

感应耦合等离子体刻蚀机二维放电模拟*

程 嘉 朱 煜[†] 汪劲松

(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)刻蚀机腔室与线圈结构以及工艺参数对等离子体分布均匀性的影响,基于商业软件 CFD-ACE+ 中等离子体与电磁场等模块建立了 ICP 刻蚀机二维放电模型. 仿真研究了典型工艺条件(1.33Pa,200W,200sccm)下氩等离子体电子温度与电子数密度的空间分布,对比了不同气压与功率条件下等离子体参数在硅片表面的一维分布. 结果表明,电子数密度随气压与功率的增加而升高;电子温度随气压的增加而降低,随功率增加在较小范围内先降低再升高. 通过分析屏蔽板对等离子体参数的影响,发现其有助于提高等离子体密度. 进而发现屏蔽板的孔隙率越大,电子温度越高,电子数密度则越低.

关键词: 干法腐蚀工艺; 感应耦合等离子体; 电子数密度; 电子温度

PACC: 5265

中图分类号: TN405.98

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2007)06-0989-06

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. 在 IC 制造流程中,有超过三分之一的设备使用了等离子体技术,譬如刻蚀机、CVD 及 PVD 等. 其中应用最为广泛的是感应耦合等离子体(inductively coupled plasma, ICP)源,即用电感线圈将频率为 13.56MHz 的射频(radio frequency, RF)功率输入到真空腔室中,激发工艺气体而产生高密度($10^{11} \sim 10^{12} \text{ cm}^{-3}$)的低温等离子体. 反应腔室的下方也置有射频源,可以在待加工硅片表面形成射频鞘层(sheath),等离子体即通过鞘层与硅片发生物理化学反应,实现刻蚀、成膜等工艺过程.

以 ICP 刻蚀机为例,随着硅片尺寸从 200,300,到 450mm 的不断增大,保证刻蚀工艺均匀性的难度越来越高. 这要求刻蚀机能够产生均匀分布的高密度等离子体. 其腔室结构在很大程度上决定了工艺气体的分布,其与电感线圈的结构共同决定了等离子体的分布,这是影响刻蚀均匀性最根本的原因. 目前,国内 IC 装备的设计与开发通常采用基于经验的调试方法,具有开发周期长、试制成本高的缺点. 而国外主要的刻蚀机生产商(AMAT, LAM, TEL 等)早已将仿真分析研究应用于产品的设计、改进和销售的各个环节,同时 ICP 放电模拟问题也一直是低温等离子体领域的研究前沿与热点. 因此,

对 ICP 刻蚀机进行等离子体放电模拟具有实际的工程意义和重要的学术价值.

本文以 ICP 刻蚀机反应腔室二维轴对称模型为例,使用商业软件 CFD-ACE+ 对典型工艺条件(1.33Pa,200W,200sccm)下氩等离子体参数在反应腔室中的空间分布进行了仿真研究,进而对比分析了不同气压(1.33~7.99Pa)及不同功率(100~500W)条件下,氩等离子体参数在硅片表面的分布情况. 最后研究了等离子体屏蔽板对反应腔室内等离子体参数的影响.

2 等离子体放电模型

研究等离子体放电模型的方法主要有流体动力学方法和动理学方法两大类. 通常认为后者在低气压下比前者更为精确,同时计算量也更大^[1]. 但是,在文献[2]中通过比较发现,流体动力学模型在非常低的气压条件下依然保持了令人吃惊的准确性,尽管此时流体方程的适用性受到普遍质疑. 为保留动理学方法的精确性,同时减少计算量, Kushner 等人^[3~5]开发了混合模型(即流体动力学与动理学相结合).

CFD-ACE+ 基于混合模型,是一种能够计算流体、热传递、化学反应、电磁场以及等离子体等多物理过程耦合的商业软件. 该软件代码早已被应用于半导体工业领域,并取得了较好的仿真分析效果^[6,7].

