

基于回归正交设计的 ICP 刻蚀机工艺腔室流场特性分析*

程 嘉 朱 煜[†] 段广洪 王春洪

(清华大学精密仪器与机械学系 制造工程研究所, 北京 100084)

摘要: 为研究感应耦合等离子体(ICP)刻蚀机工艺腔室结构对流场特性的影响,采用回归正交设计方法对腔室半径、腔室高度、进气口半径以及进气流量 4 个设计参数进行试验设计,利用商业软件 CFD-ACE+ 建立 ICP 刻蚀机工艺腔室二维流场仿真模型.定义了静电卡盘上方气压分布均匀性评价函数,通过对试验结果的回归分析,确定了关键参数对气压分布均匀性影响程度的定量关系,并由此建立了拟合度较高的二次回归方程.结果表明腔室高度为最显著影响因素.经过验证可见,回归方程的计算结果与仿真分析结果保持了较高的一致性,可以为结构与工艺条件相近的刻蚀机、化学气相沉积(CVD)设备以及氧化/扩散系统的结构研究与设计提供参考.

关键词: 感应耦合等离子体; 回归正交设计; CFD-ACE+; 工艺腔室

PACC: 5265

中图分类号: TN405.98

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2008)04-0780-05

1 引言

电子信息产业的蓬勃发展离不开 IC 装备设计与制造技术的不断进步.相当多的 IC 装备具有工艺腔室结构,尽管工艺种类丰富多样,但工艺腔室的结构特点与功能要求有诸多相似.可以为 IC 工艺提供必要、稳定的气压、温度等条件,引入工艺气体,保证工艺反应均匀、快速、可靠地发生.作为 IC 装备的核心部件,工艺腔室的设计通常基于经验与试制,因此开发周期长、成本较高.计算机仿真分析技术的应用改善了设计条件,人们对已有设备的工艺过程进行仿真模拟,并可以比较分析某种因素对工艺结果的影响.感应耦合等离子体(ICP)刻蚀机的工作气压一般为 1.3~20Pa,其流导及流场分布特性是评价工艺腔室设计的重要参数,也是直接影响刻蚀工艺均匀性的关键因素之一^[1~5]. Economou^[6] 和 Ra 等人^[7] 认为进气口的位置及进气流量对刻蚀速率有很大影响, Panagopoulos 等人^[2] 认为除此之外,真空泵开口尺寸与位置也是值得优化的关键参数.人们期望通过改善工艺腔室中的流场分布以提高刻蚀工艺的均匀性,设计了各种仿真工具分析腔室结构的改变对刻蚀结果的影响情况.然而,这种仿真分析仅仅停留在单因素影响规律的研究上,并未对各因素的影响权重进行比较,也并未建立影响因素与优化目标的定量关系,以指导工艺腔室的结构设计.

影响工艺腔室流场特性的主要因素分为结构关键参数(主要有腔室半径、腔室高度以及进气口半径)与工艺关键参数(主要是进气流量).每个参数都有一定的变

化范围,如果对每个参数都相互搭配进行全面分析,即使利用计算机其计算量也是相当惊人的.因此,本文采用回归正交设计的方法对仿真试验参数进行合理安排,利用回归正交试验表任意两列的正交性,在所有试验方案中均匀地挑选出代表性强的试验方案.正交设计方法多应用于化工、医药和农业等领域,然而,将其应用于 IC 装备工艺腔室的结构设计还未见报道.

本文以 ICP 刻蚀机工艺腔室二维轴对称模型为例,使用商业软件 CFD-ACE+ 对回归正交设计方法安排的试验进行计算和分析,得到氩气的空间分布状况.同时,对正交试验结果进行方差分析,得到各参数对流场特性的影响权重的定量关系,确定关键与非关键参数.进而对各因素进行回归分析,得到流场特性与参数之间的回归方程.这些分析可以为设计人员提供有价值的参数设计依据,并为工艺腔室的优化设计奠定基础.

