

SIMULATION PAR LA METHODE MONTE CARLO DE PARAMÈTRES DE DEPOSITION DE a-Si:H PAR PROCEDE PECVD

Oumelkheir BABAHANI et Fethi KHELFAOUI

*Laboratoires LENREZA et LRPPS et Département Sciences de la Matière, Faculté des
Sciences et Technologies et des Sciences de la Matière, Université Kasdi Merbah – Ouargla,
30000 Ouargla, Algérie*

E-mail: babahaniok@hotmail.com

RÉSUMÉ : Ce travail présente la simulation par la méthode Monte Carlo (MC) de la déposition d'une couche mince a-Si:H effectuée par procédé PECVD sur un substrat de silicium. On s'intéresse particulièrement aux phénomènes physico-chimiques qui gouvernent le procédé PECVD près du substrat. La simulation est basée sur les collisions binaires entre les différentes espèces (molécules, radicaux, électrons, etc.) existant dans le plasma généré par radiofréquence (RF). Le mélange gazeux initial introduit est 80% de SiH₄ et 22% de H₂; la simulation utilise aussi le modèle fluide et les réactions chimiques. Nous avons calculé la consommation de SiH₄, la production de H₂ et d'autres résultats.

MOTS-CLÉS : déposition, couche mince, plasma, PECVD, fluide, Monte Carlo, réactions chimiques

1. Introduction:

Les dépôts PECVD appartiennent aux dépôts CVD (Chemical Vapor Deposition). Ces méthodes permettent de former des couches minces solides non volatiles sur un substrat, par des réactions chimiques.

Les procédés de déposition PECVD sont des déposition assistées par plasma. Le plasma peut être généré par différentes méthodes. Les phénomènes physico-chimiques qui gouvernent les procédés CVD sont principalement le transport de masse et de chaleur. La réaction chimique entre le mélange gazeux et le substrat est l'étape la plus importante dans les dépositions de couches minces par procédé CVD.

Dans ce travail on étudie la déposition d'une couche mince a-Si:H par procédé PECVD en utilisant un plasma généré par radiofréquence (RF). Le mélange gazeux initialement introduit dans le réacteur est (78% de SiH₄ et 22% de H₂). La décharge dans le gaz produit un plasma contenant des électrons, des radicaux et des molécules ainsi que d'autres anions et cations.

Nous utilisons aussi les équations de conservations d'un fluide newtonien, incompressible en régime laminaire et permanent à deux dimensions [1, 2].

2. Réactions chimiques en phase gazeuse :

Le tableau 1 montre le grand nombre de réactions chimiques en phase gazeuse qui s'effectuent dans le plasma [3]. Nous avons choisi des réactions électron-particule (réactions hétérogènes) (R1, R2, R5 et R6). La dissociation du silane SiH₄ produit le silylène SiH₂ avec une proportion de 83% et le silyle SiH₃ avec une proportion de 17% [2].

Les radicaux choisis dans l'étude sont H, SiH₂, SiH₃ et les molécules choisies sont H₂, SiH₄ et Si₂H₆. On peut considérer les réactions chimiques suivantes : R8, R10 et R14 [3]; ces réactions sont homogènes.

Tableau 1 : Réactions chimiques dans le plasma (d'après [3])