* 国家重点基础研究发展计划资助项目(批准号:2004CB318007)

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

2006-12-01 收到,2007-01-04 定稿

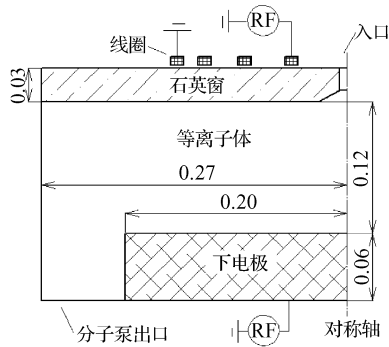


图 1 ICP 刻蚀机 2D 轴对称示意图(单位:m)

Fig. 1 Two-dimensional axisymmetric schematic illustration of the ICP etcher (Unit:m)

2.1 工艺描述

假定一简单 ICP 刻蚀机 2D 轴对称模型,如图 1 所示.其中反应腔室直径为 0.54m,高度为 0.12m,下电极直径为 0.40m.假定以氩气为工艺气体,从厚度为 0.03m 的石英介质窗中部喷嘴射入,质量流量为 200scm.反应腔室采用下方抽气方式,涡轮分子泵的抽速设为 1400L/s.石英窗上方是平面轴对称结构射频线圈,线圈截面为矩形.射频线圈接一频率为 13.56MHz 的 RF 功率源,感应耦合产生高密度等离子体.下电极外接另一 RF 源,产生射频鞘层及负偏压,实现刻蚀工艺过程.

2.2 控制方程

在 CFD-ACE+ 的 ICP 模型中,根据中性粒子、离子和电子各自的特点采用不同的方式处理.对包括气体分子和基团在内的中性粒子,使用不带电的流体模型求解质量和动量守恒方程.对离子,动量方程中加入了电场力的作用.此外,在质量平衡方程中的通量密度由下面的漂移扩散近似方程描述:

$$J_i = -\rho D_i \nabla y_i + \rho y_i u_{di} + J_c \quad (1)$$

其中 y , ρ 和 D 分别代表质量分数,质量密度和扩散系数; u_{di} 是扩散速度,由下式确定:

$$u_{di} = E(q_i \mu_i - \sum q_j \mu_j y_j) \quad (2)$$

其中 E , q 和 μ 分别代表电场、电荷以及迁移率; J_c 代表等离子体区的质量通量,用来满足质量守恒方程 $\sum J_i = 0$.离子和中性粒子的温度近似相等,都由单一的焓平衡方程来描述.

在 CFD-ACE+ 中对 ICP 反应器,电子密度和电场通过准电中性假设求得.电子通量密度 J_e 的计算是通过求解下面的漂移扩散近似方程而不是动量守恒方程获得的:

$$J_e = \mu_e n_e E - D_e \nabla n_e \quad (3)$$

其中 n_e 代表电子密度.由电子温度 T_e 表示的能

表 1 氩等离子体的气相反应

Table 1 Gas-phase reactions for argon plasma

Chemical reaction	Reaction rate
Ionization & excitation	
$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	Cross section from JILA
$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar}^* + e$	Arrhenius type
$\text{Ar}^* + e \rightarrow \text{Ar}^+ + 2e$	Arrhenius type
Elastic collision	
$\text{Ar} + e \rightarrow \text{Ar} + e$	Cross section from JILA

量方程如下所示:

$$\frac{3}{2} \times \frac{\partial}{\partial t} (n_e T_e) + \nabla \cdot \left(\frac{5}{2} T_e J_e - \frac{5}{2} n_e D_e \nabla T_e \right) = -J_e \cdot E + P_{\text{ext}} - L \quad (4)$$

其中 能量通量包括对流项 $(5/2) T_e J_e$ 和热扩散项 $(5/2) n_e D_e \nabla T_e$. $-J_e \cdot E$, P_{ext} 和 L 分别代表电子的 Joule 加热,外部无碰撞加热功率,以及反应(或碰撞)的能量损失.

在电磁场模块中由下式可以计算得到电场:

$$E = -\nabla \varphi - \frac{\partial A}{\partial t} \quad (5)$$

其中 φ 和 A 分别表示静电势和磁矢势,可以通过在频域内使用有限体积法(FVM)求解 Maxwell 方程组来得到.通过整理,可以得到频域内的求解方程如下所示:

$$\frac{1}{\mu_0 \mu_r} \nabla^2 \tilde{A} = -\epsilon_r \epsilon_0 \omega^2 \tilde{A} + j\omega \epsilon_r \epsilon_0 \nabla \tilde{\varphi} + j\omega \sigma \tilde{A} + \sigma \nabla \tilde{\varphi} - \sigma \mathbf{u} \times \tilde{B} - \tilde{J}_s \quad (6)$$

其中 μ_0 , μ_r 分别是自由空间磁导率和相对磁导率; ϵ_0 , ϵ_r 分别是自由空间介电常数和相对介电常数; σ 为电导率; \mathbf{u} 为流体速度矢量; B 为磁感应强度; J_s 是用户定义电流.该方程右侧依次分别为位移项(右边前两项)、涡流项、传导项、对流项及其他项.