2 工艺腔室流场模型

ICP 刻蚀机工艺腔室的剖面示意图如图 1 所示,腔室近似为二维轴对称结构,因此仅显示一半剖面即可.腔室半径设为 x_1 ,石英窗下表面与下电极上表面之间腔室高度设为 x_2 ,石英窗中心部位是工艺腔室的进气口,其半径设为 x_3 .工艺气体质量流量设为 x_4 ,下方涡轮分子泵的最大抽速为 1400L/s.射频源将能量输入平面结构的近似环形线圈产生高频电磁场,使腔室中工艺气体受到激发产生高密度的等离子体;下电极的射频源是为在其表面形成射频鞘层,以实现各向异性的刻蚀工艺过程.

* 国家重点基础研究发展规划资助项目(批准号:2004CB318007)

[†] 通信作者. Email: zhuyu@tsinghua.edu.cn

2007-09-08 收到

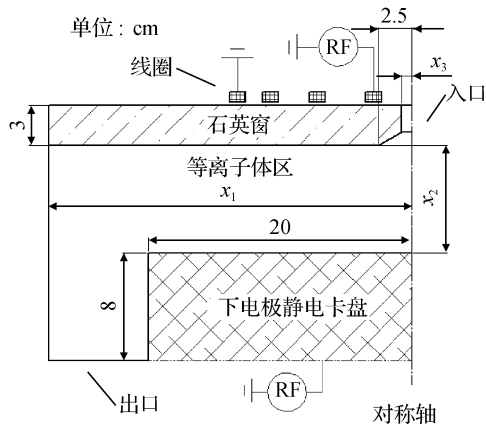


图 1 ICP 刻蚀机工艺腔室 2D 轴对称示意图

Fig.1 Two-dimensional axisymmetric schematic illustration of the ICP etcher

因为该腔室结构适合加工 300mm 直径的硅片,其下电极半径尺寸固定为 20cm. 作者以氩气为研究对象. 为分析进气流量影响规律,排除出口条件影响的干扰,作者将出口条件设置为涡轮分子泵的最大抽速,出口速度条件随腔室半径的变化而相应改变. 进气口的静温条件设为 235K(详细设置请见参考文献[5]). 经过实验验证^[3],商业软件 CFD-ACE+ 对稀薄气体的流体模拟具有一定的可靠性,适合作为本研究的仿真分析工具.

3 回归正交试验设计

回归正交设计,是把正交试验设计、回归数据处理和回归精度统一起来的回归设计与分析方法^[8]. 首先构造函数

$$y = 100 \times \frac{\sum_{k=1}^{N_0} [P_k - \min(P_k)]}{\sum_{k=1}^{N_0} P_k} \quad (1)$$

为衡量工艺腔室流场特性的重要试验指标,其中 P_k 为下电极表面上方 0.1cm 处气压分布函数(半径取值范围为 0~20cm), N_0 为采样点数,默认为 100. 函数 y 是腔室半径方向上气压分布相对不均匀度的表征,其意义在于构造了一个函数,可以在不同气压均值下依然能够比较气压分布的均匀性. 例如,图 2 表示的是表 2 中试

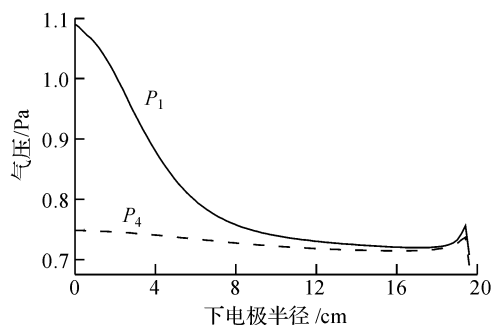


图 2 下电极上方 0.1cm 处的气压分布对比

Fig.2 Comparison of pressure distribution at 0.1cm above the lower electrode in two conditions

验 1 和 4 的气压分布,由以上定义求得 $y_1 = 11.658$, $y_4 = 5.103$,显然 $y_4 < y_1$,这就表明试验 4 的气压分布均匀性优于试验 1.

