

【公報種別】特許法第 17 条の 2 の規定による補正の掲載
 【部門区分】第 7 部門第 2 区分
 【発行日】平成 24 年 4 月 26 日 (2012.4.26)

【公開番号】特開 2010-232594 (P2010-232594A)
 【公開日】平成 22 年 10 月 14 日 (2010.10.14)
 【年通号数】公開・登録公報 2010-041
 【出願番号】特願 2009-81098 (P2009-81098)
 【国際特許分類】

H 0 1 L 21/265 (2006.01)

H 0 1 J 37/305 (2006.01)

H 0 1 J 37/317 (2006.01)

【F I】

H 0 1 L 21/265 Z

H 0 1 J 37/305 A

H 0 1 J 37/317 Z

【手続補正書】

【提出日】平成 24 年 3 月 9 日 (2012.3.9)

【手続補正 1】

【補正対象書類名】特許請求の範囲

【補正対象項目名】全文

【補正方法】変更

【補正の内容】

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの被加工体への輸送経路を考慮して、被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射ダメージの予測方法。

【請求項 2】

前記パラメータ計算ステップは、

イオンが照射される被加工体の膜種、被加工体の構造、イオンフラックス量、イオン照射時間の入力パラメータを決定する第 1 ステップと、

モンテカルロ法によって前記パラメータを基にしてイオン照射時間内に被加工体に入射してくる総イオン数 N を決定する第 2 ステップと、

J 番目の入射イオン J に対して、前記 イオン照射時間内 に入射する入射イオン J の入射エネルギーと入射角度を求める第 3 ステップと、

前記被加工体の形状に対して、モンテカルロ法による前記入射イオン J の被加工体への輸送の経路を考慮して前記被加工体との衝突位置と前記被加工体への入射角度を計算する第 4 ステップとを有し、

前記欠陥分布計算ステップは、

前記入射イオン J の入射エネルギー E と入射角度 を参照して求めた反射確率 P と乱数値 とを比較することで、前記入射イオン J が前記被加工体中に侵入するか、表面で反射

されるかを判断する第5ステップと、

前記入射イオンJが前記被加工体中に入射される > P の場合、

予め、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって、イオン入射角度、イオン入射エネルギーおよび被加工体の膜種に基づいて作成しておいた前記被加工体中の入射イオンの分布のデータベースを参照してデータを検索する第6ステップと、

前記検索したデータと、前記入射イオンJの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて前記入射イオンJの侵入深さと侵入位置を求める第7ステップと、

前記入射イオンJの侵入深さと侵入位置を記憶して欠陥のデータを蓄積し、前記入射イオンJが前記総イオン数Nに達しているか否かを判断する第8ステップと、

前記第8ステップで前記入射イオン数が総イオン数Nに達していない場合には、 $J + 1 = J$ 番目とする第11ステップを行って前記第3ステップに戻り、

前記第8ステップで前記入射イオン数が総イオン数Nに達している場合には計算を終了して、蓄積した欠陥のデータに基づいて欠陥分布を作成する第9ステップと、

前記第5ステップの判断で前記入射イオンJが前記被加工体表面から反射される P の場合は、

前記被加工体表面での鏡面反射とし入射角度を設定して前記第4ステップに進む第10ステップとを有し、

前記第3ステップから前記第11ステップまでの処理を1番目からN番目までの入射イオンJに対して繰り返し行う

請求項1記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項3】

シースシミュレータは、マックスウェル分布を有する速度のイオンがシース領域に入射されて、シース領域との電位差分だけ加速されることと、また前記シース領域中の中性粒子と衝突されることの繰り返しをモンテカルロ法によって求める

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項4】

前記イオン照射はプラズマエッチングであり、

古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記データベースに前記被加工体の電気伝導度を加えることで、

前記プラズマエッチングにおける前記被加工体の側壁および底部における電気伝導度の2次元分布もしくは3次元分布を計算する

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項5】

前記被加工体への前記入射イオンの照射とそれに伴って発生する電子の照射によって生成される電位効果を考慮して、前記入射イオンの輸送軌跡を決定する

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項6】

加工プロセス条件から計算される前記被加工体の直上の前記イオンフラックス量、前記入射エネルギー、前記入射角度分布の入力パラメータは、気相シミュレータとシースシミュレータによって求める

