

RAFAL-3D 解析例題 (1)

エッチング装置内の希薄気体流れ (反応面境界の適用例)

● 計算内容

文献 [1] にあるエッチング装置内の希薄気体流解析と同様の計算をする。すなわち、図 1 に示すエッチング装置において、チャンバ上部の流入口から Cl_2 ガスと BCl_3 ガスが流入し、ウェハ面からウェハ面上の Al のエッチング生成物である AlCl_3 ガスが放出し、これら 3 種の気体がチャンバ下部の排気口から図示しない排気装置により排気される流れを計算する。

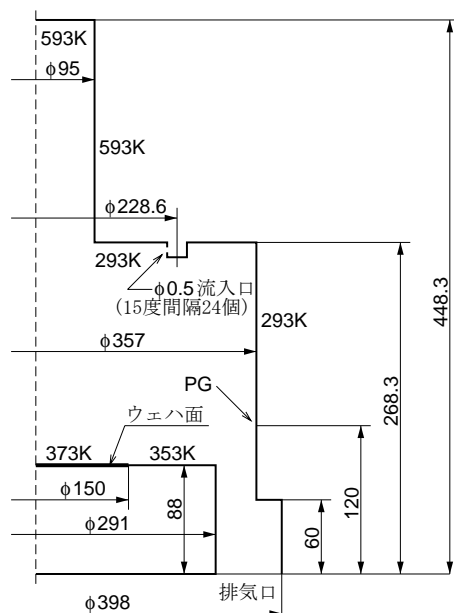


図 1 エッチング装置の寸法および壁面温度

流入口は直径 0.5mm の孔が 15 度間隔で 24 個設けられており、流入気体がチャンバ中心軸に向かって噴出するようになっている。

ウェハ面上の Al 表面の 1/2 はレジストで一様に覆われており、残りの露出した Al 表面では



の反応が確率 P_{react} で起きるものとする。

チャンバ各部の壁面温度は、図中に示す温度に保たれている。

チャンバ上部の流入口から流入する Cl_2 ガスの流量は 50sccm, BCl_3 ガスの流量は 10sccm である。このとき図中の点 PG における圧力の実機による計測値は 0.533Pa である。

• DSMC 解析に必要な気体の物性値

Cl₂ ガス

1mol の質量	$M = 0.0709054$	(kg/mol)
分子 1 個の質量	$m = 1.177413 \times 10^{-25}$	(kg)
単位質量当り気体定数	$R = 117.262$	(J/(kgK))
全衝突断面積	$\sigma_T = 8.7251 \times 10^{-19}$	(m ²) (文献 [1] に記載の分子直径より算出)
標準状態における密度	$\rho = 3.163429$	(kg/m ³) (標準状態=0 ,1atm)

BCl₃ ガス

1mol の質量	$M = 0.117169$	(kg/mol)
分子 1 個の質量	$m = 1.945638 \times 10^{-25}$	(kg)
単位質量当り気体定数	$R = 70.9617$	(J/(kgK))
全衝突断面積	$\sigma_T = 1.3192 \times 10^{-18}$	(m ²) (文献 [1] に記載の分子直径より算出)
標準状態における密度	$\rho = 5.227468$	(kg/m ³) (実際は標準状態では液体)

AlCl₃ ガス

1mol の質量	$M = 0.133340$	(kg/mol)
分子 1 個の質量	$m = 2.214164 \times 10^{-25}$	(kg)
単位質量当り気体定数	$R = 62.3557$	(J/kgK)
全衝突断面積	$\sigma_T = 1.3192 \times 10^{-18}$	(m ²) (文献 [1] に記載の分子直径より算出)

• DSMC 法シミュレーションモデル

解析領域

エッチング装置の形状は、流入口の配置以外は軸対称であり 15 度間隔の回転対称性を有している。文献 [1] ではこのことを考慮して中心角 15 度の領域を 3 次元解析している。ここでは文献 [1] の結果を参考にして、簡単のためエッチング装置内の流れを軸対称流れと仮定して解析する。

