

УДК 533.9:539.194

МОДЕЛИРОВАНИЕ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ SiH ($A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$) И ИЗМЕРЕНИЕ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ ТЕМПЕРАТУРЫ СОСТОЯНИЯ $A^2\Delta$ В ЭЛЕКТРОННО-ПУЧКОВОЙ ПЛАЗМЕ

Е. А. Баранов, С. Я. Хмель

Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск

Выполнено численное моделирование эмиссионного спектра полосы 0–0 перехода $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ молекулы SiH. Полученные результаты хорошо согласуются с известными расчетными и экспериментальными данными. Путем сравнения расчетного и экспериментального спектров определена вращательная температура состояния $A^2\Delta$ молекулы SiH в свободной струе чистого моносилана (SiH_4) и смеси с гелием ($He + SiH_4$), активированной электронным пучком. Подтверждено предположение о том, что излучение молекулы SiH возникает в результате диссоциативного возбуждения SiH_4 электронным ударом. Приведены значения вращательной температуры при различных концентрациях моносилана и расстояниях от сопла. В полученных спектрах зарегистрировано излучение иона кремния с длинами волн 412,807; 413,089 нм.

Ключевые слова: оптическая эмиссионная спектроскопия, вращательная температура, электронный пучок, моносилан.

Введение. Силановая плазма широко применяется для осаждения пленок кремния. Для диагностики такой плазмы часто используется оптическая эмиссионная спектроскопия [1]. Этот метод бесконтактный, невозмущающий и относительно простой, однако интерпретация результатов измерений достаточно сложна. Метод позволяет получать информацию об излучающих компонентах плазмы и о функции распределения электронов по энергиям.

В силановой плазме основным излучающим молекулярным кремнийсодержащим компонентом является радикал SiH в состоянии $A^2\Delta$ [1]. По спектру его излучения, а именно с использованием полос перехода $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$, можно получить информацию о вращательной температуре, которая является важной характеристикой излучающих компонентов плазмы.

Для измерения вращательной температуры широко используется метод больцмановских графиков, с помощью которого обычно проверяют, является ли распределение заселенностей вращательных уровней в возбужденном состоянии больцмановским.

В работе [2] показана справедливость предположений о частичном равновесии распределения заселенности вращательных уровней в возбужденном состоянии $A^2\Delta$ радикала SiH. Вообще говоря, больцмановская статистика справедлива для распределения по вращательным уровням в возбужденном состоянии, если оно заселяется из основного состояния прямым электронным ударом [3]. Кроме того, в [4] обнаружен индуцированный столкновениями перенос вращательных квантов внутри состояния $A^2\Delta$, что в принципе должно вести к термализации этого состояния.

Однако для SiH из-за присутствия близко лежащих Λ -дублетов и перекрытия линий разных ветвей спектр почти всегда недостаточно разрешен, что не позволяет использовать метод полулогарифмического (или больцмановского) графика. Таким образом, оптималь-

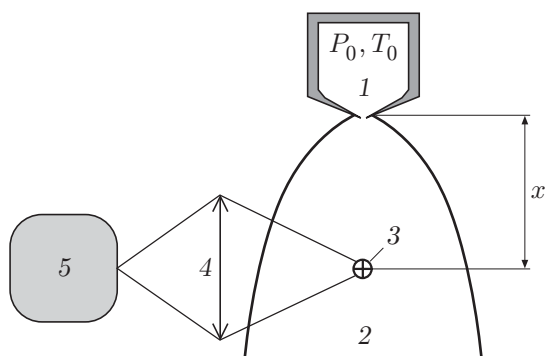


Рис. 1. Схема экспериментальной установки:

1 — сопло, 2 — струя, 3 — пучок электронов, 4 — линза, 5 — монохроматор МДР-6

ным методом определения температуры является сравнение экспериментального и расчетного эмиссионных спектров. Впервые этот метод для эмиссионных спектров SiH был применен в работе [1], в которой в водородосилановом разряде получены вращательная температура SiH $T_{rot} = (1800 \pm 90)$ К и колебательная температура $T_{vib} = (3800 \pm 150)$ К. В дальнейшем данный метод использовался для определения вращательной температуры из спектров среднего и низкого разрешения. Вращательная температура, измеренная в силановом разряде, составила (2000 ± 50) К [5]. В работе [6] измерения проводились в ячейке при активации моносилана электронным пучком для двух значений энергии: $T_{rot} = 1700$ К при $E = 20$ эВ и $T_{rot} = 1400$ К при $E = 500$ эВ. В струе аргона за плазмотроном, в которую вдвухвался моносилан, вращательная температура равна 4000 К [7]. В плазме микроволнового разряда смеси моносилана с гелием полученные значения находятся в интервале $300 \div 2000$ К [8]. Такой широкий диапазон значений T_{rot} автор работы [8] объясняет изменением степени диссоциации моносилана в смеси (ниже этот вопрос рассмотрен более подробно). Наконец, в работе [9] в тлеющем разряде моносилана из спектров высокого разрешения с высокой точностью определено значение $T_{rot} = (2840 \pm 50)$ К.