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項7】

前記被加工体は時間経過とともに形状変化しない固定被加工体である

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項8】

前記被加工体は時間経過とともに形状変化する被加工体である

請求項2記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項9】

前記入射イオンの照射によって前記被加工体の形状が変化し、

前記変化した被加工体の座標位置に対して前記入射イオンが照射される

請求項 8 記載のイオン照射ダメージの予測方法。

【請求項 10】

被加工体に入射される入射イオンにより発生する欠陥を予測する計算を行う演算部と、
前記演算部で求めたイオン照射による前記被加工体の欠陥の分布を出力する出力部を有し、

前記演算部は、

入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの前記被加工体への輸送経路を考慮して、前記被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射ダメージのシミュレータ。

【請求項 11】

エッチングによる被加工体の形状変化を予測する形状シミュレータと、

前記形状シミュレータによって予測した前記被加工体の形状データを参照して、前記エッチングによるイオン照射ダメージを予測するイオン照射ダメージのシミュレータと、

前記イオン照射ダメージのシミュレータによって予測されたシミュレーション結果に基づいて、イオン照射ダメージを最小とするエッチング条件に制御する制御部と、

前記制御部の指令に基づいてエッチングを行うエッチング処理部を有し、

前記イオン照射ダメージのシミュレータは、

前記被加工体に入射される入射イオンにより発生する欠陥を予測する計算を行う演算部と、

前記演算部で求めた前記イオン照射による前記被加工体の欠陥の分布を出力する出力部を有し、

前記演算部は、

入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの前記被加工体への輸送経路を考慮して、前記被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射装置。

【請求項 12】

被加工体へのイオン照射によるダメージを予測するイオン照射ダメージのシミュレータと、

前記イオン照射ダメージのシミュレータによって予測されたシミュレーション結果に基づいて、プロセス条件の範囲内でイオン照射ダメージを最小とするイオン注入条件に制御する制御部と、

前記制御部の指令に基づいてイオン注入を行うイオン注入処理部を有し、

前記イオン照射ダメージのシミュレータは、

被加工体に入射される入射イオンにより発生する欠陥の分布を予測する計算を行う演算部と、

前記演算部で求めた前記イオン照射による前記被加工体の欠陥の分布を出力する出力部

を有し、

前記演算部は、

イオンが照射される前記被加工体の膜種、前記被加工体の構造、入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの前記被加工体への輸送経路を考慮して、前記被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射装置。

【請求項 13】

エッチングによる被加工体の形状変化を予測する形状シミュレーションを行う工程と、前記形状シミュレーションによって予測した前記被加工体の形状データを参照して、前記エッチングによるイオン照射ダメージを予測するイオン照射ダメージのシミュレーションを行う工程と、

前記イオン照射ダメージのシミュレーションによって予測されたシミュレーション結果に基づいて、イオン照射ダメージを最小とするエッチング条件に制御する工程と、

前記エッチング条件に基づいて前記被加工体のエッチングを行う工程を有し、

前記イオン照射ダメージのシミュレーションは、

入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの前記被加工体への輸送経路を考慮して、前記被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射方法。

【請求項 14】

被加工体へのイオン照射によるダメージを予測するイオン照射ダメージのシミュレーションを行う工程と、

前記イオン照射ダメージのシミュレーションによって予測されたシミュレーション結果に基づいて、プロセス条件の範囲内でイオン照射ダメージを最小とするイオン注入条件に補正する工程と、

補正した前記イオン注入条件に基づいて前記被加工体へのイオン注入処理を行う工程を有し、

前記イオン照射ダメージのシミュレーションは、

入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの前記被加工体への輸送経路を考慮して、前記被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算するパラメータ計算ステップと、

前記パラメータ計算ステップによって得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求める欠陥分布計算ステップを有する

イオン照射方法。

【手続補正 2】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0010

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0010】

本発明は、入射イオンのフラックス量、入射エネルギー、入射角度分布を入力パラメータとしたモンテカルロ法によって入射イオンの被加工体への輸送経路を考慮して、被加工体に対する入射イオンの衝突位置と入射角度を計算して得られた情報と、古典的分子動力学計算もしくは第一原理分子動力学計算によって作成した前記被加工体に及ぼされる結晶欠陥量、イオン反射確率、イオン侵入長分布のデータベースとを参照してデータを検索し、前記検索したデータと、入射イオンの入射エネルギーおよび入射角度に基づいて入射イオンの侵入深さと侵入位置を求め、前記被加工体に生じるイオン照射による欠陥分布を求めるものである。

