

Modelamento Computacional do Processo de LPCVD: Uniformidade Radial

Masayuki Tsuzuki#, Augusto Cesar Rodolpho+, Vítor Baranauskas+

Lab. de Subsistemas Integráveis da Escola Politécnica da USP

+ Depto. de Semicondutores e Fotônica da Fac. de Eng. Elétrica da UNICAMP

Abstract

We discuss the mathematical modeling of the Low Pressure Chemical Vapour Deposition process (LPCVD) using the stacked wafer configuration in a hot-wall reactor. This paper is concerned only with deposition process in the intrawafer region. We noted that although the transport of reactants in this region is dominated by diffusion, the Fick's law could not be applied directly since the mean free path of the reagents are on the order of wafer spacing. Monte Carlo Method was used to the modeling. Preliminary results are present to show a qualitative agreement with respect to nonuniformity in the wafer edges.

Resumo

Discutimos o modelamento matemático do processo de deposição química a partir da fase vapor em baixas pressões (LPCVD), considerando um reator horizontal de paredes quentes e lâminas empilhadas. Este artigo dedica-se somente ao processo de deposição na região entre-lâminas. Notamos que apesar do transporte dos reagentes nesta região ser dominado pela difusão, as leis de Fick não podem ser aplicadas diretamente, pois o livre caminho médio dos reagentes é da ordem do espaçamento entre lâminas. Utilizamos o Método de Montecarlo para o modelamento. Resultados preliminares são apresentados para mostrar uma concordância qualitativa em relação à não uniformidade de deposição nas bordas das lâminas.

Introdução

A técnica de deposição química de filmes a partir da fase vapor em baixa pressão (LPCVD) é bastante atraente para a microeletrônica pois permite uma excelente cobertura de degraus e boa uniformidade na espessura dos filmes depositados. Para se ter uma alta produtividade no processo comumente as lâminas são empilhadas verticalmente conforme esquematizado na figura 1:

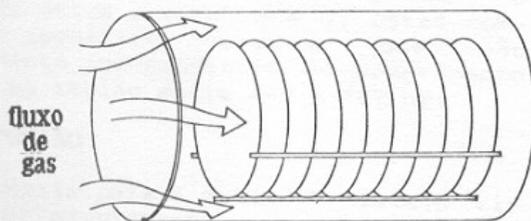


fig. 1 - Esquema de um reator para LPCVD

Estamos nos dedicando ao modelamento e simulação deste processos considerando um reator de paredes quentes. Basicamente existem duas regiões com características de transporte distintas. A primeira é a região anular entre as lâminas e as paredes internas do tubo do forno, e a segunda é a região entre lâminas.

Na região anular o transporte é feito por difusão e convecção, segundo a cinética convencional. Existem vários modelamentos matemáticos com boa concordância com os resultados experimentais para previsão da espessura depositada nas lâminas ao longo de sua deposição no reator, considerando os parâmetros de pressão, concentração e depleção de reagentes devido à reação de deposição^[1 e suas refs.]. Entretanto, na região entre-lâminas as características de transporte são completamente distintas, o que não permite a aplicação direta dos modelos unidimensionais acima mencionados.

No sentido de obtermos um modelamento tridimensional para este processo voltamos nossa atenção principalmente para o modelamento do processo entre-lâminas. Neste caso um fato curioso é a observação de que o caminho livre médio nas pressões utilizadas é da ordem de grandeza do espaçamento das lâminas e portanto os coeficientes de difusão aplicáveis não são os correspondentes à previsão da teoria cinética para um gás livre. Desta forma procuramos abordar o problema com o Método de Montecarlo para simulação direta dos choques das moléculas com as lâminas. Apesar dos resultados ainda serem preliminares pudemos observar qualitativamente uma geometria da espessura do filme depositado mais próxima da realidade.