如前所述,影响工艺腔室流场特性的关键参数有腔室半径 x_1 、腔室高度 x_2 、进气口半径 x_3 与进气流量 x_4 . 从表面看,4 个因素彼此不相关,不需考虑因素之间的交互作用,然而前期研究表明,据此得到的一次回归方程显著性较差. 因此本文采用 4 因素(1/2 实施)二次回归正交设计方法来建立气压分布均匀度与诸因素之间的较为精确的数量关系. 构造 4 个变量的二次模型如下:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^4 b_j x_j + \sum_{k=1}^3 \sum_{j=k+1}^4 b_{kj} x_k x_j + \sum_{j=1}^4 b_{jj} x_j^2 \quad (2)$$

其中 b_0, b_j, b_{kj}, b_{jj} 分别是零次、一次、交互及二次项的系数; x_j 为各因素水平值. 用 x_{1j} 和 x_{2j} 分别表示 x_j 的下限和上限,分别称为因素的上、下水平. 为获得二次回归正交表,需要对 x_j 编码,其目的是要把实际试验水平 x_{1j}, x_{0j} 和 x_{2j} 进行“正交性”变换

$$x_{0j} = \frac{1}{2}(x_{1j} + x_{2j}) \quad \Delta_j = \frac{x_{2j} - x_{1j}}{2} \quad (3)$$

其中 x_{0j} 称作该因素的基准水平(CK); Δ_j 为 x_j 的变化区间. 所谓编码,即对 x_j 作线性变换,如下式所示:

$$z_{kj} = \frac{x_{kj} - x_{0j}}{\Delta_j}, k = 0, 1, 2; j = 1, 2, 3, 4 \quad (4)$$

$$z'_{ij} = z_{ij}^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_{ij}^2 \quad (5)$$

为使组合设计具有正交性,需确定星号臂 r 长度:

$$r^2 = \frac{\sqrt{(m_c + 2p + m_0)m_c} - m_c}{2} \quad (6)$$

其中 因素数目 p 取 4;中心点试验重复次数 m_0 取 1; m_c 为二水平试验点数. 因本文拟采取 4 因素 1/2 实施,故取 $m_c = 2^{p-1}$,简单求得 $r = 1.353$. 根据结构设计经验,在已知设备结构与工艺参数点附近安排试验,使参数变化范围符合设计规律,确定 4 因素水平编码如表 1 所示. 考虑 4 因素 1/2 实施仅需完成 8 次二水平四因素试验,8 次星号点试验,以及 1 次中心点试验,共 17 次试验. 若确定二次模型的系数,每个变量至少要取 3 个水平,而此设计试验点比三水平全因素试验要少得多,且仍保持足够的剩余自由度^[8].

表 1 四因素(1/2 实施)水平编码表

Table 1 Codes of factor levels

因素	腔室半径 x_1/cm	腔室高度 x_2/cm	进气口半径 x_3/cm	进气流量 $x_4/sccm$
上星号臂(+1.353)	31.06	19.77	2.682	502.95
上水平(+1)	30	18	2.4	450
零水平(CK)	27	13	1.6	300
下水平(-1)	24	8	0.8	150
下星号臂(-1.353)	22.94	6.24	0.518	97.05
变化间距 Δ_j	3	5	0.8	150

表 2 回归正交试验结果分析计算表
Table 2 Analysis of results of regression orthogonal experiments

