный учет вклада в процессы неупругого рассеяния в плазме высокоэнергетических  $\gamma$ -электронов. Действительно, электроны, эмиттированные с поверхности электродов, пройдя через слой практически без столкновений, могут набирать энергию порядка постоянного потенциала плазмы (это несколько десятков или даже сотен электронвольт). Обладая такой высокой энергией,  $\gamma$ -электрон способен совершить в плазме несколько актов ионизации. Однако гидродинамиче-

ская модель отбирает у него эту возможность тем, что фигурирующая в (2.2) энергия  $U_e$  усредняется по всем плазменным электронам, большая часть которых имеет энергию порядка электронной температуры, по величине значительно уступающей потенциалу плазмы (в нашем случае  $T_e \sim 1-3$  эВ).

Чтобы обойти эту несогласованность,  $\gamma$ -электроны в модели выделяются в особую группу, для которой дополнительно решаются уравнения (2.1), (2.2). Электроны, которые рождаются при ионизации с участием  $\gamma$ -электронов, обладают низкой энергией и поэтому принадлежат второй (низкотемпературной) группе электронов.

Для учета нагрева газа решается уравнение теплопроводности при постоянном давлении:

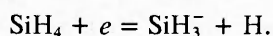
$$\frac{d\lambda (dT/dx)}{dx} = Q, \quad p = NT = \text{const.}$$

Здесь  $\lambda$  — коэффициент теплопроводности;  $Q$  — джоулев нагрев газа за счет потерь энергии ионами и электронами;  $T, N$  — температура и плотность газа. Описание численного алгоритма решения системы уравнений, а также обсуждение применимости описанной модели для моделирования ВЧ-разряда низкого давления ( $p = 13,3-133,3$  Па) в электроотрицательных газах имеются в [3].

**3. Кинетические коэффициенты. Транспортное сечение.** В расчетах использовалось транспортное сечение из [13]. Сечения упругого рассеяния электрона измерены также в [14-17]. Каждое сечение имеет минимум при энергиях 0,5 эВ и максимум при энергиях 2-5 эВ. Если отбросить одно значение сечения из [17], наиболее отличающееся, то остальные три совпадают с точностью 50 %.

*Сечение возбуждения колебательных степеней свободы.* При расчете функции распределения электронов потери энергии электронов на колебательное возбуждение рассчитывались по сечениям из [16]. Учитывались потери энергии на возбуждение двух уровней с энергетическими порогами  $\epsilon = 0,113$  и  $0,271$  эВ. Первый максимум сечения совпадает у всех авторов [13-16]. Второй максимум в [13] располагается при  $\epsilon = 2,5$  эВ, в [14-16] — при  $\epsilon = 7-8$  эВ. Расчеты с колебательными сечениями из [13] дают прекрасное совпадение с экспериментально измеренной дрейфовой скоростью.

*Сечение прилипания.* В расчетах сечение диссоциативного прилипания взято из [14]. Сечение прилипания электронов, приведенное в [17], хорошо согласуется с сечением, выбранным для расчетов. Основной канал диссоциативного прилипания