В данной работе исследовались свободные струи чистого моносилана и смеси моносилана с гелием, активированные электронным пучком. Целью работы являлось моделирование электронно-колебательно-вращательного спектра полосы 0–0 перехода $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$ молекулы SiH и измерение вращательной температуры состояния $A^2\Delta$ молекулы SiH в электронно-пучковой плазме.

Экспериментальная установка. Эксперименты проводились на газодинамической установке низкой плотности Института теплофизики СО РАН [10], схема которой приведена на рис. 1. Источником газа служило осесимметричное звуковое сопло диаметром $d = 7,5$ мм. Расход газа G через сопло контролировался расходомер-регуляторами фирмы “MKS Instruments”, при этом давление в форкамере сопла (давление торможения) изменялось в диапазоне $130 \div 2700$ Па. Температура торможения поддерживалась на уровне комнатной и контролировалась термопарой. В качестве рабочего газа использовались как чистый моносилан, так и смесь моносилана с гелием.

Установка оснащена плазменной электронной пушкой с системой дифференциальной откачки. Электронный пучок с энергией $E = 2 \div 5$ кэВ и током $I \leq 100$ мА пересекает струю газа и попадает на коллектор, предназначенный для измерения тока пучка. Диаметр пучка электронов в сфокусированном состоянии составляет $3 \div 4$ мм. Сопло установлено на трехкомпонентном координатном механизме, позволяющем изменять расстояние от сопла до электронного пучка и проводить юстировки сопла.

Оптическое излучение, возбужденное пучком электронов, собиралось линзой на входную щель монохроматора МДР-6 и после разложения в спектр регистрировалось фотоэлектронным умножителем. Спектральное разрешение составляло $0,03 \div 0,08$ нм/мм в зависимости от величины регистрируемого сигнала.

Таблица 1

Ветвь	J	Ветвь	J	Ветвь	J
Q_1	$2,5 \div 20,5$	R_1	$2,5 \div 20,5$	P_1	$2,5 \div 19,5$
Q_2	$1,5 \div 16,5$	R_2	$2,5 \div 17,5$	P_2	$2,5 \div 19,5$
Q_{12}	$1,5 \div 20,5$	R_{12}	$2,5 \div 16,5$	P_{12}	$2,5 \div 19,5$
Q_{21}	$1,5 \div 15,5$	R_{21}	$1,5 \div 20,5$	P_{21}	$1,5 \div 18,5$

В эксперименте регистрировалось излучение, возбуждаемое пучком электронов, в диапазоне длин волн $\lambda = 410 \div 420$ нм. Измерения проводились на оси струи на фиксированном расстоянии от сопла при варьировании расхода и состава газа, а также для фиксированного расхода при изменении расстояния.

Расчет спектра и определение вращательной температуры. Процедура определения вращательной температуры для молекулы SiH путем сравнения расчетного и экспериментального спектров описана в работах [1, 7, 9]. Численное моделирование спектров двухатомных молекул обычно осуществляется с помощью стандартных формул, приведенных, например, в работах [11, 12], однако из-за особенностей структуры молекулы необходимо уточнение метода расчета. Молекула SiH обладает сложным спектром, состоящим из 12 перекрывающихся ветвей без учета Λ -расщепления, что повышает требования к расчету термов. Поэтому авторами данной работы проведен анализ формул для расчета термов из [9, 13, 14] путем сравнения с экспериментальными данными для состояний $A^2\Delta$ и $X^2\Pi$ [15]. Установлено, что наиболее точные значения термов получаются при расчете по формулам, приведенным в [9], с использованием молекулярных констант из этой же работы. По соотношениям из [13] рассчитывалось Λ -расщепление. Факторы Хенля — Лондона определялись с помощью формул для переходного случая, приведенных в [11] и уточненных в [9].

Важным моментом при расчете спектра является корректный выбор количества линий, принадлежащих разным ветвям. Для этого использовались расчетный и экспериментальные спектры [9, 16], а также экспериментальные спектры данной работы. В табл. 1 приведены диапазоны значений вращательного квантового числа J для соответствующих ветвей перехода $A^2\Delta \rightarrow X^2\Pi$.

Предполагалось, что распределение молекул по вращательным уровням состояния $A^2\Delta$ бальмановское. Экспериментально полученная аппаратная функция является треугольной, интенсивность спектральной линии I_λ на длине волны λ :

$$I_\lambda = \sum_i I_i \left(1 - \frac{|\nu_\lambda - \nu_i|}{\alpha} \right).$$

Здесь I_i — теоретически рассчитанная интенсивность i -й линии для волнового числа ν_i ; α — ширина спектральной линии на полувысоте; $|\nu_\lambda - \nu_i| < \alpha$.

Подгонка расчетного и экспериментального спектров осуществлялась методом наименьших квадратов по формуле функции ошибки [6, 9]

$$\varepsilon = \sum_i \left(\frac{I'_i}{I'_{i,\max}} - \frac{I''_i}{I''_{i,\max}} \right)^2,$$

где i — номер пика; штрих соответствует экспериментальным величинам, два штриха — расчетным для одинаковых длин волн. Вращательная температура использовалась в качестве подгоночного параметра. Температура, соответствующая минимуму функции ошибки, является искомой.