【手続補正 3】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0011

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0011】

本発明では、実験では測定が困難な被加工体の側壁や底部への入射イオンの侵入分布および入射イオンによる物理ダメージ量（結晶欠陥）の2次元分布もしくは3次元分布が定量的に現実的な計算時間内で予測される。その理由は、予め、分子動力学計算して作成しておいたデータベースを利用しているため、イオン侵入分布および結晶欠陥分布の計算時間が少なくすむためである。

【手続補正 4】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0012

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正 5】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0013

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正 6】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0014

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正 7】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0015

【補正方法】削除

【補正の内容】

【手続補正 8】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0016

【補正方法】削除

【補正の内容】
【手続補正 9】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0017
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 10】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0018
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 11】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0019
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 12】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0020
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 13】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0021
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 14】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0022
【補正方法】変更
【補正の内容】
【0022】
本発明は、シミュレーション時間の大幅な短縮ができるため、CMOSデバイスプロセスやイメージセンサプロセスの開発や評価の短TAT化、開発コストの削減を実現できるという利点がある。
【手続補正 15】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0023
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 16】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0024
【補正方法】削除
【補正の内容】
【手続補正 17】
【補正対象書類名】明細書
【補正対象項目名】0025
【補正方法】削除
【補正の内容】

【手続補正 18】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0026

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0026】

【図1】本発明の第1実施の形態に係るイオン照射ダメージの予測方法の第1例を示したフローチャート図である。

【図2】プラズマ気相シミュレータで予測した結果の一例を示した図である。

【図3】シースシミュレータで予測した結果の一例を示した図である。

【図4】データベースの概念を示した図である。

【図5】分子動力学計算での計算領域を示した図である。

【図6】入射角度データ に対して、エネルギー値Eと角度値 のスプライン補間をし、重み付け乱数を振って深さを決定する例を示す図である。

【図7】 $E = 200 \text{ eV}$ 、 $\theta = 40$ 度のイオンの入射の場合の補間の説明図である。

【図8】第1実施の形態に係るイオンエネルギーの分布とイオン入射角の分布を予測するためにシースシミュレータによって行われる処理の例を示したフローチャート図である。

【図9】シリコンゲートの製造に採用されている方法として機能する本発明の第1実施の形態によって実装されたイオン照射ダメージの予測方法の第2の一例を示したフローチャート図である。

【図10】本発明のアルゴリズムを実装したイオン照射ダメージのシミュレータの概観図である。

【図11】第1実施の形態に係るイオン照射ダメージの予測方法の第3例を示したフローチャート図である。

【図12】気相シミュレータのアルゴリズムを示したフローチャート図である。

【図13】本発明の第3実施の形態に係るイオン照射装置の第1例を示したブロック図である。

【図14】形状シミュレータの概観図である。

【図15】第3実施の形態に係るイオン照射方法の第1例を示したフローチャート図である。

【図16】ステップS412の「シミュレータによる計算（データベースからの補正值の取得）」の詳細を示したフローチャート図である。

【図17】第3実施の形態に係るイオン照射装置の第2例を示したブロック図である。

【図18】第3実施の形態に係るイオン照射方法を示したフローチャート図である。

【手続補正 19】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0036

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0036】

(1) 古典的分子動力学計算を用いる場合の定義。

古典的分子動力学計算での計算領域を図5に示すようにセル分割する。例えば、サイズが $2 \text{ nm} \times 2 \text{ nm} \times 2 \text{ nm}$ のセル1、セル2、セル3である。あるセルでの $D(z)$ は、(1)式のように、深さ z に存在する原子Aの位置 (X_A, Y_A, Z_A) の初期結晶構造位置 (X_{A0}, Y_{A0}, Z_{A0}) からのズレの総和と定義する。ここで、 N_A は1つのセル内に存在する結晶原子の数である。

【手続補正 20】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0043

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0043】

次に、第5ステップS5として「反射確率Pと乱数値との比較による侵入、反射の決定」を行う。この第5ステップS5では、入射イオンJの入射エネルギーEと入射角度を参照して求めた反射確率Pと、乱数値とを比較することで、上記入射イオンJが上記被加工体中に侵入するか、表面で反射されるかを判断する。

例えば、被加工体（パターン）の側壁や底部に入射イオンが衝突したときには、その時点で乱数（ $0 < \text{乱数} < 1$ ）を振るとともに、データベースにある入射イオンの入射エネルギーE、入射角度を参照し、反射確率Pをスプライン補間によって割り出す。その確率Pと乱数値とを比較することで、イオンがその部分に深さzまで侵入して結晶欠陥を与えるのか、表面で鏡面反射していく（イオンエネルギーは保存）のかを判断する。