解析領域のセル分割

図 1 に示す領域を解析領域とし、この解析領域の子午面内を図 2 に示すようにセル分割する。RAFAL-3D では、対称軸が x 軸方向、軸からの距離が y 軸方向にとられるためチャンバ中心軸を水平にして解析領域をセル分割する。

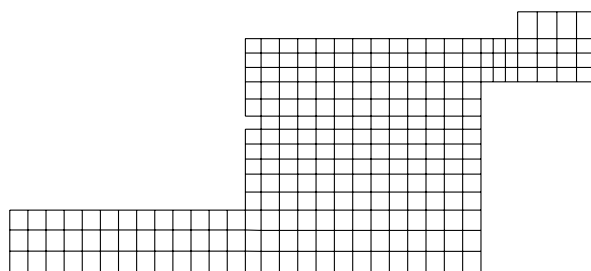


図 2 解析領域セル分割図

境界条件

- ・軸対称解析としたため Cl_2 ガス、 BCl_3 ガスの流入口はリング状のスリットとなる。この問題では流入気体の流量値が指定されているので、流入口を放出ガス固体壁境界でモデル化し、放出ガスを流入気体流量に一致するように指定する。
- ・ウェハ面は反応面境界とし、被覆率 P_{mask} 、ウェハ面に衝突した Cl_2 分子の反応確率 P_{react} 、反応した Cl_2 分子 1 個に対する AlCl_3 分子の放出個数 n_{out} を指定する。
- ・その他の固体壁面は図 1 に示す温度の拡散反射固体壁境界とする。
- ・排気口は、本来は透過境界であるが、ここでは付着固体壁境界により排気面としてモデル化し、付着率 S (排気系の排気能力に対応) を点 PG における計算圧力値が計測値 0.533Pa と一致するように (繰り返し計算により) 定める。

重み因子解析

この問題は 3 気体種の混合気体解析となるが、 Cl_2 ガスと BCl_3 ガスの流量比からも推測されるように、解析領域中の各気体種の分子数にかなりの差が生じる。この分子数差はシミュレーション用分子数の差に対応し、小分子数の気体種に対するマクロ量の揺らぎを抑えるための計算が長くなるという不具合を生じる。

ここでは、この不具合を回避するために、各気体種のシミュレーション用分子数が同程度になるように、気体種毎にシミュレーション用分子数と実分子数の比を指定する重み因子解析を行う。

● DSMC 法によるシミュレーション

以下の手順でシミュレーションする。

- 解析領域内の 3 気体種のシミュレーション用分子が同程度となるような各気体種の重み因子の値と、点 PG における圧力が 0.533Pa になるような排気面の付着率 S の値を推定する。
- 解析領域内に分子を導入し、定常状態を達成させる。
- マクロ量の時間平均をとる。
- 各気体種のシミュレーション用分子数が同程度でない場合、計算結果の点 PG における圧力値が計測値 0.533Pa に一致していない場合は、それぞれ重み因子の値、排気面の付着率 S を変更して (II) に戻る。これらの一致条件が満たされている場合は計算終了。

● 入力データ設定のために必要な諸量の算定

(1) 時間ステップ幅

温度 $T = 300\text{K}$, 圧力 $p = 0.533\text{Pa}$ の Cl_2 ガスの平均自由時間から決定する。この場合の Cl_2 分子の平均速度は $\bar{c} = \sqrt{8RT/\pi} = \sqrt{8 \times 117.262 \times 300/\pi} = 299.3\text{m/s}$ 、平均自由行程は $\lambda = kT/\sqrt{2}\sigma_T p = 1.380658 \times 10^{-23} \times 300/(\sqrt{2} \times 8.7251 \times 10^{-19} \times 0.533) = 6.3 \times 10^{-3}\text{m}$ であるから、平均自由時間は $\tau = \lambda/\bar{c} = 6.3 \times 10^{-3}/299.3 = 2.1 \times 10^{-5}\text{s}$ である。時間ステップ幅としては、この値の 1/5 程度の $4 \times 10^{-6}\text{s}$ とする。