Convecção e Difusão na Região Entre Lâminas

Uma das maneiras de se abordar a questão das linhas de fluxo de velocidade e pressão dos gases na região entre lâminas é através da resolução das equações de Navier-Stokes e da continuidade. Devido à dificuldade de tratamento algébrico, Middleman e Yeckel^[2] resolveram

numericamente as equações de movimento usando o software comercial FIDAP. Assumindo o regime de fluxo permanente e nenhuma reação entre lâminas os resultados das linhas de fluxo para o número de Reynolds igual a 25 estão esquematizados na figura 2:

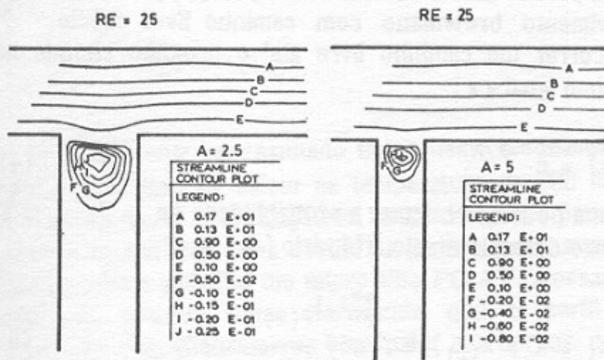


fig. 2 - Linhas de fluxo na região anular e entre-lâminas (Middleman & Yeckel[2])

O parâmetro A é definido como a relação entre o raio e o espaçamento entre lâminas. Os resultados mostram o surgimento de um efeito de convecção nas bordas das lâminas. Tendo em mente este aspecto propusemos recentemente[3] um coeficiente de distribuição entre a concentração na borda das lâminas e do fluxo anular :

$$C(\rho = 0) = K^* C_j \quad (1)$$

onde

C_j : concentração molar na posição j

K^* : coeficiente de distribuição

R : raio da lamina

ρ : posição radial

Considerando agora a taxa de reação nas duas superfícies da região entre lâminas e aplicando a Segunda Lei de Fick temos para o regime permanente:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial \rho^2} + 2K \frac{\partial C}{\partial \rho} = 0 \quad (2)$$

onde k é a taxa de reação e D o coef. de difusão. A solução geral de (2), incorporando também a contribuição da difusão em sentido contrário vindo da outra extremidade da lâmina é:

$$C(\rho) = K_a C_j \left(e^{-\frac{2K}{D} \rho} + e^{-\frac{2K}{D} (2R - \rho)} \right) \quad (3)$$

onde K_a é uma constante de integração.

Introduzindo (3) nas equações recursivas de Wang[1], que consideram a depleção dos reagentes, e ajustando as curvas com os dados experimentais de Huppertz[4] mostrados na figura 3 para a deposição de SiO_2 , obtivemos os resultados apresentados na figura 4:

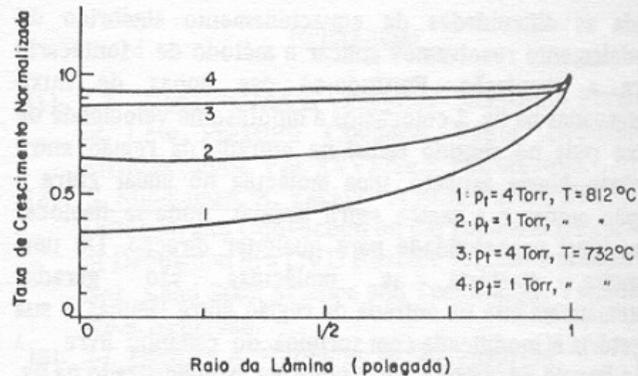


fig. 3 - Taxa de deposição normalizada vs raio da lâmina (Huppertz[4]) - Curvas experimentais