等离子体的气相反应与腔室壁面的表面反应在化学模块中完成,以下将对其分别进行描述.

2.3 气相反应

在典型的 ICP 反应器中电子温度 T_e 约为重粒子温度 T_i 的 100 倍左右,二者的热运动速度差别巨大,这就使得等离子体反应主要由电子,重粒子间的碰撞来决定,相对而言重粒子之间的碰撞反应则可以忽略不计.表 1 列出了低温氩等离子体电离、激发与弹性碰撞的最主要的四个反应方程以及其在 CFD-ACE+ 中反应速率的表示形式.其中 Ar^* 表示亚稳态 Ar 原子.

2.4 表面反应

在 CFD-ACE+ 中,表面反应的速率由粘附系

数(sticking coefficient)定义. 如果不考虑溅射, 惰性气体 Ar 气在壁面的反应比较简单, 无论是在 Si 片表面还是反应腔室壁面, 最主要的反应是复合, 如下所示:



其反应速率可以表示为 $\text{Sc}[\text{Ar}^+]$ 与 $\text{Sc}[\text{Ar}^*]$, 其中 Sc 表示相应反应的粘附系数, $[\text{Ar}^+]$, $[\text{Ar}^*]$ 分别表示 Ar^+ 与 Ar^* 的体浓度. 简单起见, 在这里认为 Sc 均为 1.

3 结果与讨论

3.1 边界条件

因为反应腔室中气压较低 ($\sim 1\text{Pa}$), 且入口直径与腔室直径相比小很多 ($1/36$), 因此可以估算氩气在入口的速度与音速相当. 采用理想气体假设, 则由等熵关系:

$$T_0/T = 1 + (\gamma - 1)M^2/2 \quad (9)$$

可得入口处 Ar 气的静温为 224K . 其中 M 为马赫数(当为音速时 M 等于 1); T_0 为驻点温度, 假设等于大气温度 (25°C); T 为入口处静温; γ 为比热比(对于 Ar 气绝热过程 γ 等于 1.658). 在气体膨胀过程中存在不可逆因素, 因此实际的温度要比该值略高. 因入口处的实际温度无法获得, 于是假设入口的实际静温比理想温度高 5% (235K). 定义入口边界条件为质量流量入口, 入口温度由上式得到. 反应腔室壁面温度略高于室温, 设为 320K , 设硅片表面温度为 350K .

当入口流量超过一定值后对仿真结果的影响不如其他操作变量大^[6], 因此, 本研究固定入口质量流量为 200sccm 不变, 而改变腔室气压 ($1.33 \sim 7.99\text{Pa}$) 及上电极射频功率 ($100 \sim 500\text{W}$), 以研究其对等离子体参数的影响.

3.2 结果与讨论

当气压为 1.33Pa , 射频功率为 200W 时, 电子温度 T_e 的等值分布如图 2(a) 所示. 其最大值为 2.668eV , 位于射频线圈 2, 3 匝之间, 这与以往平面线圈的仿真结果相似^[7].

同一工艺条件下, 电子数密度 n_e 的等值分布如图 2(b) 所示. 而在反应腔室内部电子数密度最大值为 $1.04 \times 10^{17}\text{m}^{-3}$, 位于反应腔室中心位置. 因为电子与离子的复合反应主要发生在壁面附近, 所以腔室中心处的电子数密度较高, 并向壁面逐级递减.