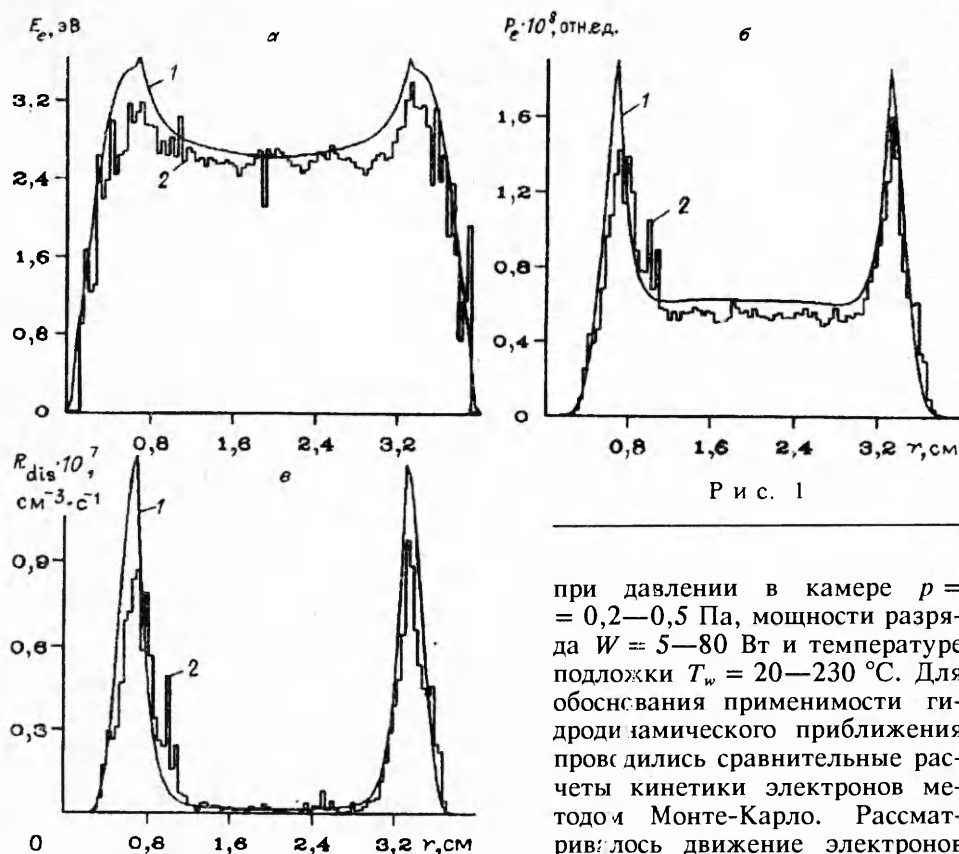


*Сечение диссоциации.* Полное сечение диссоциации силана высокоэнергетичными электронами взято из [16]. Развал молекулы силана, согласно [4, 8], происходит на 75 % с образованием  $\text{SiH}_2$  (по схемам  $\text{SiH}_4 + e = \text{SiH}_2 + \text{H}_2$ ,  $\text{SiH}_4 + e = \text{SiH}_2 + 2\text{H}$ ) и на 25 % с образованием  $\text{SiH}_3$  (по схеме  $\text{SiH}_4 + e = \text{SiH}_3 + \text{H}$ ). Пороговая энергия процесса  $\epsilon = 8,4$  эВ.

*Сечение ионизации.* Суммарное значение сечения ионизации взято из [13] и хорошо согласуется с сечением из [18]. Согласно [19], преимущественно в силане имеет место диссоциативная ионизация, а ионов  $\text{SiH}_4^+$  практически нет. Пороговая энергия процесса  $\epsilon = 11,6$  эВ.

*Сечение возбуждения вращательных степеней свободы.* Молекула  $\text{SiH}_4$  не имеет ни дипольного, ни квадрупольного момента, поэтому потери энергии на вращательное возбуждение малы [17].

**4. Результаты расчетов.** При выборе параметров расчета мы ориентировались на экспериментальную работу [18], где использовался реактор с двумя плоскопараллельными электродами  $25 \times 25$  см, с межэлектродным расстоянием  $D = 1-10$  см. Осаждение проводилось из чистого моносилана с потоком  $Q = 200$  см<sup>3</sup>/мин для атмосферного давления



Р и с. 1

при давлении в камере  $p = 0,2-0,5$  Па, мощности разряда  $W = 5-80$  Вт и температуре подложки  $T_w = 20-230$  °С. Для обоснования применимости гидродинамического приближения проводились сравнительные расчеты кинетики электронов методом Монте-Карло. Рассматривалось движение электронов в неоднородном периодическом поле, приблизительно описывающем распределение поля в ВЧ-разряде:

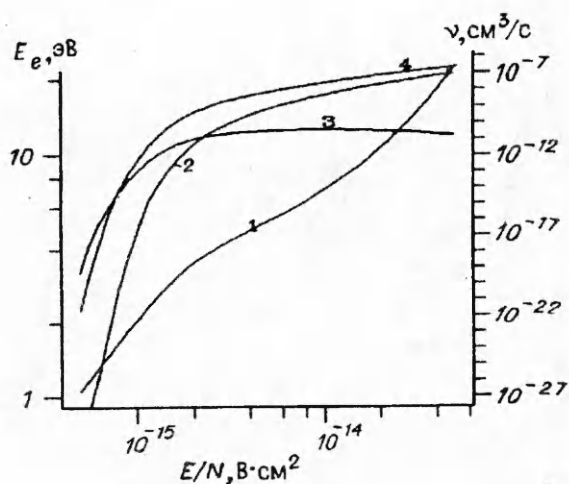
$$E(x, t) = E_s \sin(\omega t) + E_k(t) \left(1 - \frac{x}{D_k(t)}\right), \quad 0 < x < D_k,$$

$$E(x, t) = E_s \sin(\omega t), \quad D_k < x < D - D_a,$$

$$E(x, t) = E_s \sin(\omega t) - E_a(t) \left(\frac{x - D}{D_a(t)} - 1\right), \quad D - D_a < x < D.$$