(2) 排気面付着率の推定値

排気面の付着率 S は排気系の排気能力に対応し、その値は点 PG における計算結果の圧力値が計測値と一致するように (繰り返し計算により) 定められる。当初指定する付着率 S を以下のように推定する。

定常状態においてチャンバには $10 + 50 = 60\text{sccm}$ の Cl_2 ガスが流入すると仮定し、それが全て排気面から排気されるとする。排気面近傍の Cl_2 ガスの圧力は $p=0.533\text{Pa}$, 温度は内外壁円筒面の平均 $T = (353 + 293)/2 = 323\text{K}$ と仮定する。

このとき排気面近傍の Cl_2 ガスの分子数密度は、

$$n = p/(kT) = 0.533/(1.380658 \times 10^{-23} \times 323) = 1.195 \times 10^{20} \quad (1/\text{m}^3)$$

排気面近傍での Cl_2 ガスの平均分子速度は、

$$\bar{c} = \sqrt{8RT/\pi} = \sqrt{8 \times 117.262 \times 323/\pi} = 310.6 \quad (\text{m/s})$$

排気面に単位時間単位面積当り衝突する Cl_2 分子数は、

$$n_{col} = \frac{1}{4}n\bar{c} = \frac{1}{4} \times 1.195 \times 10^{20} \times 310.6 = 9.279 \times 10^{21} \quad (1/(\text{sm}^2))$$

排気面の面積は、

$$A = \frac{\pi}{4} \times (0.398^2 - 0.291^2) = 5.79019 \times 10^{-2} \quad (\text{m}^2)$$

であるから、排気面に単位時間当り衝突する Cl_2 分子数は、

$$N_{col} = An_{col} = 5.79019 \times 10^{-2} \times 9.279 \times 10^{21} = 5.3727 \times 10^{20} \quad (1/\text{s})$$

一方、単位時間当りチャンバに流入する気体分子数は、 $1\text{sccm} = 4.477939 \times 10^{17}(1/\text{s})$ より

$$N_{in} = 60 \times 4.477939 \times 10^{17} = 2.686763 \times 10^{19} \quad (1/\text{s})$$

この流入分子数 N_{in} が全て排気されるとの仮定より、付着率の推定値は、

$$S = \frac{N_{in}}{N_{col}} = \frac{2.686763 \times 10^{19}}{5.3727 \times 10^{20}} = 0.05$$

となる。

なお、繰り返し計算により修正された付着率の収束値は $S = 0.0532$ となった。

(3) 流入 Cl_2 ガス流量に対応する放出ガス量

チャンバに流入する Cl_2 ガス流量に対応する放出ガス量を以下のように定める。 Cl_2 ガス流量は 50sccm なので分子数流量 Q_N は、1sccm = 4.477939×10^{17} (1/s) より

$$Q_N = 50 \times 4.477939 \times 10^{17} = 2.238969 \times 10^{19} \quad (1/s)$$

となる。

流入境界面は軸対称解析であるため円筒面となり、その直径 d と高さ h は、この境界面が 92 番セルの 3 番辺であることから、 $d=0.2186\text{m}$, $h=0.012\text{m}$ となる。従って流入境界面積 A_{in} は

$$A_{in} = \pi dh = \pi \times 0.2186 \times 0.012 = 8.241025 \times 10^{-3} \quad (\text{m}^2)$$

となり、流入 Cl_2 ガスの分子数束は

$$N_f = \frac{Q_N}{A_{in}} = \frac{2.238969 \times 10^{19}}{8.241025 \times 10^{-3}} = 2.716857 \times 10^{21} \quad (1/(\text{sm}^2))$$

この分子数束に対応する放出ガス量は、壁温を $T=293\text{K}$ としたとき、真空工学常用単位による放出ガス量 Q_{out} は

$$Q_{out} = kTN_f = 1.380658 \times 10^{-23} \times 293 \times 2.716857 \times 10^{21} = 10.99058 \quad (\text{Pam}^3/(\text{m}^2\text{s}))$$