本文通过对比 Si 片上方 0.005m 处电子温度与电子数密度的径向分布, 分析了 200W 射频功率

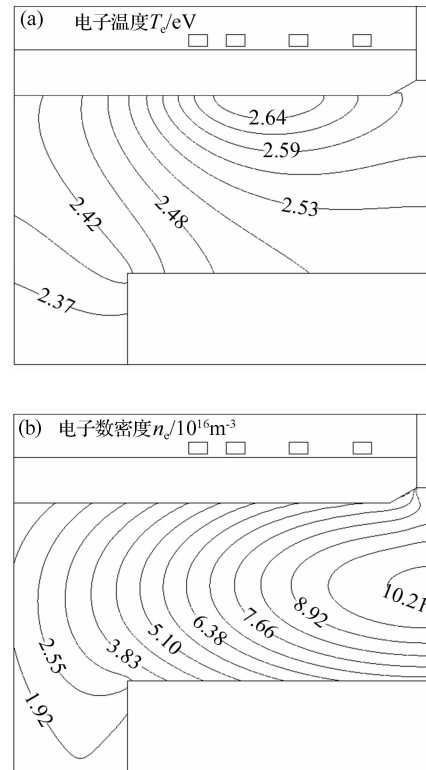


图 2 1.33Pa, 200W 条件下电子温度(a)与电子数密度(b)的等值分布

Fig.2 Isoline maps of electron temperature(a) and electron number density (b) at 1.33Pa, 200W

条件下不同腔室气压对等离子体参数分布的影响, 如图 3(a), (b) 所示. 由图看出, 随着气压增加, 电子温度降低, 而电子数密度升高. 这是因为在较高的气压条件下, 等离子体平均自由程较小, 电子与重粒子的碰撞比较频繁, 会产生更多数量的电子, 同时电子的能量快速地传给重粒子, 从而导致电子能量即电子温度降低^[8]. 另一方面, 本模型采用中心进气、外侧下方抽气方式, 腔室中心轴处气压、密度较高, 加之壁面复合反应的影响, 使得电子数密度沿径向降低. 同时, 随着腔室气压的升高, 双极扩散效应起主导作用, 这一空间分布不均匀性愈加明显^[8], 如图 3(b) 所示.

本文分析了气压在 1.33Pa 时不同射频功率对等离子体参数分布的影响, 如图 4(a) 和 (b) 所示. 由图 4(a) 可以看出, 随着射频功率从 100W 增大到 500W , 电子温度基本保持不变(同一位置电子温度相对误差 $(T_{e\text{Max}} - T_{e\text{Min}})/T_{e\text{Max}} \approx 1\%$), 仅在较小的范围内会先降低再升高; 由图 4(b) 可知, 电子数密度随功率增加而升高, 且腔室中部增加较为明显. 这是因为在如此低的气压条件下, 基于无碰撞统计加热的反常趋肤效应起主导作用, 这时随着射频输入功率的提高, 电子所获得的能量增加, 进而导致气体

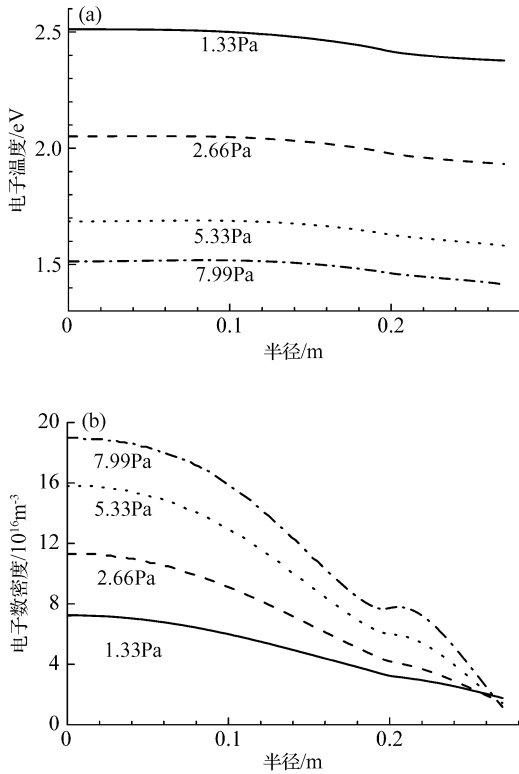


图 3 不同气压下电子温度(a)与电子数密度(b)的径向分布
射频率率为 200W.
Fig.3 Electron temperature(a) and electron number
density (b) radial profiles for different pressures at
200W RF power

电离率的增大,这样单位时间内电离产生的电子和离子数目则更多.同时,因发生了更多的碰撞与电离反应,使得电子能量得到消耗,造成电子温度不会发生明显变化.当输入功率较低时,电子所吸收能量的增加略小于其消耗能量的增加,电子温度随功率提高而略降低;当输入功率大于某一值后,电子温度则随功率的提高而升高.