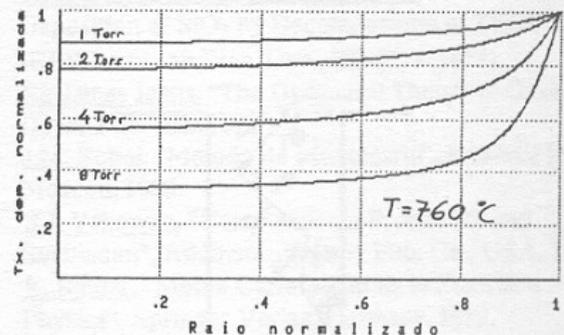


fig. 4 - Taxa de deposição normalizada vs raio da lâmina - Previsões teóricas

É importante observar dois aspectos importantes desta comparação. O primeiro é que exatamente nas bordas das lâminas os resultados experimentais são bem mais abruptos do que previsto em nosso modelamento. Em segundo lugar, os coeficientes de difusão para ajuste estão entre 10^{-4} e 10^{-7} cm^2/s , ou seja, ordens de grandeza abaixo da previsão da teoria cinética. Este fato intrigante nos levou a observar que o livre caminho médio em um reator de LPCVD em condições típicas é da mesma ordem de grandeza do espaçamento entre lâminas. Portanto nas regiões entre lâminas os gases não podem ser aproximados pelas hipóteses dos gases perfeitos devido à redução do caminho livre médio imposto pelo espaçamento entre as lâminas onde contribuições de adsorção e reação são predominantes. Os coeficientes de distribuição obtidos são da ordem de grandeza da difusão de gases em sólidos.

A Abordagem de Montecarlo

Dada as dificuldades de equacionamento algébrico do modelamento resolvemos aplicar o método de Montecarlo para a simulação. Partindo-se das linhas de fluxo observadas na fig. 2 colocamos a hipótese de velocidade de fluxo nula no sentido radial na entrada da região entre lâminas. Neste aspecto, uma molécula no limiar entre a região anular e a região entre lâminas, pode-se deslocar com igual probabilidade para qualquer direção. De uma maneira aleatória as moléculas são geradas matematicamente na entrada da região entre lâminas e sua trajetória é modificada com sorteios do caminho livre λ e do ângulo de choque θ conforme esquematizado na fig. 5:

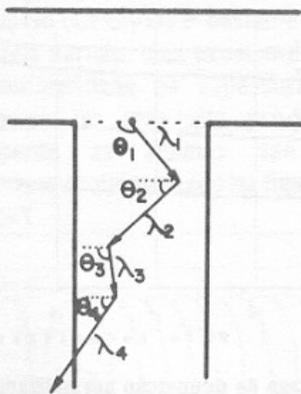


fig. 5 - Simulação do movimento de uma molécula

Dada a cinética do processo de baixa pressão (LPCVD) é razoável supor-se que haja decomposição da molécula na incidência desta sobre a superfície, se a incidência ocorrer sobre um espaço livre (*free site*). Consideramos também a hipótese de ocorrência de apenas choques elásticos entre as moléculas. Para o sorteio do caminho livre λ consideramos a função $P(x)$ que como definida a seguir⁽⁵⁾ dá a probabilidade de uma molécula que participa de um movimento browniano com caminho livre médio $\bar{\lambda}$ percorrer um caminho livre até o próximo choque no mínimo igual a x :

$$P(x) = e^{-x/\bar{\lambda}} \quad (4)$$

Assim podemos calcular a probabilidade de λ estar dentro de um intervalo arbitrário $[x_i, x_{i+1}]$:

$$P(x_i \leq \lambda \leq x_{i+1}) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{P(x)}{\bar{\lambda}} dx \quad (5)$$

Para a escolha aleatória partimos a função $P(x)/\bar{\lambda}$ em 100 intervalos de igual probabilidade L :

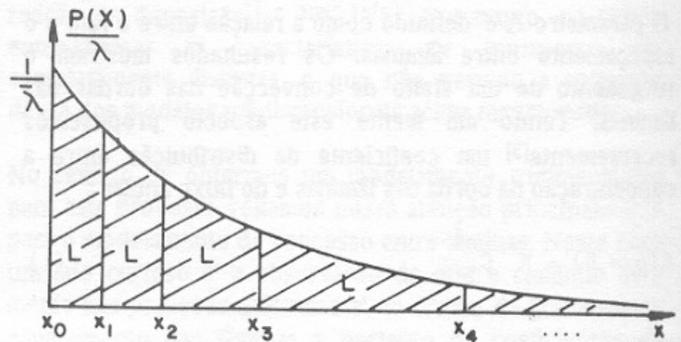


fig. 6 - Partição da função $P(x)/\bar{\lambda}$ em intervalos de igual probabilidade