【手続補正21】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0077

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0077】

上記第9ステップS109で上記入射イオン数が総イオン数Nに達していない場合には、第12ステップS112として「 $J + 1 = J$ 」行い、 $J + 1 = J$ 番目として上記第4ステップS104に戻る。

すなわち、上記一連の計算を、入射イオンJの総数がN個になるまで行う。

【手続補正22】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0080

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0080】

上記アルゴリズムでは、上記第104ステップから上記第12ステップまでの処理を1番目からN番目までの入射イオンJに対して繰り返し行う。

【手続補正23】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0081

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0081】

上記アルゴリズムによって、例えば、レジストをマスクとするシリコンゲート加工のオーバーエッチングステップでの水素イオンによるダメージ分布を予測することができる。

このときのパターン構造は、レジスト膜厚：250nm、BARC（反射防止膜）膜厚：80nm、シリコン膜厚：150nm、スペース：300nm、ライン幅：100nmのゲート加工評価用のパターンである。設定セルサイズは2nm×2nm×2nmとし、計算中において、パターン形状は変化しない固定パターンとする。このセルサイズと等しい領域の分子動力学計算によるデータベースを予め用意しておく（例えば、前記図4参照）。イオンフラックスは $10^{16} / \text{s} \cdot \text{cm}^2$ 、エッチング時間は10sである。これに相当するパターン（500nm×2nm）への総イオン数Nは 1×10^6 個である。また、下記条件によって、前記シースシミュレータから計算されるイオンエネルギーEと入射角度の分布を、前記図9によって説明したアルゴリズムのパターン内輸送および上記データベースの補間計算の入力パラメータとする。なお、シースシミュレータによる計算で求めた入力パラメータを第3ステップS103のパラメータとする。

【手続補正24】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】 0082

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0082】

上記シースシミュレータを以下の条件に設定する。

例えば、電子エネルギー：5 eV、

イオン温度：1000 K、

中性粒子温度：400 K、

ガス圧力：1.33 Pa、13.3 Pa、6.7 Pa、

プラズマ密度： $10^{10} / \text{cm}^3$ 、

プラズマ電位：20 V、

印加バイアス電圧：200 V、

自己バイアス電圧：-200 V、

印加バイアス周波数：13.56 MHz、

イオン質量：1 amu、

中性粒子質量：1 amuである。

【手続補正25】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0083

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0083】

本アルゴリズムコード実行のプラットフォームは、Windows (登録商標) / Cygwin OSである(ただし、Mac OS X、LINUX (登録商標)、UNIX (登録商標)系OSでもかまわない)。また、本アルゴリズムはFortran 77で構築されている。その他、Fortran 90、Fortran 95、C、C++、JAVA (登録商標)など、プログラム言語の種類は問わない。本アルゴリズムを実装したダメージシミュレータの概観図を図10に示す。インターフェイス部分(計算制御・計算の可視化)は、tcl/tkとPGPLOTで構築されている。他の制御系言語・可視化ツールを用いてもかまわない。

【手続補正26】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0084

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【0084】

そして、ガス圧力が1.33 Pa、13.3 Pa、6.7 Paの場合のイオンによる2次元欠陥分布を計算し、かつ、そのときのイオンエネルギーとパターン直上への入射角度分布を計算する。その計算時間は、CPU: Intel Pentium (登録商標) M processor 1.60 GHzを搭載した計算機のWindows (登録商標) / Cygwin OSとするプラットフォーム上で50時間であった。一方、分子動力学計算単体で、パターンが形成されていない2 nm x 2 nm平面領域のサンプルでの計算時間は2000時間であった。よって、本発明のイオン照射ダメージの予測方法を用いることで、計算時間の大幅な短縮化が可能になったことがわかる。なお、上記計算はドーズ量が等しい場合の計算時間で比較している。

【手続補正27】

【補正対象書類名】 明細書

【補正対象項目名】 0099

【補正方法】 変更

【補正の内容】

【 0 0 9 9 】

上記第 9 ステップ S 1 0 9 で上記入射イオン数が総イオン数 N に達していない場合には、第 1 2 ステップ S 1 1 2 として「 $J + 1 = J$ 」行い、 $J + 1 = J$ 番目として上記第 4 ステップ S 1 0 4 に戻る。