在 ICP 刻蚀机中,为提高腔室中等离子体密度,在抽气通道与腔室结合处会放置密布小孔或窄槽的等离子体屏蔽板,如图 5(a)中虚线框所示.通常窄槽宽度为 1.5mm,呈辐状均匀密布在屏蔽板上,为使屏蔽板不致过多影响分子泵抽真空效果,窄槽需要尽可能紧密排列.在 CFD-ACE + 中通过设置多孔介质材料来模拟屏蔽板上密布的孔槽,等价计算得到孔隙率为 0.3.将图 5 与图 2 对比发现,对于同一工艺条件,增加屏蔽板后,腔室中电子温度降低,而电子数密度有明显增加,其最大值达到 $1.16 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$.特别是,在屏蔽板外侧电子数密度仅为 $1.41 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ (见图 5(b)),而不加屏蔽板时此处电子数密度可达 $1.92 \times 10^{16} \text{ m}^{-3}$ (见图 2(b)).这是因为在孔槽壁面会发生复合反应,使得大部分等离

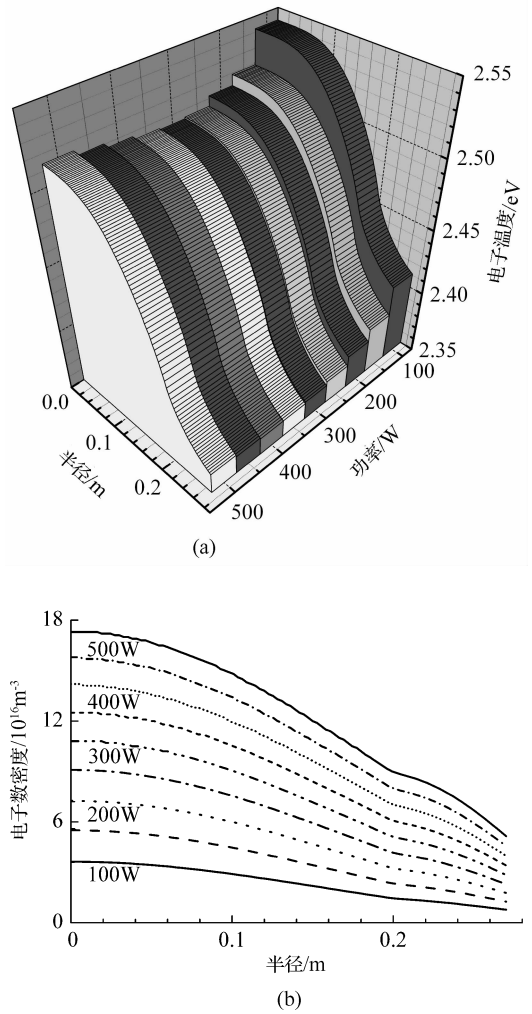


图 4 不同射频率率下电子温度(a)与电子数密度(b)的径向分布
气压 1.33Pa
Fig.4 Electron temperature(a) and electron number
density (b) radial profiles for different RF powers at
1.33Pa

子体被限制在反应腔室之中;同时,屏蔽板会阻碍气体流动,对腔室内气压有一定的提升作用,由图 3 可知,这有助于提高腔室内电子数密度,并降低电子温度.由此看出,屏蔽板能有效阻止等离子体从腔室中外泄,提高生产效率.但是,流导过小会阻碍气体流动,影响涡轮分子泵抽真空效果,反应产物也不易排出,反而降低生产效率.

