

極低温ファイン固体窒素粒子生成と基板衝突変形挙動 に関する連成解析

Coupled computing of cryogenic fine solid nitrogen particle production
and its impingement with deformable behavior

- 浅沼伸寛, 東北大院, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1
石本淳, 東北大流体研, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1, E-mail : ishimoto@fmail.ifs.tohoku.ac.jp
落合直哉, 東北大流体研, 宮城県仙台市青葉区片平 2-1-1

ASANUMA Nobuhiro, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan

ISHIMOTO Jun, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan

OCHIAI Naoya, Tohoku University, 2-1-1 Katahira, Aoba-ku, Sendai 980-8577, Japan

Abstract In semiconductor manufacturing, the efficient physical wafer cleaning technology without using water is desired. Cryogenic fine solid nitrogen (SN₂) particulate spray cleaning method has been thought to be effective technique for non-aqueous physical cleaning. In the present study, numerical analysis of the effect of impingement characteristics of SN₂ particles on the resist, especially the effect of impingement angle for substrate were conducted using Fluid Structure Interaction (FSI) model. The results show that in the case that, the impingement angle θ is close to vertical to the resist surface, it was confirmed that the influence range of a large von Mises stress (σ_M) appears in a minute region in a short time. On the other hand, in the case of small σ_M , the maximum value of σ_M exhibited small value, however, a slightly lower σ_M generation region was found to cover a wide range of resist portion.

1. 緒言

近年の半導体デバイスは技術の発展により複雑かつ高集積化が進んでいるが、洗浄の際に半導体内部に残留した水などの液体の影響により強い表面張力が発生し、回路パターンが倒壊・癒着してしまう現象など⁽¹⁾、新たな課題が生じている。そこで、Non-aqueous 物理洗浄が可能でありレジストや有機膜除去に高い効果を持つとされている極低温微細固体窒素粒子噴霧による洗浄手法が検討されている⁽²⁾。しかしながら、その洗浄メカニズムに関しては未解明な部分が残されており、極低温微細固体窒素粒子噴霧によるレジストはく離・除去特性を解明するためには、微細固体窒素粒子の衝突がレジストへ及ぼす影響に関して解析を行う必要がある。本研究では、微細固体窒素粒子のウエハ基板表面への衝突・変形挙動に関する FSI (Fluid-Structure-Interaction) 数値解析を行い、固体窒素粒子のレジストに対する衝突角度、衝突速度及び粒子径の変化がレジストはく離・除去特性に及ぼす影響に関して数値解析的検討を行った。

2. 数値解析手法

微細固体窒素粒子衝突の解析のため、混相 Fluid Structure Interaction (FSI) モデルを用いた。本モデルは、固体窒素粒子相に Euler 型 VOF 法、レジスト相に弾性体モデルを適用し衝突時における相間相互作用と各相の変形挙動を考慮した流体-構造体連成モデルである。以下に、流体領域の支配方程式を示す。式 (1)-(3) はそれぞれ質量保存式、運動量保存式、粒子相体積分率の輸送式を表す。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_{\text{mesh}})] = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot [\rho(\mathbf{U} - \mathbf{U}_{\text{mesh}})\mathbf{U}] = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}_s \quad (2)$$

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot [(\mathbf{U} - \mathbf{U}_{\text{mesh}})\alpha] = 0 \quad (3)$$

ここで、 t は時間、 ρ は密度、 \mathbf{U} は流速ベクトル、 \mathbf{U}_{mesh} は流体格子の移動速度ベクトル、 p は混合相の圧力、 $\boldsymbol{\tau}$ は粘性応力テンソル、 \mathbf{g} は重力の加速度、 \mathbf{F}_s は表面張力によるソース項、 α は粒子相の体積分率である。

レジスト相 (固体相) 弾性体に関する運動方程式：

$$\rho_s \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2} = \nabla \cdot [(2G_s + \lambda)\nabla \mathbf{D}^n - (G_s + \lambda)\nabla \mathbf{D}^0] + \nabla \cdot \mathbf{S}_s \quad (4)$$

ここで \mathbf{D} は変位ベクトル、 \mathbf{D} の上添字は強連成アルゴリズムにおける Aitken 緩和法の反復回数である。 G_s は剛性率、 λ は第二ラメ定数であり、 \mathbf{S}_s は変位に関するソース項である。