となる。

(4) 流入 BCl_3 ガス流量に対応する放出ガス量

チャンバに流入する BCl_3 ガス流量は 10sccm と Cl_2 ガスの 1/5 なので、対応する放出ガス量 Q_{out} も Cl_2 ガスの 1/5 の

$$Q_{out} = \frac{10.99058}{5} = 2.198116 \quad (\text{Pam}^3/(\text{m}^2\text{s}))$$

となる。

● 反応面境界性状データの設定

RAFAL-3D では化学反応が起きる表面に対して、この表面に衝突する気体分子種ごとに反応面の被覆率 P_{mask} 、反応面に衝突した分子の反応確率 P_{react} 、反応生成物の種類数 NKOUT、反応生成物種類、衝突した反応分子 1 個に対する反応面から放出される反応生成分子の個数 n_{out} を反応面境界性状データとして指定する。

現在の問題では、ノズルから流入する Cl_2 ガス分子と BCl_3 ガス分子およびエッチング生成物である AlCl_3 ガス分子がウェ八面 (反応面境界) に衝突する。このウェ八面に対する反応面境界性状データを以下のように指定する。

(1)Cl₂ ガスに対する反応面境界性状データ

- ・上記のレジストの被覆状況から被覆率 $P_{mask} = 0.5$ と指定する。反応面に衝突した Cl₂ ガス分子は確率 0.5 で Al 面に衝突することになる。
- ・反応確率 P_{react} を文献 [1] と同じ 0.25 とする。従って Cl₂ 分子は $(1 - P_{mask})P_{react} = (1 - 0.5) \times 0.25 = 0.125$ の確率で反応することになる。
- ・ウェハ面からは AlCl₃ ガス 1 種が反応生成物として放出されるので、反応生成物の種類数 NKOUT として 1、反応生成物種類として AlCl₃ を指定する。
- ・上記の化学反応式によれば、Cl₂ 分子 3 個に対して AlCl₃ 分子 2 個が生成されるので、 $n_{out} = 2/3 = 0.6666667$ を指定する。

(2)BCl₃ ガスに対する反応面境界性状データ

- ・上と同様に被覆率 $P_{mask} = 0.5$ と指定する。
- ・BCl₃ 分子は Al 面と衝突しても反応を起こさないので、反応確率 $P_{react} = 0$ とする。従って反応内容に対する以後のデータは不要となる。

(3)AlCl₃ ガスに対する反応面境界性状データ

- ・上と同様に被覆率 $P_{mask} = 0.5$ と指定する。
- ・AlCl₃ 分子は Al 面と衝突しても反応を起こさないので、反応確率 $P_{react} = 0$ とする。この場合も以後のデータは不要となる。

● 結果

過程 3 までのプログラム実行により求められた反応面における AlCl₃ ガスの放出レートからエッチレートを算出し、文献 [1] の結果と比較する。反応面被覆率が 0.5 であることから、反応面における AlCl₃ 分子 1 個の放出は反応面から Al 分子 2 個がエッチされることに対応すると考えて、エッチレート E_r を下式により算出する。

$$E_r = 60 \times \frac{2mN_{out}}{\rho} \quad (\text{m/min})$$

ここで、 m は Al 分子 1 個の質量 $m = 4.480393 \times 10^{-26}$ kg, ρ は Al の密度 $\rho = 2700$ kg/m³, N_{out} (1/(sm²)) は出力リストに示される AlCl₃ 分子の放出レートである。これらの値を上式に代入すれば、

$$\begin{aligned} E_r &= 1.991286 \times 10^{-27} N_{out} \quad (\text{m/min}) \\ &= 1.991286 \times 10^{-21} N_{out} \quad (\mu\text{m/min}) \end{aligned}$$

を得る。

各反応面境界の Al のエッチレートの値を表 1 に、エッチレートの径方向分布を図 3 に示す。

反応面境界 番号	AlCl ₃ 放出レート (1/(sm ²))	エッチレート (μm/min)	反応面境界中点 <i>r</i> 座標 (mm)
1	3.1085×10^{20}	0.619	8
2	3.0840×10^{20}	0.614	24
3	3.1074×10^{20}	0.619	39.75
4	3.2058×10^{20}	0.638	54.4
5	3.3825×10^{20}	0.673	68.15