Здесь  $E_k(t) = 4\pi e N_i D_k$ ,  $E_a(t) = 4\pi e N_i D_a$  — поля на электродах;  $D_k(t)$ ,  $D_a(t) = D_{\min} + 0,5(D_{\max} - D_{\min})(1 \pm \cos(\omega t))$  — толщины приэлектродных слоев;  $N_i$  — плотность ионов в слоях;  $E_s$  — напряженность поля в плазме. При заданном значении  $N_i$ , среднем потенциале плазмы относительно электрода  $U$  и температуре электронов в квазинейтральной плазме  $T_e$  параметры слоя  $D_{\min}$  и  $D_{\max}$  находились из условия, что полные токи ионов и электронов на электрод одинаковы. Напряженность поля в столбе определяется обычно балансом процессов рождения и уничтожения электронов. Кинетическое уравнение для электронов решалось методом Монте-Карло. В начальный момент времени электроны считались равномерно распределенными в пространстве между слоями.

Формальные ограничения для использования гидродинамического приближения возникают при низких давлениях. На рис. 1 представлены три важные характеристики разряда — распределения по разрядному промежутку энергии электронов  $E_e$  (а), энерговклада на один электрон  $P_e$  (б) и скорости диссоциации  $R_{\text{dis}}$  (в), рассчитанные в гидродинамическом приближении и методом Монте-Карло (линии 1, 2) для параметров, соответствующих эксперименту [18] при  $p = 13,3$  Па,  $W = 0,05$  Вт/см<sup>2</sup>,  $D = 4$  см. Хорошее совпадение всех показанных на рис. 1 зависимостей позволяет сделать вывод



Р и с. 2

о применимости гидродинамического приближения практически для всех режимов работы плазмохимического реактора, применяемых для осаждения  $\alpha$ -Si : H-пленок.

Для выяснения закономерностей изменения основных характеристик ВЧ-разряда проводились серии расчетов при разных значениях вкладываемой мощности и давления в камере реактора. Результаты расчетов представлены в табл. 1 и 2, где  $W$  — мощность разряда,  $p$  — давление в реакторе,  $D$  — зазор между электродами,  $W_e$  — доля мощности, вкладываемая в электронный компонент плазмы,  $W_i$  — доля мощности, вкладываемая в ионный компонент плазмы,  $\nu$  — усредненная частота диссоциации моносилана,  $\epsilon_i$ ,  $j_i$  — энергия и ток ионов на электродах.

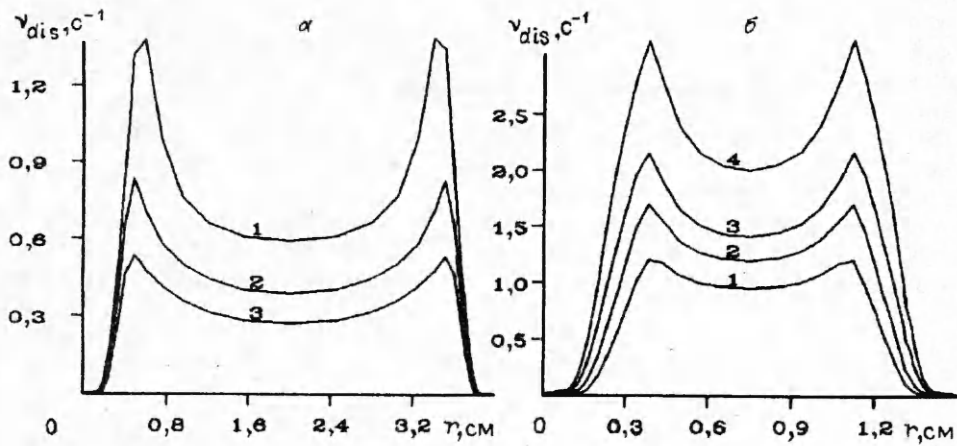
Энергия разряда, вкладываемая в ионный и электронный компоненты плазмы, расходуется в конечном счете на ионизацию и диссоциацию газа электронами, на формирование ионных потоков в приэлектродных слоях и на нагрев газа. Проанализируем поведение средней за период частоты диссоциации моносилана. На рис. 3 приведено распределение по разрядному промежутку частоты диссоциации  $\nu_{dis}$  (суммарной по всем каналам) при разных значениях давления и мощности. На рис. 3, а результаты расчетов приведены для удельной мощности разряда  $W = 0,05$  Вт/см<sup>2</sup> и межэлектрод-