3. 計算条件

本研究ではレジストに衝突する微細固体窒素 (Solid Nitrogen, SN₂) 粒子の挙動及び衝突がレジストに与える影響について解析する。シミュレーションの対象とする計算領域は底面 100 μm \times 100 μm 、高さ 30 μm を有する直方体領域であり、計算をより正確に行うため SN₂ 粒子及びレジストの周囲は不等間隔格子を用いた精細化を行っている。また、レジストは直径 20 μm 、高さ 8 μm の円柱とし、その概要を Fig. 1 に示す。なお、衝突角度は粒子が垂直に落下する場合を 90° とし、Fig. 2 のように定義する。SN₂ 粒子、周囲領域の気体及びレジストの計算条件を Table. 1 に示す。本解析においては、粒子衝突角度、粒子衝突速度、粒子径がレジスト相における粒子衝突時応力に及ぼす影響を検討するため、以下の解析を行った。まず、粒子衝突角度についての解析においては SN₂ 粒子径を 6 μm 、初速度 10 m/s とし、レジスト中心付近に衝突するよう初期粒子位置を調整した。衝突速度についての解析においては粒子径を 3 μm 、衝突角度を 90° とし、初速度を 5 m/s から 45 m/s まで変化させた。また、粒子径についての解析においては初速度を 10 m/s、衝突角度を 90° とし、粒子径を 1 μm から 7 μm まで変化させ解析を行った。

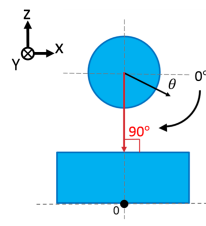
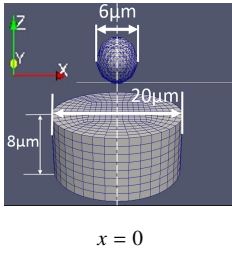


Fig. 1: Computational geometry of particle and resist

Fig. 2: Definition of impact angle

Tab. 1: Physical properties for numerical analysis

SN ₂ particle density	ρ_{SN_2}	1026.5	kg/m ³
Ambient gas phase viscosity	ν_g	1.48×10^{-5}	m ² /s
Ambient gas phase density	ρ_g	1	kg/m ³
Young's modulus of resist	E	20	GPa
Resist density	ρ_{res}	1190	kg/m ³
Poisson's ratio of resist	β	0.3	

4. 計算結果と考察

SN₂ 粒子の衝突角度を θ とし、 θ を 10° から 90° まで 10° 間隔で変化させ計算を行った。衝突角度 90° の場合の SN₂ 粒子の衝突変形挙動を Fig. 3 に示す。また、本研究ではレジストの洗浄効果を評価するために、多方向から力が加わっている場合に一軸引張りもしくは圧縮応力へと換算した相当応力である Mises 応力 σ_M を用いた。本計算では各軸方向の応力が算出されるため、Mises 相当応力は次式により定義される。

$$\sigma_M = \left[\frac{1}{2} \{ (\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 \} + 3(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zx}^2) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5)$$

ここで、 σ_{xx} 、 σ_{yy} 、 σ_{zz} は各軸方向の垂直応力であり、 σ_{xy} 、 σ_{yz} 、 σ_{zx} はせん断応力である。

Fig. 3 より、SN₂ 粒子がレジストへ衝突した後変形してレジスト表面に薄く広がる挙動を示すことがわかる。 $\theta = 90^\circ$ の衝突で σ_M が最大値を示した状態は Fig. 3 (a) に相当し、SN₂ 粒子がせん断変形し接触面積が増大するに従い局所の σ_M は減少してゆき、レジスト表面の広範囲に弱い応力が作用していることが分かる。また、衝突角度が大きい場合は衝突の瞬間に高 σ_M が発生するが短時間で減衰し、それに対し衝突角度が小さい場合は、 σ_M の最大値は小さくなるもののレジスト表面に沿う運動を継続する間、若干小さめの σ_M 発生領域がレジストの広範囲に及ぶという特性が確認された。

次に σ_M の最大値について解析する。ここで、レジスト表面 x 軸上に発生した σ_M の最大値を σ_{max} とした。衝突角度の変化について、各衝突角度 θ と発生した σ_{max} の関係を Fig. 4 に示す。この結果より、衝突角度と σ_{max} はほぼ線形関係となり、衝突角度が 90° に近いほどレジストに与える σ_{max} が增大することがわかる。粒子の初期速度の影響についても同様に、粒子の初期速度 V_0 と発生した σ_{max} の関係を Fig. 5 に示す。この結果より、衝突速度と σ_{max} は二次関数的な変化を示していることがわかる。これは粒子の有する運動エネルギーの増加に伴い σ_{max} も増大するためであると考えられる。粒子径の影響に関して、粒子径 D と発生した σ_{max} の関係を Fig. 6 に示す。粒子径 4 μm から 7 μm の間では線形的に変化しているが、