试验号	z_0	z_1	z_2	z_3	z_4	$z_1 z_2$	$z_1 z_3$	$z_1 z_4$	$z_2 z_3$	$z_2 z_4$	$z_3 z_4$	z_1'	z_2'	z_3'	z_4'	y
1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	-1	0.314	0.314	0.314	0.314	11.658
2	1	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	0.314	0.314	0.314	0.314	7.242
3	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	0.314	0.314	0.314	0.314	4.153
4	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	0.314	0.314	0.314	0.314	5.103
5	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	0.314	0.314	0.314	0.314	9.859
6	1	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	0.314	0.314	0.314	0.314	10.222
7	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	0.314	0.314	0.314	0.314	4.309
8	1	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	0.314	0.314	0.314	0.314	3.183
9	1	-1.353	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.145	-0.686	-0.686	-0.686	6.103
10	1	1.353	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1.145	-0.686	-0.686	-0.686	5.141
11	1	0	-1.353	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.686	1.145	-0.686	-0.686	14.645
12	1	0	1.353	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.686	1.145	-0.686	-0.686	3.633
13	1	0	0	-1.353	0	0	0	0	0	0	0	-0.686	-0.686	1.145	-0.686	6.048
14	1	0	0	1.353	0	0	0	0	0	0	0	-0.686	-0.686	1.145	-0.686	4.919
15	1	0	0	0	-1.353	0	0	0	0	0	0	-0.686	-0.686	-0.686	1.145	3.216
16	1	0	0	0	1.353	0	0	0	0	0	0	-0.686	-0.686	-0.686	1.145	6.229
17	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0.686	-0.686	-0.686	-0.686	5.340
B_j	111.003	-1.885	-37.132	-5.758	10.931	-2.945	2.704	-3.877	3.877	-2.704	2.945	0.168	13.047	-0.338	-3.127	
d_j	17.000	11.661	11.661	11.661	11.661	8.000	8.000	8.000	8.000	8.000	8.000	6.705	6.705	6.705	6.705	
b_j	6.530	-0.162	-3.184	-0.494	0.937	-0.368	0.338	-0.485	0.485	-0.338	0.368	0.025	1.946	-0.050	-0.466	
U_j		0.305	118.238	2.843	10.247	1.084	0.914	1.879	1.879	0.914	1.084	0.004	25.388	0.017	1.458	
F_j		Δ	1091.950	26.258	94.628	10.013	8.441	17.355	17.355	8.441	10.013	Δ	234.462	Δ	13.465	
显著水平			0.01	0.01	0.01	0.025	0.025	0.01	0.01	0.025	0.025		0.01		0.01	

表中有" Δ "符号对应的 U_j 值直接并入剩余项。

4 试验结果分析

4.1 试验结果回归分析

为计算回归截距,在因素 1 前增加一列 $z_0 = 1$. 考察交互项与二次项,得到试验方案、试验结果以及分析计算,如表 2 所示. 其中各统计量计算公式如下:

$$\begin{cases} B_0 = \sum_{i=1}^N y_i, & B_j = \sum_{i=1}^N z_{ij} y_i \\ B_{kj} = \sum_{i=1}^N z_{ik} z_{ij} y_i, & B_{jj} = \sum_{i=1}^N z'_{ij} y_i \end{cases} \quad (7)$$

$$b_0 = \frac{B_0}{N}, b_j = \frac{B_j}{d_j}, b_{kj} = \frac{B_{kj}}{d_{kj}}, b_{jj} = \frac{B_{jj}}{d_{jj}} \quad (8)$$

$$U_j = \frac{B_j^2}{d_j}, U_{kj} = \frac{B_{kj}^2}{d_{kj}}, U_{jj} = \frac{B_{jj}^2}{d_{jj}} \quad (9)$$

其中,

$$d_j = \sum_{i=1}^N z_{ij}^2, d_{kj} = \sum_{i=1}^N (z_{ik} z_{ij})^2, d_{jj} = \sum_{i=1}^N (z'_{ij})^2 \quad (10)$$

其中 b_j 为回归方程的回归系数; N 为所做试验数. 在用正交设计所求得的回归方程中,每一个回归系数的绝对值大小都刻画了对应因素的作用大小. 由于经过无量纲的编码变换后,所有因素的取值都是 1 和 -1,它们在所研究的区域内是“平等的”,因而使得所求的回归系数不受因素的单位 and 取值的影响,而直接反映了该因素作用的大小. 回归系数的符号直接反映了因素的影响是正

还是负^[8]. 由表 2 可以看出,各回归系数中 $b_2 = -3.184$,为最大,可以判定腔室高度是影响腔室气压分布均匀性的关键因素,其中负号表示高度越大气压分布越均匀. 接下来影响权重依次是气体流量、进气口半径以及腔室半径. 有关腔室高度与气体流量独自对气压分布的影响可以参见文献[5],这也再次印证了设计腔室结构时将腔室高度作为主要因素是有根据的,而以往认为腔室半径的影响权重与腔室高度的影响权重同级的直观印象是不正确的.