すなわち、上記一連の計算を、入射イオン J の総数が N 個になるまで行う。

【 手続補正 2 8 】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 0

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 0 0 】

一方、上記第 1 0 9 ステップで上記入射イオン数が総イオン数 N に達している場合には、第 1 0 ステップ S 1 1 0 として「計算終了、欠陥分布の作成」を行う。この第 1 0 ステップ S 1 1 0 では、計算を終了して、蓄積した欠陥のデータに基づいて欠陥分布を作成する。

【 手続補正 2 9 】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 0 1 】

また、上記第 6 ステップ S 1 0 6 の判断で上記入射イオン J が上記被加工体表面から反射される P の場合は、第 1 1 ステップ S 1 1 1 として「鏡面反射として入射角度 の設定」を行う。この第 1 1 ステップ S 1 1 1 では、上記被加工体表面での鏡面反射とし入射角度 を設定して上記第 5 ステップ S 1 0 5 に進む。

【 手続補正 3 0 】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 2

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 0 2 】

上記アルゴリズムでは、上記第 4 ステップ S 1 0 4 から上記第 1 2 ステップ S 1 1 2 までの処理を 1 番目から N 番目までの入射イオン J に対して繰り返し行う。

【 手続補正 3 1 】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 0 5

【補正方法】変更

【補正の内容】

【 0 1 0 5 】

図 1 2 に示すように、まず、「パラメータの決定」ステップ 2 0 1 によって、例えば、プロセス情報、装置情報、ウエハ情報、壁情報（チャンバーの壁情報）を決定する。上記プロセス情報としては、電子温度、圧力（処理雰囲気圧力）、流量（プロセスガスの流量）、イオン温度、中性粒子温度、バルクプラズマ密度、エッチング時間等が挙げられる。上記装置情報としては、チャンバー半径、ギャップ長（被加工体（ウエハ）と上部電極との距離）、上部電極半径、チャンバー体積等が挙げられる。上記ウエハ情報としては、開口率、ウエハ半径等が挙げられる。上記壁情報としては、粒子付着確率（天板）、粒子付着確率（側壁）等が挙げられる。

【 手続補正 3 2 】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0 1 1 3

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0113】

次に、「粒子密度、フラックスの計算」ステップ S 2 0 3 を行う。この粒子密度、フラックスの計算では、一例として、塩素 (Cl) 系ガスについて説明する。もちろん、他のガス系にも適用できる。例えば、各イオン、ラジカル密度の時間変化について、 Cl 、 Cl^+ 、 Cl^{++} 、 Cl^- 、 Cl^{2+} 、 SiCl_4 、 SiCl_2 に関する連立常微分方程式は、(6) 式のように表される。

【手続補正33】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0115

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0115】

ここで、 $n(i, t)$ は着目している粒子の密度、 k_m は反応レート、 $n(j, t)$ は粒子 i と反応する相手の粒子密度、 τ_r と τ_n はそれぞれ排気と拡散の特性時間である。上記 (6) 式の連立常微分方程式では、電子密度、化学反応レート、時間ステップなどオーダーの大きく異なる項を扱うので、通常の 4 次の Runge-Kutta 法では条件によって解が収束しない場合がある。そこで、本モデルでは、Stiff な連立常微分方程式の陰的数値解法として知られる Gear 法を採用している。また、電子密度と Cl_2 密度に関して、プラズマ化の主反応の時間スケール (緩和時間) が他の反応に比べて短い ($< 0.1 \text{ nsec.}$) ことと、常にガスが供給されていることから、一定と仮定している。

(6) 式での τ_r は排気特性時間 (sec.) であり、ガス圧力 P (mT)、チャンバ容積 V (リットル)、総流量 Q (sccm) を用いて、(7) 式のように表される。 τ_r はおよそ msec. から数十 msec. のオーダーである。

【手続補正34】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0129

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0129】

前記第 1 例～第 3 例において、第一原理分子動力学計算を用いたデータベースを用いる際、前記図 4 に示したようなデータベースに電気伝導度を加えることができる。このようにデータベースに電気伝導度を加えることで、プロセスを反映したダメージ領域での電気特性変動 (電気伝導分布) を加工中ならびに加工直後に予測することができる。データベース値の補間方法は、前記図 6 によって説明した方法と同様である。

上記データベースを作成する時の電気伝導度の導出については、第一原理分子動力学計算で求められる波動関数とハミルトニアンから非平衡グリーン関数法を用いて行う。電気伝導度の導出方法については、例えば、Meir and Wingreen 1992, Phys.Rev.Lett., Vol. 68, P2512 に開示されている。