Т а б л и ц а 1

$W = 0,05$ Вт/см <sup>2</sup> , $D = 4$ см					
$p$ , Па	$W_e$ , %	$W_i$ , %	$\nu$ , с <sup>-1</sup>	$\epsilon_i$ , эВ	$j_i$ , А/см <sup>2</sup>
26,7	90	10	0,68	18,5	$3 \cdot 10^{-5}$
40	95,5	4,5	0,43	9,8	$1,9 \cdot 10^{-5}$
53,3	97,3	2,7	0,3	6,5	$1,4 \cdot 10^{-5}$
66,7	98,2	1,8	0,23	4,6	$1,1 \cdot 10^{-5}$

Т а б л и ц а 2

$p = 66,7$ Па, $D = 1,5$ см					
$W$ , Вт/см <sup>2</sup>	$W_e$ , %	$W_i$ , %	$\nu$ , с <sup>-1</sup>	$\epsilon_i$ , эВ	$j_i$ , А/см <sup>2</sup>
0,05	88,3	11,7	0,69	9,3	$3,7 \cdot 10^{-5}$
0,07	85	15	0,94	11,6	$5,4 \cdot 10^{-5}$
0,09	80,7	19,3	1,2	14,2	$7,5 \cdot 10^{-5}$
0,128	73,8	26,2	1,75	18,8	$1,1 \cdot 10^{-4}$
0,2	64,4	35,6	2,7	25,6	$1,8 \cdot 10^{-4}$



Р и с. 3

ного расстояния  $D = 4$  см, кривые 1—3 соответствуют давлению  $p = 40; 53,3; 66,7$  Па, а на рис. 3, б — для  $p = 66,7$  Па,  $D = 1,5$  см, кривые 1—4 отвечают  $W = 0,05; 0,07; 0,09; 0,13$  Вт/см<sup>2</sup>. Как видно из рис. 3, а, уменьшение давления при заданной мощности приводит к увеличению частоты диссоциации. Причина этого — фактическое увеличение средней энергии электронов. С одной стороны (см. табл. 1), с уменьшением давления доля мощности, вкладываемая в электроны, падает (особенно при низких давлениях), а с другой — энергия электронов определяется балансом их рождения и гибели, в данном случае — равенством частоты ионизации и частоты диффузионного ухода на стенки. При уменьшении давления растут коэффициент амбиполярной диффузии и (чтобы скомпенсировать возрастающие диффузионные потери) частота ионизации, а это, в свою очередь, означает увеличение энергии электронов. Из рис. 2 видно, что суть предыдущих рассуждений сводится к тому, что с уменьшением давления мы фактически смещаемся в сторону больших  $E/N$  по оси абсцисс. С увеличением мощности разряда уменьшается доля энерговклада в электронный компонент плазмы, но, несмотря на это, энергия электронов возрастает, и при этом (см. табл. 2) сохраняется практически линейная зависимость усредненной по времени и по разрядному промежутку частоты диссоциации силана от мощности разряда.

Как видно из расчетов, существует неоднородность распределения по разрядному промежутку энергии электронов (рис. 1, а), что, естественно, сказывается на появлении максимумов на краях слоев в частотных характеристиках, связанных с неупругими столкновениями, таких как диссоциация (рис. 3), ионизация и др. Наличие высокоэнергетичного хвоста функции распределения электронов на границах между слоями и столбом плазмы в [4] объясняется наличием вторичных электронов и эффектом «катания на волне» («wave riding»). Проведя специальные расчеты, мы пришли к заключению, что «wave riding» — чисто модельный эффект, связанный с решением несамосогласованной задачи, как это имеет место при расчете электронной кинетики для модельного профиля электрического поля методом Монте-Карло. При согласованном расчете «качания» профилей плотности электронов и электрического поля в слоях этот эффект отсутствует. На наш взгляд, более правдоподобно звучит объяснение, в котором неоднородность нагрева электронов связывается с резким падением их плотности на границе слоев, что приводит к резкому скачку проводимости плазмы в этом месте и, следовательно, к более интенсивному джоулеву нагреву [11].