4.2 回归方程与偏回归系数的显著性检验

$$\text{总平方和 } SS_T = \sum_{i=1}^N y_i^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N y_i \right)^2 = 167.012,$$

自由度 $f_T = N - 1 = 16$. 回归平方和 $U = \sum_j U_j$, 把 U_j 中较小的项 z_1, z_1' 和 z_3' 归入剩余平方和 Q_{e2} , 故 $U = 165.929, f_U = 6$. 而剩余平方和为

$Q_{e2} = SS_T - U = 167.012 - 165.929 = 1.083$
 $f_{e2} = n - 1 - f_U = 10$. $MS_{e2} = Q_{e2}/f_{e2} = 0.1083$. 则回归系数的检验为:

$$F_j = \frac{U_j}{MS_{e2}}, F_{kj} = \frac{U_{kj}}{MS_{e2}}, F_{jj} = \frac{U_{jj}}{MS_{e2}} \quad (11)$$

计算结果已列在表中,各偏回归系数除 b_1, b_{23} 外均达显著水平. 进而考察回归方程的显著性,则有

$$F_j = \frac{U/f_U}{MS_{e2}} = \frac{165.929/6}{1.083/10} = 255.40$$

所以查 F 函数表有 $F_j \gg F_{0.01}(6, 10) = 5.39$, 可见所建

立的回归方程非常显著.

4.3 拟合度检验

进而需要对回归方程进行拟合度检验,在零水平上安排3次重复试验 $y_{01} = 5.340$, $y_{02} = 5.270$, $y_{03} = 5.400$ 误差平方和

$$Q_c = \sum_{i=1}^3 y_{0i}^2 - \frac{1}{3} \left(\sum_{i=1}^3 y_{0i} \right)^2 = 85.448 - 85.440 = 0.008,$$

$$f_c = 3 - 1 = 2.$$

失拟平方和 $Q_{Lf} = Q_{e2} - Q_c = 1.083 - 0.008 = 1.075$, $f_{Lf} = f_{e2} - f_c = 8$. 则拟合度检验为:

$$F_{Lf} = \frac{Q_{Lf}/f_{Lf}}{Q_c/f_c} = \frac{1.075/8}{0.008/2} = 33.593$$

查表有 $F_{Lf} < F_{0.025}(8, 2) = 39.37$, 结果表明回归方程拟合得较好.

4.4 回归方程的讨论与验证

由上述分析所得回归方程为

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 6.530 - 3.184z_2 - 0.494z_3 + \\ & 0.937z_4 - 0.368z_1z_2 + 0.338z_1z_3 - \\ & 0.485z_1z_4 + 0.485z_2z_3 - 0.338z_2z_4 + \\ & 0.368z_3z_4 + 1.946z_2^2 - 0.466z_4^2 \end{aligned} \quad (12)$$

将(4)和(5)式代入(12)式得到用自然变量 x_j 表示的回归方程

$$\begin{aligned} \hat{y} = & 15.18889 + 0.41660x_1 - 2.05724x_2 - \\ & 6.91333x_3 + 0.048687x_4 - 0.024533x_1x_2 + \\ & 0.14083x_1x_3 - 1.07667 \times 10^{-3}x_1x_4 + \\ & 0.12125x_2x_3 - 4.5 \times 10^{-4}x_2x_4 + 3.06667 \times \\ & 10^{-3}x_3x_4 + 0.07784x_2^2 - 2 \times 10^{-5}x_4^2 \end{aligned} \quad (13)$$

为了验证回归方程的有效性,再进行一次仿真计算,将仿真结果与回归方程计算结果作对比分析.分别取 $x_1 = 28\text{cm}$, $x_2 = 12\text{cm}$, $x_3 = 10\text{cm}$, $x_4 = 250\text{sccm}$. 仿真计算结果为 5.825, 用回归方程计算结果为 6.270, 相对误差仅为 7.6%. 不难验证, 对绝大多数条件组合用该回归方程计算的相对误差均在 10% 以内, 具有一定的工程参考价值. 相对于建立几何模型、划分网格、选择物理方程、设定边界条件、赋初值、设置求解器以及后处理等一系列复杂的建模仿真过程, 使用回归方程的方法可以方便、快捷地评价工艺腔室气压分布的均匀性, 大大提高了设计效率. 通过回归系数的分析, 可以较为清

晰地分辨出影响气压分布均匀性的关键因素, 为设计人员指明了设计的主要方向.