【手続補正35】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0137

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0137】

ステップ S 4 1 1 の「インプットパラメータ」には、プロセスレシビ値およびエッチング処理部 440 内のモニター (図示せず) の測定値を用いる。

そして、ステップ S 4 1 2 の「シミュレータによる計算 (データベースからの補正值の取得)」でデータベースからの補正值を取得する。この詳細については、図 16 によって

説明する。データベースには、例えばマスク開口率、パターン構造（立体角）、エッチングガス、被エッチング膜種、ウエハ温度、ガス圧力、ガス流量、C D (Critical Dimension)とテーパ角等のデータが保管されている。

【手続補正 36】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0143

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0143】

図16に示すように、まず、ステップS421の「モニタリング信号で照合」によって、例えば、上記エッチング処理部440内に設置されている下部電極の温度データに基づいて、所望の加工寸法Processing Dimension（CD）を満たす最良値T'を、補間法によって求める。

【手続補正 37】

【補正対象書類名】明細書

【補正対象項目名】0147

【補正方法】変更

【補正の内容】

【0147】

次いで、ステップS427の「ダメージを最小にする最良値P'と最良値Wb'を決定」によって、ダメージを最小にする最良値P'と最良値Wb'を決める。

【手続補正 38】

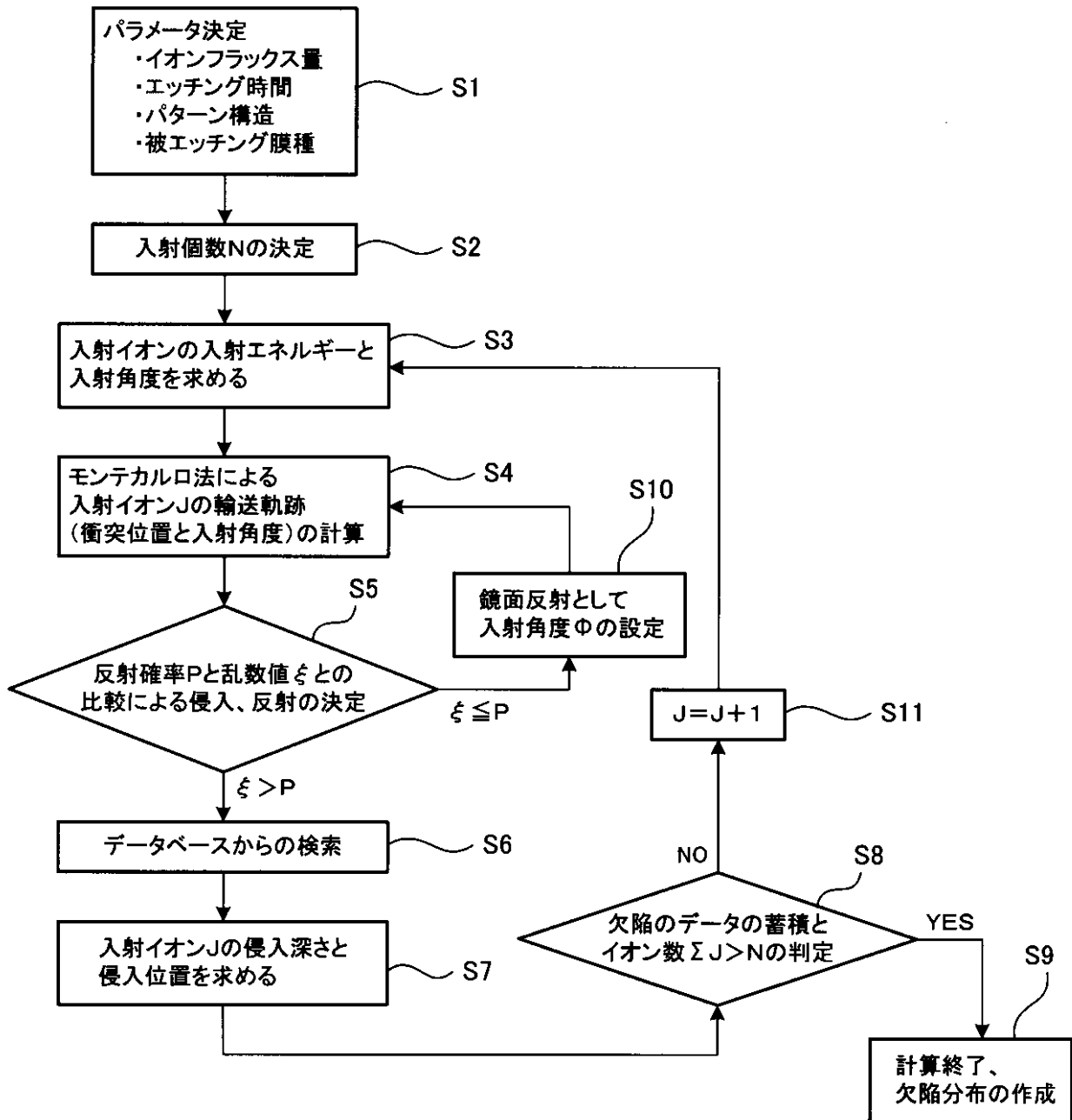
【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図 1】