进一步考察不同孔隙率的屏蔽板对反应腔室内电子温度与电子数密度有何影响.如图 5(b)点划线所示,为始于分子泵出口,距离侧壁面 0.235m 处直到石英窗下表面的一条竖直的观测线,沿此观测线可以得到如图 6 所示的电子温度与电子数密度的分布情况.由图 6(a)可以看出,当孔隙率增大时,电子温度升高,但是升高的幅度逐步变小,而且在屏蔽板两侧电子温度没有明显的跳跃.由图 6(b)可以看

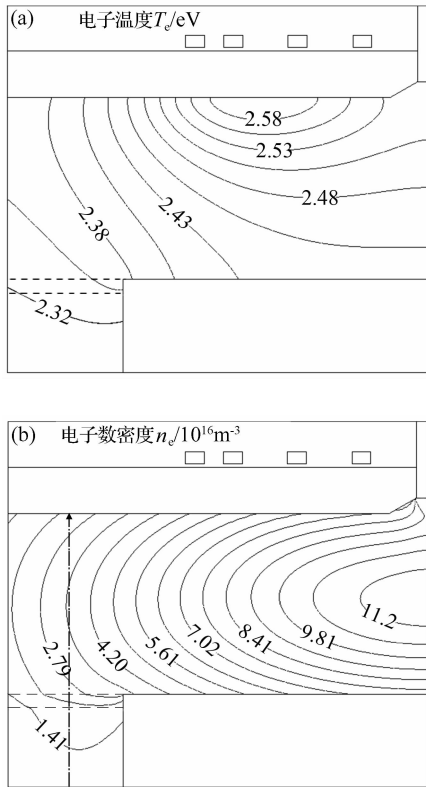


图 5 带屏蔽板时 1.33Pa, 200W 条件下的电子温度 (a) 与电子数密度 (b) 的等值分布
Fig.5 Isoline maps of electron temperature (a) and electron number density (b) with the shielding slab at 1.33Pa, 200W

出, 孔隙率越大腔室内部电子数密度越小, 而且减小的幅度逐级递减. 同时, 在屏蔽板两侧, 电子数密度有较大的跳跃, 孔隙率越大, 这种变化越明显. 当孔隙率较大时 (0.30~0.60), 屏蔽板外侧的电子数密度分布接近, 当孔隙率较小时 (0.15), 外侧的电子数密度下降较明显. 这是因为孔隙率的大小决定了气体与等离子体通过屏蔽板的难易程度, 孔隙率越大, 各种气体分子、离子、电子等越容易通过屏蔽板, 使得反应腔室内气压越低, 由上面分析可知, 会造成电子温度降低, 而电子数密度增高的情况. 同时, 随着孔隙率的增加, 屏蔽板对反应腔室内气压降低的影响越来越小, 这就使得上述变化逐步减缓.

4 结论

感应耦合等离子体刻蚀机的放电模拟对采用 ICP 源的设备均有较大借鉴意义. 本文使用商业软件 CFD-ACE+ 研究了典型工艺条件下的电子温度与电子数密度等参数分布情况, 同时比较了不同气压及射频功率对等离子体参数分布的影响. 研究发现电子数密度呈现中心高, 壁面处低的特性; 电子温

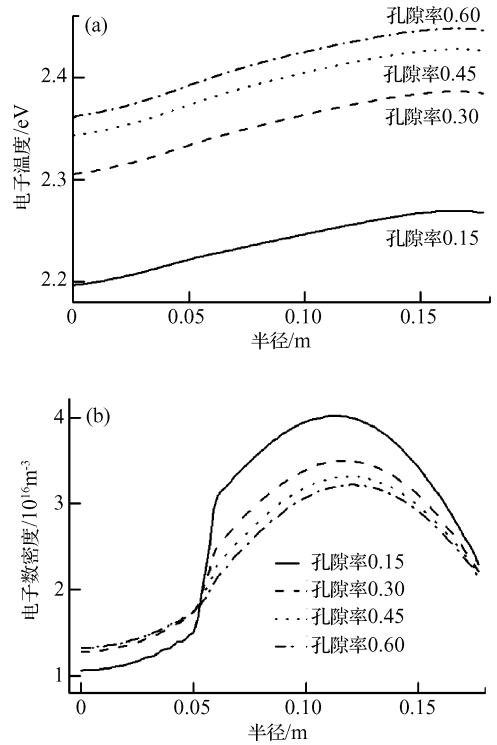


图 6 带屏蔽板时不同孔隙率下电子温度 (a) 与电子数密度 (b) 的纵向分布 气压 1.33Pa, 功率 200W
Fig.6 Electron temperature (a) and electron number density (b) vertical profiles for different porosities with the shielding slab at 1.33Pa, 200W