表1 反応面における Al のエッチレート

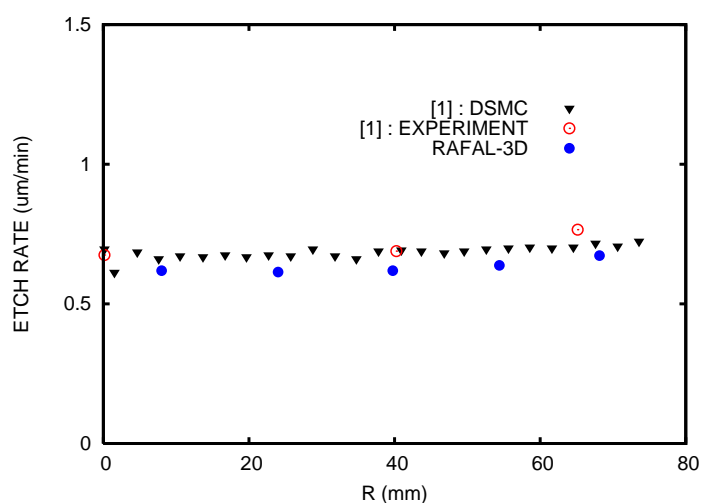
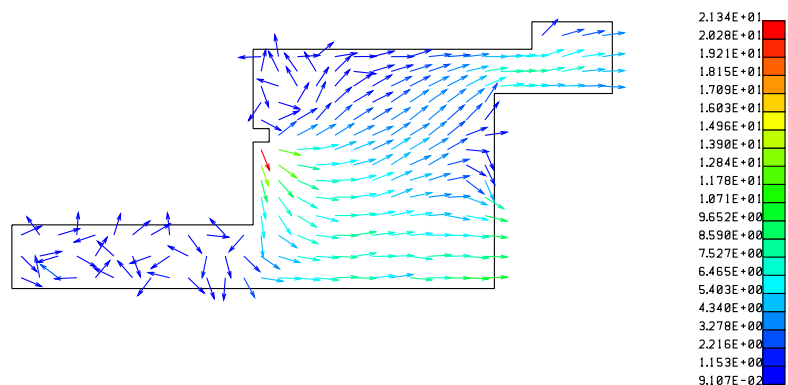
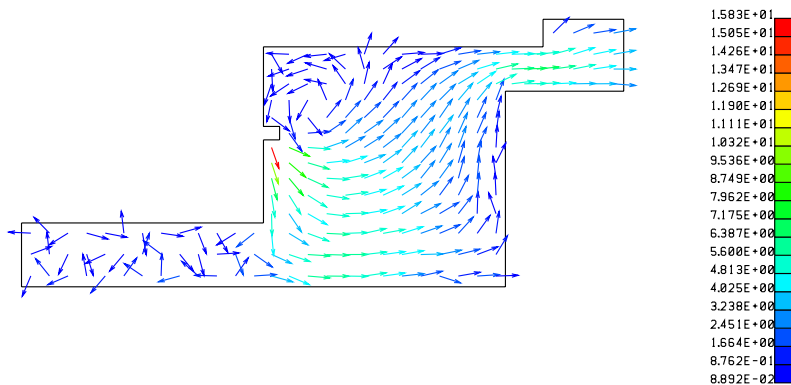


図3 反応面における Al のエッチレート分布

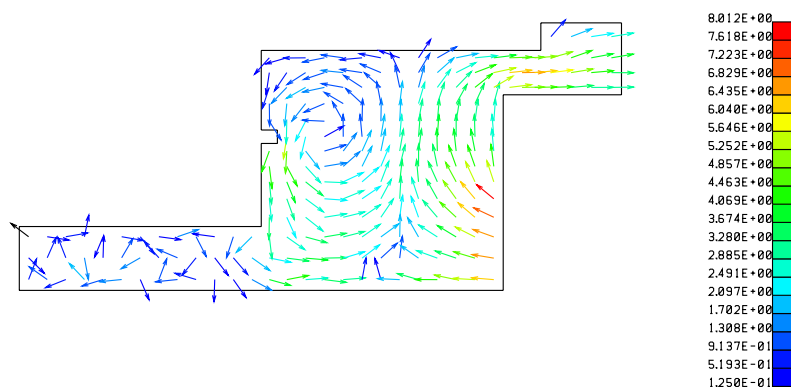
エッチレート分布のRAFAL-3Dによる結果は、文献 [1] の結果より若干小さいがほぼ一致している。また、チャンバ内の各成分気体の速度ベクトル図を図4に、数密度の等高線図を図5に示す。