5 结论

利用商业软件 CFD-ACE+ 对 ICP 刻蚀机工艺腔室的流场特性进行仿真分析, 使用二次回归正交试验设计的方法, 考察了腔室半径、腔室高度、进气口半径以及进气流量对气压分布均匀性的影响. 结果表明腔室高度为影响气压分布均匀性的关键因素, 腔室半径的影响权重相对很小. 进而得出了影响因素与气压分布均匀性之间的二次回归方程, 通过回归方程可以在设计工艺腔室前方便地估算气压分布均匀性, 具有很大的工程应用价值. 同时, 模型的几何结构代表了多数刻蚀机、CVD 以及氧化扩散炉等设备的基本构型, 具有相当的适用性和代表性.

尽管如此, 本研究仅考察了流场对气压分布均匀性的影响, 更有意义的研究应分析等离子体的分布状况, 这也是下一步的研究内容.

参考文献

- [1] Lee J W, Jung P G, Devre M, et al. Optimization of gas flow and etch depth uniformity for plasma etching of large area GaAs wafers. *Solid-State Electron*, 2002, 46: 685
- [2] Khater M H, Overzet L J, Cherrington B E. Effects of gas distribution on polysilicon etch rate uniformity for a low pressure, high density plasma. *J Vac Sci Technol B*, 1998, 16(2): 490
- [3] Singh V, Berney B, Krishnan A. Design low pressure systems with continuum models. *J Vac Sci Technol A*, 1996, 14(3): 1252
- [4] Kiehlbauch M W, Graves D B. Effect of neutral transport on the etch product lifecycle during plasma etching of silicon in chlorine gas. *J Vac Sci Technol A*, 2003, 21(1): 116
- [5] Cheng Jia, Zhu Yu. Gas flow simulation research on reaction chamber of ICP etcher. *Semiconductor Technology*, 2007, 32(1): 43 (in Chinese) [程嘉, 朱煜. ICP 刻蚀机反应腔室气流仿真研究. *半导体技术*, 2007, 32(1): 43]
- [6] Economou D, Bartel T. Direct simulation Monte Carlo (DSMC) of rarefied gas flow during etching of large diameter (300-mm) wafers. *IEEE Trans Plasma Sci*, 1996, 24(1): 131
- [7] Ra Y, Bradley S, Chen C. Etching of aluminum alloys in the transformer-coupled plasma etcher. *J Vac Sci Technol A*, 1994, 12(4): 1328
- [8] Yuan Zhifa, Zhou Jingyu. Test design and analysis. Beijing: Higher Education Press, 2000 (in Chinese) [袁志发, 周静芋. 试验设计与分析. 北京: 高等教育出版社, 2000]

Analysis of Processing Chamber Flow Field Characteristics for an ICP Etcher Based on Regression Orthogonal Design*

Cheng Jia, Zhu Yu[†], Duan Guanghong, and Wang Chunhong

(*Department of Precision Instruments and Mechanology, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

Abstract: We attempt to investigate the influence of the processing chamber configuration of an inductively coupled plasma (ICP) etcher on flow field characteristics. Four parameters, including chamber radius, chamber height, inlet radius, and inlet mass flow, are arranged regression orthogonally to study the two-dimensional flow field models of the processing chamber of the ICP etcher, which was built in the commercial software, CFD-ACE+. A function is defined to evaluate the uniformity of the pressure distribution above the electrostatic chuck. The quantificational relation between key parameters and the uniformity of pressure distribution was found through regression analysis of experimental results, and, furthermore, a quadric regression equation with high fitting degree was determined. The result demonstrates that the chamber height is the most significant factor. The results from the regression equation agree well with those from simulation. This research can provide insight into the study and design configuration of etchers, chemical vapor deposition (CVD) equipment, and oxidation/diffusion systems that are similar in configuration and processing condition.

Key words: inductively coupled plasma; regression orthogonal design; CFD-ACE+; processing chamber

PACC: 5265

Article ID: 0253-4177(2008)04-0780-05

* Project support by the State Key Development Program for Basic Research of China (No. 2004CB318007)

[†] Corresponding author. Email: zhuyu@tsinghua.edu.cn

Received 8 September 2007