【手続補正 39】

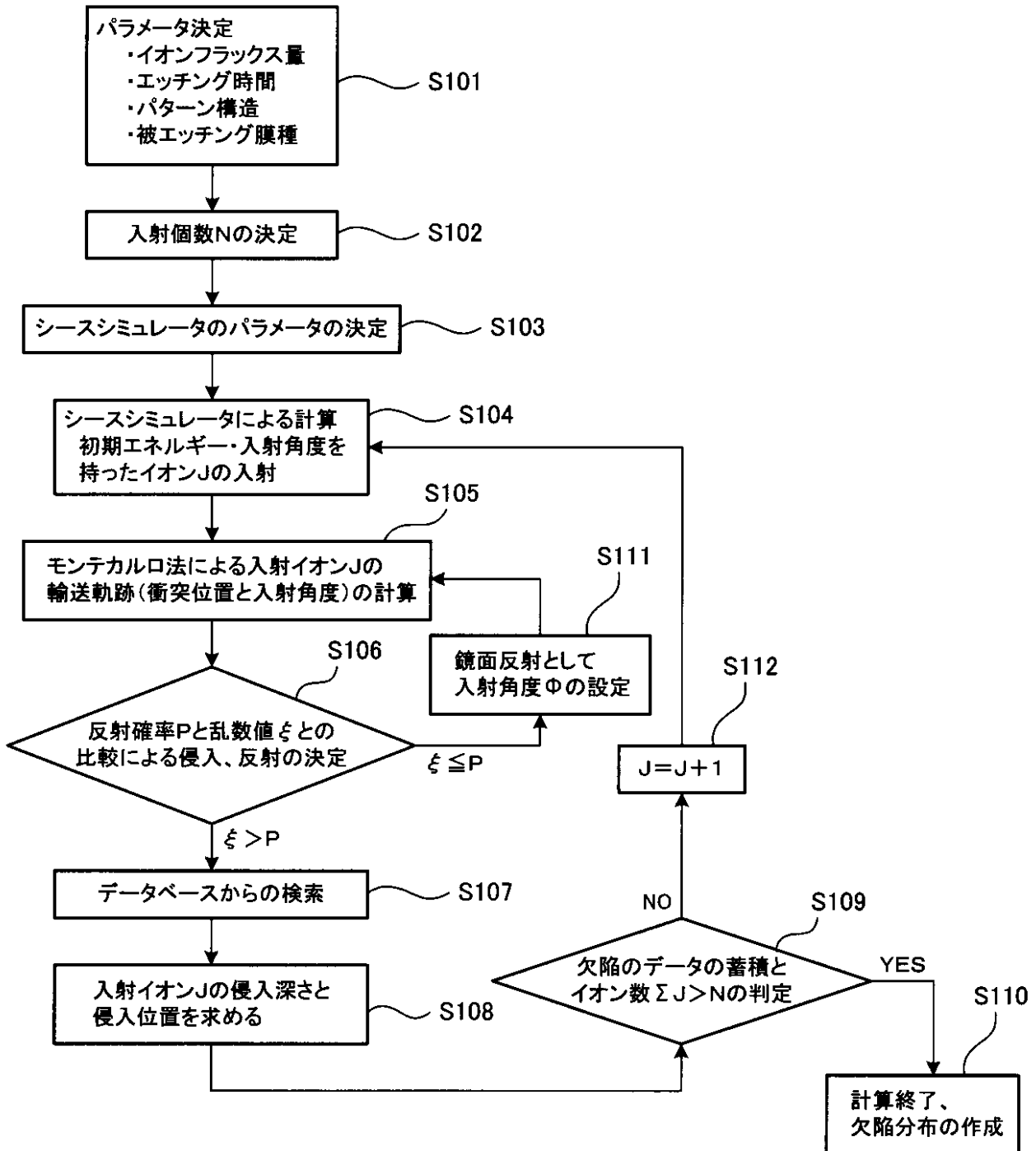
【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図 9