Cl_2



BCl_3



AlCl_3

図4 成分気体の速度ベクトル図

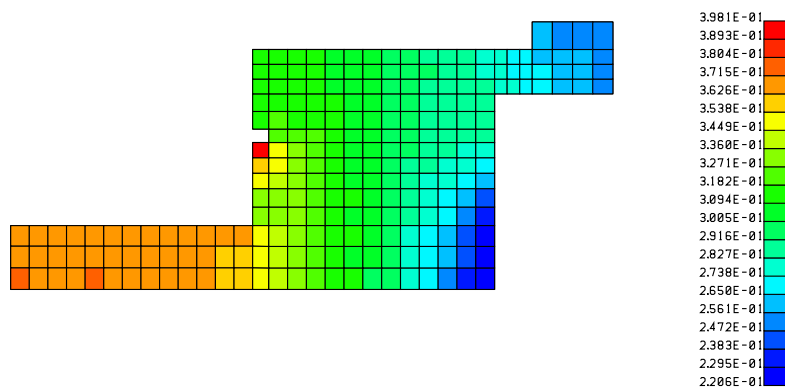
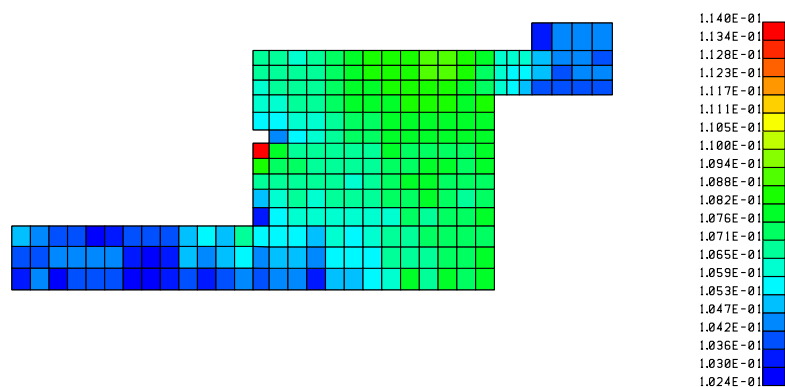
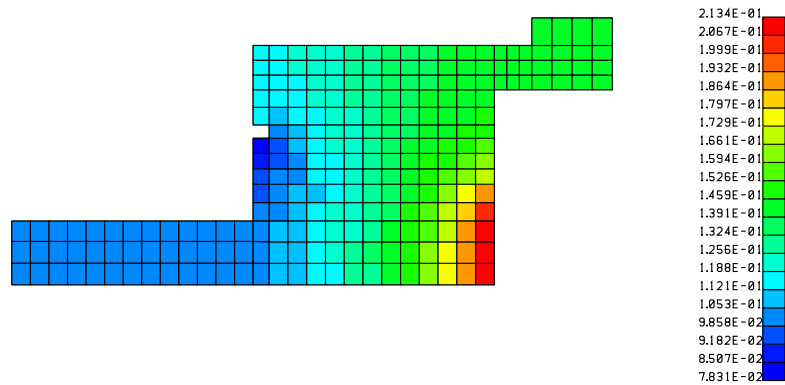
Cl₂BCl₃AlCl₃

図5 成分気体の圧力分布図

参考文献

[1] Serikov, V.V. , Kurisawa, S. , Nanbu, K. : Profile of Al etch rate estimated from the analysis of 3-D rarefied flow of Cl₂, BCl₃, and AlCl₃ in a commercial etcher , Vacuum Vol.47(1996), pp.1027-1029.