$$x_0 = 0 \quad (6)$$

$$x_{i+1} = -\bar{\lambda} \ln(e^{-x_i/\bar{\lambda}} - L) \quad (7)$$

Inicialmente sorteamos um valor para i (entre 0 e 99). A seguir calculamos os valores de x_i e x_{i+1} através das expressões (6) e (7). Desta forma obtemos o intervalo onde se encontra λ ($x_i \leq \lambda \leq x_{i+1}$). Para definir o valor de λ dentro do intervalo sorteado escolhemos aleatoriamente um número real a entre 0 e 1 e calculamos o valor de λ pela expressão:

$$\lambda = x_i + a(x_{i+1} - x_i) \quad (8)$$

A fig. 7 apresenta um resultado típico deste modelamento para a deposição de silício na temperatura de 800 °C e pressão 0.1 Torr. A simulação foi realizada apenas para um número de 100 moléculas devido à limitação de estarmos usando para o trabalho um micro tipo PC-AT. Apesar da discreção pode-se notar claramente que o perfil de deposição é qualitativamente bem maior nas bordas, como era esperado de acordo com os resultados experimentais.

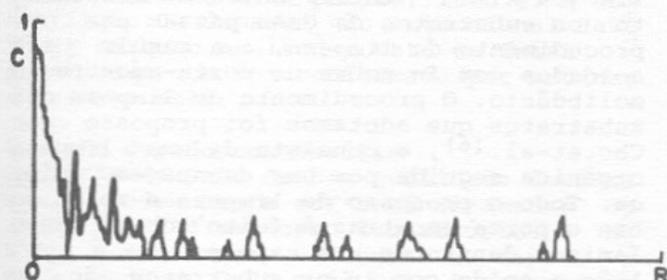


fig. 7 - Taxa de deposição normalizada vs raio da lâmina - Simulação de Montecarlo

Conclusões

Uma das questões chaves para a simulação tridimensional do processo de LPCVD é a elaboração de modelos adequados para melhor descrição do processo de deposição entre lâminas. Nesta região o transporte de reagentes por fluxo é irrelevante, sendo a cinética dominada por processos de difusão. Entretanto devido à baixa pressão o livre caminho médio é da ordem do espaçamento entre lâminas, o que não permite uma pura aplicação das leis de Fick com os coeficientes de difusão calculados pela Teoria dos Gases Perfeitos. Aplicamos pela primeira vez o Método de Montecarlo para simulação destes processos. Obtivemos qualitativamente um perfil de deposição próximo ao esperado. Estamos agora implementando este modelo em um computador de grande porte para que possamos extrair dados quantitativos dos principais parâmetros.

Referências

- [1]- J.T. Wang, "General Computer Simulation Formulae of Low Pressure Chemical Vapor Deposition", *Sientia Sinica*, Vol. XXVI No.3, March/1983.
- [2]- S. Middleman, A. Yeckel, "A Model of the Effects of Diffusion and Convection on the Rate and Uniformity of Deposition in a CVD Reactor", *J. Electrochem. Soc.: Solid State Science and Technology*, Vol.133 No.9, Sep/1986.
- [3]- M. Tsuzuki, A. Rodolpho, V. Baranauskas, "Modelamento Computacional do Processo de LPCVD", XI Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, Caxambu-MG, Maio/1988.
- [4]- H. Huppertz, W.L. Engl, "Modeling of Low-Pressure Deposition of SiO₂ by Decomposition of TEOS", *IEEE Trans. on Elec. Dev.*, ED-26, 4(1979).
- [5]- Sir James Jeans, "The Dynamical Theory of Gases", Dover Pub. Inc., NY.
- [6]- J.M. Sobol, "Método de Montecarlo", Editorial Mir, Moscou, 1983.
- [7]- S.J. Yakowitz, "Computational Probability and Simulation", Addison-Wesley Pub. Co., USA, 1977.
- [8]- K. Binder, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Springer Verlag, Germany, 1979.