度为射频线圈第 2, 3 匝之间处最高. 随着气压和功率的增加, 电子数密度升高; 而电子温度则随气压增加而降低, 随功率变化不明显. 通过对比发现, 在反应腔室中增加等离子体屏蔽板能提高腔室气压以及等离子体密度, 能有效阻止等离子体从腔室中外泄, 在一定范围内有助于提高生产效率. 最后, 通过分别对不同孔隙率屏蔽板的仿真分析发现, 屏蔽板的孔隙率越大, 反应腔室内部电子温度越高, 而电子数密度则越低. 通过以上研究, 可以直观、定量地分析 ICP 刻蚀工艺过程中复杂的等离子体参数分布状况, 并在此基础上对反应腔室及线圈结构、工艺参数等进行改进或优化.

本文仅仅仿真分析了 ICP 刻蚀机的二维放电模型, 而对空间结构的射频线圈以及非完全轴对称结构的反应腔室而引起的方位角分布差异考虑还不足, 因此需要建立三维的 ICP 刻蚀机模型并进行更全面的仿真分析, 这将是今后进一步的研究内容.

参考文献

[1] Panagopoulos T. Three-dimensional simulation of inductively coupled plasma reactors. Houston: University of Houston,

- 1999
- [2] Surendra M. Radio frequency discharge benchmark model comparison. *Plasma Sources Science and Technology*, 1995, 4 (1) : 56
- [3] Ventzek P L G, Grapperhaus M, Kushner M J. Investigation of electron source and ion flux uniformity in high plasma density inductively coupled etching tools using two-dimensional modeling. *J Vac Sci Technol B*, 1994, 12(6) : 3118
- [4] Sommerer T J, Kushner M J. Numerical investigation of the kinetics and chemistry of rf glow discharge plasmas sustained in He, N₂, O₂, He/N₂/O₂, He/CF₄/O₂, and SiH₄/NH₃ using a Monte Carlo-fluid hybrid model. *J Appl Phys*, 1992, 71(4) : 1654
- [5] Ventzek P L G, Hoekstra R J, Kushner M J. Two-dimensional modeling of high plasma density inductively coupled sources for materials processing. *J Vac Sci Technol B*, 1994, 12(1) : 461
- [6] Seo S T, Lee Y H, Lee K S, et al. Run-to-run control of inductively coupled C₂F₆ plasmas etching of SiO₂; construction of a process simulator with a cfd code. ICCAS, 2005
- [7] Zhou N, Kolobov V, Meeks E. Integrated gas phase-surface reaction simulator for plasma etch and chemical vapor deposition process development. CFDRS Report, 2001 : 8339/1
- [8] Wang Shuai, Mao Ming, Wang Younian. One-dimension hydrodynamics simulation of an inductively coupled plasma. *High Power Laser and Particle Beams*, 2006, 18(1) : 155 (in Chinese) [王帅, 毛明, 王友年. 感应耦合等离子体的 1 维流体力学模拟. *强激光与粒子束*, 2006, 18(1) : 155]

Two-Dimensional Discharge Simulation of Inductively Coupled Plasma Etcher*

Cheng Jia, Zhu Yu[†], and Wang Jinsong

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

Abstract: We investigate the effects of the configurations of the chamber and the coil of an inductively coupled plasma (ICP) etcher and the process parameters on the homogeneity of plasma distribution. Using the modules of plasma, electromagnetic field, etc. in the commercial software CFD-ACE+, a two-dimensional discharge model of an ICP etcher was built. The spatial distributions of the electron temperature T_e and the electron number density n_e of argon plasma were simulated at 10mTorr, 200W, and 200scm. One-dimensional distribution profiles of the plasma parameters above the wafer's surface at different pressures and powers were compared. These results demonstrate that n_e increases with both pressure and power, and T_e decreases with pressure, and decreases at first but then increases with power in a lesser range. A shielding slab can be used to enhance the plasma density through analyzing its effect on plasma parameters. Furthermore, the results show that T_e increases but n_e decreases with the porosity of the shielding slab.

Key words: dry etching process; inductively coupled plasma; electron number density; electron temperature

PACC: 5265

Article ID: 0253-4177(2007)06-0989-06

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

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

Received 1 December 2006, revised manuscript received 4 January 2007

©2007 Chinese Institute of Electronics