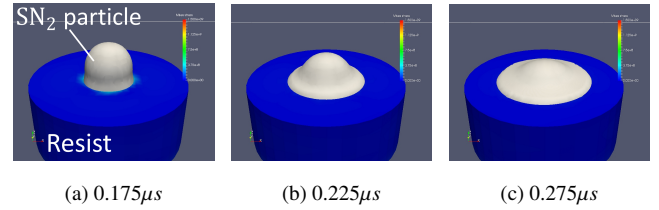


Fig. 3: Time evolution for iso-contour of volume fraction ($\alpha = 0.5$) during the impingement process of SN₂ particle ($\theta = 90^\circ$)

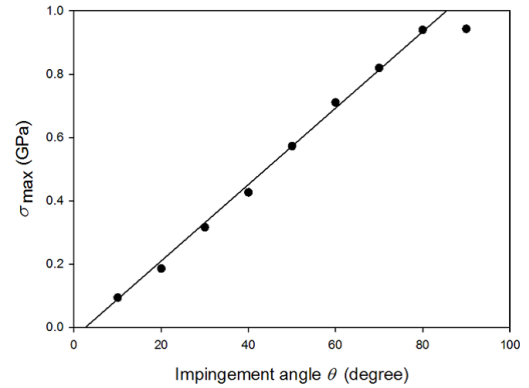


Fig. 4: Relation between impingement angle and maximum mises stress

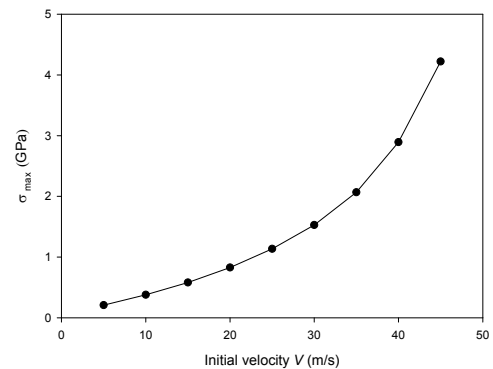


Fig. 5: Relation between initial velocity and maximum mises stress

粒子径が小さい範囲では線形関係が失われている。これは、粒子径が小さすぎる場合計算格子の解像度が不十分となり、計算精度が低下したことによると考えられる。

実際のレジスト洗浄プロセスにおいては、レジストや不純物は最終的に除去する必要があるが、同時に基盤や回路パターンの損傷を避けなければならない。そのため SN₂ 粒子の衝突により発生する σ_M はパターン損傷に至る弾性限界値以下の状態を維持する必要があるが、本数値計算手法を活用し最適な粒子衝突角度を設定することにより、レジスト固体相に発生する σ_{max} の絶対値と応力作用域を制御することが可能と考えられる。

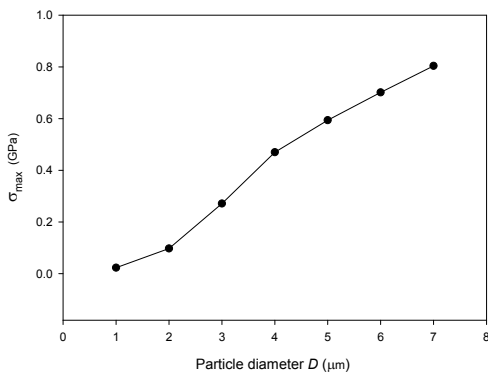


Fig. 6: Relation between particle diameter and maximum mises stress

5. 結論

混相 Fluid Structure Interaction (FSI) モデルを用いて極低温微細 SN_2 粒子の衝突がレジストに及ぼす影響について数値解析的検討を行い、以下の知見を得た。

- (1) 粒子衝突角度と σ_{max} はほぼ線形関係にあり、衝突角度が 90° に近いほどレジスト相に作用する σ_{max} が增大することが判明した。
- (2) 初期粒子速度と σ_{max} は二次関数的な関係にあり、衝突速度がある程度大きくなるとレジスト相に作用する σ_{max} が急激に增大することが判明した。
- (3) 粒子径と σ_{max} はほぼ線形関係にあり、粒子径が大きいほどレジスト相に作用する σ_{max} が增大することが判明した。

これらの関係から、レジストに与える σ_{max} の絶対値と作用域を制御することによる新型洗浄手法の可能性が示された。

参考文献

- (1) 服部毅, 先端半導体洗浄技術の課題と展望, *The journal of the Surface Finishing Society of Japan* Vol.59, No.8, 526-533 (2008).
- (2) Ishimoto J., *Cryogenics*, 49, 39 (2009).