Поток высокоэнергетичных ионов на поверхность подложки, расположенной на электроде, может существенным образом повлиять на процессы роста пленки. Плохое качество пленок аморфного кремния, выращенных при больших удельных мощностях ( $\geq 0,1$  Вт/см<sup>3</sup>), принято объяснять увеличением отношения объемных концентраций радикалов  $\text{SiH}_2/\text{SiH}_3$  и небла-

гоприятной с точки зрения качества пленки поверхностной кинетикой радикалов  $\text{SiH}_2$  [4, 8, 10]. Как показывают наши расчеты (см. табл. 2), при больших мощностях возникают довольно существенные потоки ионов с энергиями, значительно превышающими энергии связи частиц в пленке ( $\text{Si—Si} \approx 3$  эВ,  $\text{Si—H} \approx 3$  эВ), которые, конечно, влияют на поверхностную кинетику, хотя механизмы этого влияния (кроме очевидной возможности травли пленки) не совсем ясны.

Проведенные численные исследования моносилановой плазмы ВЧ-разряда в диапазоне параметров, используемых при осаждении пленок аморфного кремния в плазмохимических реакторах, позволяют сделать следующие выводы.

1. Несмотря на формальные ограничения, гидродинамическое приближение хорошо описывает процессы, происходящие в плазме даже при очень низких давлениях.

2. Вкладываемая мощность идет в основном на нагрев электронов, этим объясняются увеличение скорости диссоциации  $\text{SiH}_4$  с уменьшением давления при заданной мощности и линейная связь между мощностью разряда и частотой диссоциации при заданном давлении.

3. Неоднородность распределения энергии электронов по разрядному промежутку определяется резким уменьшением плотности на границе между слоями и плазменным столбом.

4. При больших мощностях ВЧ-разряда возникают потоки высокоэнергетичных ионов на поверхность растущей пленки, что может существенно повлиять на процесс осаждения.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Luft T. Hydrogenated amorphous silicon films // *Appl. Phys. Commun.*— 1988.— V. 8(1).— P. 1.
2. Швейгерт В. А. Численное моделирование стационарной функции распределения электронов в слабоионизованном газе в неоднородных электрических полях // *ПМТФ.*— 1989.— № 5.— С. 3.
3. Швейгерт В. А. Высокочастотный разряд низкого давления в электроотрицательных газах.— Новосибирск, 1990.— (Препр./ИТПМ СО АН СССР; № 8—90).
4. Kushner M. J. On the balance between silylene and silyl radicals in rf glow discharges in silane: The effect on deposition of  $\alpha\text{-Si:H}$  // *J. Appl. Phys.*— 1987.— V. 62.— P. 2803.
5. Kushner M. J. A phenomenological model for surface deposition kinetics during plasma and sputter deposition of amorphous hydrogenated silicon // *J. Appl. Phys.*— 1987.— V. 62.— P. 4763.
6. Kushner M. J. A model for discharge kinetics and plasma chemistry during plasma enhanced chemical vapor deposition of amorphous silicon // *J. Appl. Phys.*— 1988.— V. 63.— P. 2532.
7. Kushner M. J. Mechanisms for power deposition in Ar/ $\text{SiH}_4$  capacitively coupled rf-discharges // *IEEE Trans. Plasma Sci.*— 1988.— V. PS-14, N 2.— P. 182.
8. Gallagher A. Neutral radical deposition from silane discharges // *J. Appl. Phys.*— 1988.— V. 63.— P. 2406.
9. Ross R. C., Jaklic J. Plasma polymerization and deposition of amorphous hydrogenated silicon from rf and dc silane plasmas // *J. Appl. Phys.*— 1984.— V. 55.— P. 3785.
10. Itabashi N., Nishiwaki N., Magane M. et al.  $\text{SiH}_3$  radicals density in pulsed silane plasma // *Jap. J. Appl. Phys.*— 1990.— V. 29, N 3.— P. 585.
11. Kaganovich I. D., Tsendin L. D. Model of collisional low pressure rf-discharge // *IEEE Trans. Plasma Sci.*— 1992.— V. 20, N 1.— P. 1.
12. Бойко В. В., Манкелевич Ю. А., Рахимов А. Т. и др. Численное исследование высокочастотного разряда в электроотрицательных газах низкого давления // *Физика плазмы.*— 1989.— Т. 15.— С. 218.
13. Kurachi M., Nakamura Y. Electron collision cross section for monosilane molecule // *J. Phys. D: Appl. Phys.*— 1989.— V. 22.— P. 107.
14. Hayschi M. *Swarm Studies and Inelastic Electron-Molecule collisions*/Ed. L. C. Pitchford et al.— Berlin: Springer-Verlag, 1987.
15. Jain A., Thompson D. G. Elastic, inelastic and total cross sections for x-ray and electron scattering from molecular silane // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*— 1987.— V. 20.— P. 2861.