Reaction no.	Reaction	K (cm ³ /s)	Reaction no.	Reaction	K (cm ³ /s)
R1	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H} + e$	$3.00(-11)^{a,b}$	R39	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6$	$5.33(-13)$
R2	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2 + 2\text{H} + e$	$1.50(-10)^b$	R40	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_6 + \text{H}_2$	$1.00(-11)^f$
R3	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH} + \text{H} + \text{H}_2 + e$	$9.34(-12)^b$	R41	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$1.00(-10)$
R4	$\text{SiH}_4 + e \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}_2 + e$	$7.19(-12)^b$	R42	$\text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	$1.70(-12)$
R5	$\text{H}_2 + e \rightarrow 2\text{H} + e$	$4.49(-12)^b$	R43	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_4$	$1.11(-12)^g$
R6	$\text{Si}_2\text{H}_6 + e \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{SiH}_2 + \text{H}_2 + e$	$3.72(-10)^b$	R44	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3$	$1.11(-12)^c$
R7	$\text{Si}_2\text{H}_6 + e \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + 2\text{H} + e$	$3.70(-11)^b$	R45	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_7 + \text{H}_2$	$2.16(-12)^c$
R8	$\text{SiH}_4 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3 + \text{H}_2$	$2.67(-12)^c$	R46	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_7 + \text{SiH}_4$	$2.49(-12)^c$
R9	$\text{SiH}_4 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	$1.78(-15)$	R47	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	$1.20(-10)^c$
R10	$\text{SiH}_4 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6^*$	$1.00(-11)$	R48	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9$	$1.00(-11)$
R11	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_3 + \text{H}_2$	$1.70(-12)$	R49	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_7 + \text{Si}_2\text{H}_6$	$2.49(-12)^c$
R12	$\text{SiH}_4 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	$2.50(-12)$	R50	$\text{Si}_3\text{H}_8 + \text{Si}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	$1.00(-10)^d$
R13	$\text{SiH}_3 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_2 + \text{H}_2$	$1.00(-10)$	R51	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$1.00(-11)$
R14	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	$1.50(-10)$	R52	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8 + \text{SiH}_3$	$5.00(-13)^h$
R15	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2$	$1.00(-11)$	R53	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_6 + \text{SiH}_4$	$1.00(-10)^j$
R16	$\text{SiH}_3 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5$	$3.77(-13)$	R54	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	$5.50(-11)^j$
R17	$\text{SiH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{SiH} + \text{H}_2$	$7.96(-13)$	R55	$\text{Si}_3\text{H}_7 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9$	$1.00(-11)$
R18	$\text{SiH}_2 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_3$	$1.11(-12)$	R56	$\text{Si}_3\text{H}_6 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_8 + \text{H}_2$	$1.00(-11)^f$
R19	$\text{SiH}_2 + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_4$	$2.00(-13)$	R57	$\text{Si}_3\text{H}_6 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$1.00(-11)^k$
R20	$\text{SiH}_2 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_3$	$7.22(-13)$	R58	$\text{Si}_3\text{H}_6 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9$	$2.00(-11)$
R21	$\text{SiH} + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_3$	$1.98(-12)$	R60	$\text{Si}_4\text{H}_{10} + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_9 + \text{SiH}_4$	$2.49(-12)^m$
R22	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_3$	$1.11(-12)^c$	R61	$\text{Si}_4\text{H}_{10} + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	$1.20(-10)^n$
R23	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H}_2$	$1.20(-10)^c$	R62	$\text{Si}_4\text{H}_{10} + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11}$	$1.00(-11)$
R24	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_4$	$1.00(-12)^c$	R63	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	$1.00(-11)$
R25	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$1.20(-10)$	R64	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10} + \text{SiH}_3$	$5.00(-13)^h$
R26	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH} \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_7$	$1.00(-11)$	R65	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_8 + \text{SiH}_4$	$1.00(-10)^j$
R27	$\text{Si}_2\text{H}_6 + \text{Si}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	$1.00(-10)^d$	R66	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	$5.50(-11)^j$
R28	$\text{Si}_2\text{H}_6^* + \text{M}^e \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{M}$	$1.00(-10)$	R67	$\text{Si}_4\text{H}_9 + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11}$	$1.20(-10)^n$
R29	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$5.00(6) \text{ s}^{-1}$	R68	$\text{Si}_4\text{H}_8 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{10} + \text{H}_2$	$1.00(-11)^f$
R30	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	$2.30(7) \text{ s}^{-1}$	R69	$\text{Si}_4\text{H}_8 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_2$	$1.00(-11)^k$
R31	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$2.30(7) \text{ s}^{-1}$	R70	$\text{Si}_4\text{H}_8 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11}$	$2.00(-11)$
R32	$\text{Si}_2\text{H}_6^{**} + \text{M}^e \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{M}$	$2.00(-10)$	R71	$\text{Si}_5\text{H}_{12} + \text{H} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{H}_2$	$2.16(-12)^j$
R33	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{H} \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$	$1.00(-10)$	R72	$\text{Si}_5\text{H}_{12} + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{SiH}_4$	$2.49(-12)^m$
R34	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6 + \text{SiH}_3$	$5.00(-13)$	R73	$\text{Si}_5\text{H}_{12} + \text{SiH}_2 \rightarrow \text{Si}_6\text{H}_{14}$	$1.20(-10)^n$
R35	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_4 + \text{SiH}_4$	$1.00(-10)$	R74	$\text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{H} \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12}$	$1.00(-11)$
R36	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_3\text{H}_8$	$5.50(-11)^c$	R75	$\text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{12} + \text{SiH}_3$	$5.00(-13)^h$
R37	$\text{Si}_2\text{H}_5 + \text{Si}_2\text{H}_5 \rightarrow \text{Si}_4\text{H}_{10}$	$1.00(-11)$	R76	$\text{Si}_5\text{H}_{11} + \text{SiH}_3 \rightarrow \text{Si}_5\text{H}_{10} + \text{SiH}_4$	$1.00(-10)^j$
R38	$\text{Si}_2\text{H}_4 + \text{H}_2 \rightarrow \text{SiH}_4 + \text{SiH}_2$	$1.00(-10)$	R77	$\text{Si}_5\text{H}_{10} + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_6\text{H}_{14}$	$1.00(-11)^k$