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図 9】



【手続補正 40】

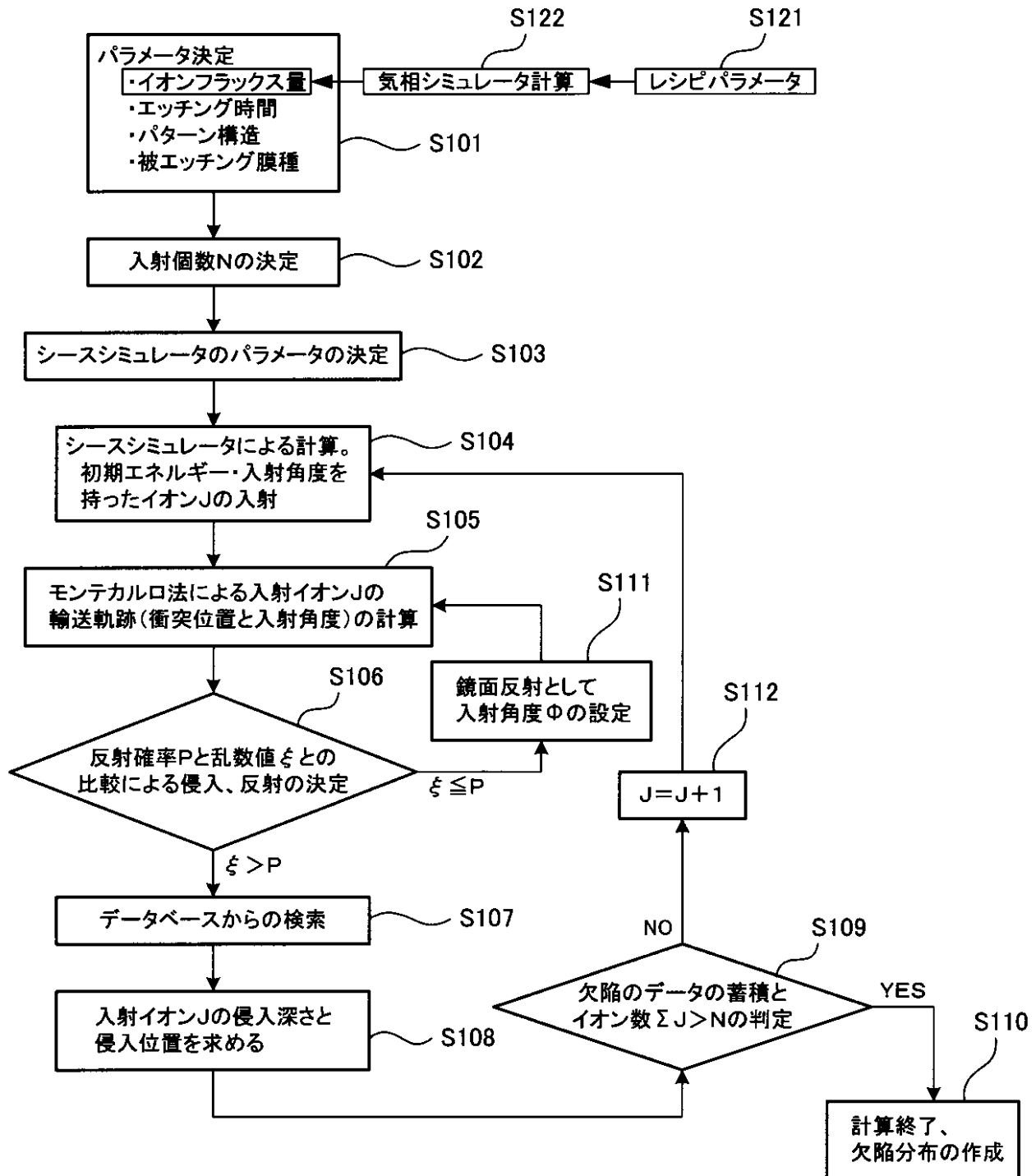
【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図 1 1

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図 1 1】



【手続補正 4 1】

【補正対象書類名】図面

【補正対象項目名】図 1 7

【補正方法】変更

【補正の内容】

【図 17】

500 イオン注入装置