16. Ohmori Y., Shimozuma M., Tagashira H. Boltzmann equation analysis of electron swarm behaviour in monosilane // J. Phys. D: Appl. Phys.— 1986.— V. 19.— P. 1029.
17. Mathieson K. J., Millican P. G., Walker I. S., Curtis M. G. Low-energy-electron collision cross-sections in silane // J. Chem. Soc. Faraday Trans.— 1987.— V. 1183.— P. 1041.
18. Braglia G. L., Romano L., Diligenti M. On the accuracy of experimental electron energy distributions in gases // Nuovo Cimento.— 1985.— V. B85.— P. 193.
19. Chatham H., Hils D., Robertson R., Gallagher A. Total and partial electron collisional cross sections for CH<sub>4</sub>, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, SiH<sub>4</sub> and Si<sub>2</sub>H<sub>6</sub> // J. Chem. Phys.— 1984.— V. 81.— P. 1770.

г. Новосибирск

Поступила 3/III 1993 г.

УДК 534.222 – 539.196

В. И. Грабовский, А. М. Старик

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИЗМЕНЕНИЯ ПОКАЗАТЕЛЯ ПРЕЛОМЛЕНИЯ ПРИ РЕЗОНАНСНОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ИЗЛУЧЕНИЯ С КОЛЕБАТЕЛЬНО-ВРАЩАТЕЛЬНЫМИ ПЕРЕХОДАМИ

Резонансное поглощение газом излучения может приводить, как известно, к возбуждению внутренних степеней свободы молекул, что в значительной степени определяет нелинейный отклик среды. При этом изменяются как мнимая, так и действительная часть диэлектрической проницаемости. Первая связана с коэффициентом поглощения  $k$ , а вторая — с показателем преломления  $n$ . Изменение  $n$  в канале пучка приводит к отклонению световых лучей от первоначального направления и в значительной степени определяет характер распространения лазерного пучка в нелинейной среде [1]. Именно поэтому изучению механизмов изменения показателя преломления при воздействии резонансного излучения посвящено значительное число работ. Особое внимание уделяется анализу закономерностей изменения  $n$  при распространении импульса излучения ИК-диапазона (излучение этого диапазона поглощается обычно на колебательно-вращательных переходах) [2—7]. Обусловлено это тем, что именно ИК-лазеры способны давать высокие уровни интенсивности, при которых нелинейные эффекты становятся весьма существенными.

Было показано, что основными механизмами изменения  $n$  являются изменение поляризуемости молекул среды вследствие возбуждения молекулярных колебаний и изменение плотности вследствие гидродинамических эффектов, обусловленных неоднородным тепловыделением из колебательных в поступательные степени свободы. Анализ влияния гидродинамических эффектов при этом проводился в основном в рамках модели невязкого нетеплопроводного газа без учета влияния диффузии и теплопроводности, которые в колебательно-неравновесном газе существенно зависят от степени возбуждения и могут оказывать значительное влияние на поведение концентраций компонентов смеси даже на временах, меньших характерных времен этих процессов [8]. Поэтому представляет интерес провести комплексный анализ закономерностей изменения показателя преломления смеси газов с учетом всех процессов, связанных с возбуждением молекулярных колебаний резонансным излучением. Такому анализу и посвящена данная работа.

Анализ проведен для двухкомпонентной смеси газов, состоящих из молекул разного сорта, например А (1) и В (2), причем молекулы сорта А обладают, по крайней мере, двумя различными типами колебаний  $k$  и  $q$  с частотами  $\nu_k < \nu_q$ , а молекулы сорта В — одним типом колебаний  $s$  с