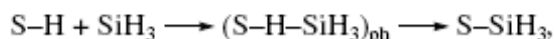
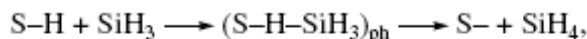
Notes: ^a $3.00(-11) = 3.00 \times 10^{-11}$.^b Data for collisions with electrons are presented for electrode separation $L_0 = 2.5$ cm, partial pressures of molecular hydrogen and silane $p_0 = 0.125$ Torr, and temperature $T = 520$ K.^c The values of the constants are taken from [13].^d The values of the constants are taken by analogy with reaction R41 from [16].^e M is partial particle (collision partner).^f Reactions are proposed in [15].

The values of the constants were taken by analogy with:

^g Reactions R22 and R44 in [13].^h Reaction R34 in [3].ⁱ Reaction R35 in [16].^j Reaction R36 in [13].^k Reaction $\text{SiH}_3 + \text{SiH}_4 \rightarrow \text{Si}_2\text{H}_6$ taken from [13].^l Reaction R45 in [13].^m Reaction R46 in [13].ⁿ Reaction R47 in [13].

3. Réactions chimiques à surface :

Plusieurs réactions chimiques [3] s'effectuent à la surface du substrat (Silicium hydrogéné), nous nous limiterons aux réactions suivantes :



4. Simulation Monte Carlo (MC):

Le mouvement des différentes particules peut être simulé par la méthode de Monte Carlo. Durant son parcours dans le volume de plasma, chaque particule subit des collisions binaires élastique ou inélastique avec les autres particules choisis aléatoirement. Les différentes collisions sont caractérisées par leurs sections efficaces et leurs libres parcours moyens [5].

Le modèle de simulation proposé, nous a permis de calculer les fractions molaires de chaque espèce dans le plasma. La consommation du SiH_4 près de la surface est (37%). La production du H_2 (30.6%), les résultats sont proches de celles de modèle fluide de [1, 2]. Nous avons aussi calculé la proportion des particules réagissent avec la surface (5%). Plusieurs autres paramètres et coefficients sont calculés, entre autres les coefficients de réflexion ($1-\beta$), de déposition (s) et de recombinaison de SiH_3 (γ) (voir figure 1).

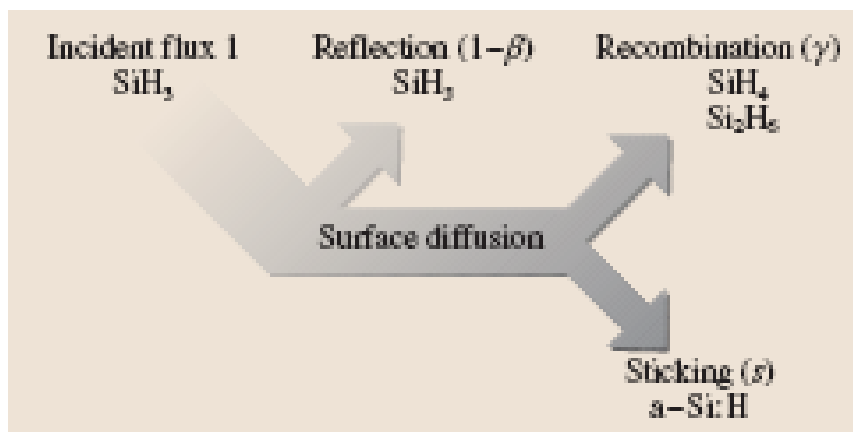


Fig.26.5 General concepts behind the surface reactions of incoming SiH_3 radicals

Figure 1 : Réactions chimiques au niveau de la surface

Références

- [1] O.K. Babahani ; *Mémoire de magister* ; Université de Ouargla ; (Mai 2004).
- [2] L. Layeillon, P. Duverneuil, J.P. Couderc et B. Despax ; 'Analysis and modelling of plasma enhanced CVD reactors, Part I: two dimensional treatment of a-Si:H deposition' ; Plasma Sources Sci. Technol., **Vol. 3**, pp 61-71, (1994).
- [3] Yu. E. Gorbachev; *Effect of Oligomers on the Growth of Amorphous Silicon Films in a PECVD Reactor*; Technical Physics, **Vol. 51**, No. 6, pp 733-739, (2006).
- [4] P. Atkins, J. De Paula; *Chimie physique*; Ed. De Boeck, Paris, (2008).
- [5] J. Marcel Rax; *Physique des Plasmas*; Ed. Dunod, Paris, (2007).