

氏名	もりもと たもつ 森 本 保
授与学位	博士 (工学)
学位授与年月日	平成10年3月25日
学位授与の根拠法規	学位規則第4条第1項
研究科, 専攻の名称	東北大学大学院工学研究科 (博士課程) 機械工学専攻
学位論文題目	プラズマプロセッシングにおける高密度プラズマのシミュレーション法に関する研究
指導教官	東北大学教授 南部 健一
論文審査委員	主査 東北大学教授 南部 健一 東北大学教授 神山 新一 東北大学教授 江刺 正喜 東北大学教授 西山 秀哉

## 論文内容要旨

### 第1章 緒論

半導体ウエハプロセスにおいて、プラズマプロセッシングはキーテクノロジーとして微細加工を行うエッチング、低温での薄膜形成等に欠かすことの出来ないツールとなっており、今後その応用はさらに広がり重要性は高まることと予想される。近年、プラズマプロセッシングにおいては微細化の進展と処理面積の大口径化の要求から、高プラズマ密度、低気圧動作が可能な様々なプラズマソースが登場してきた。この高密度プラズマソースの研究は精力的になされており一部実用に到っているものもある。しかしプラズマの時空間構造がいまだ十分に解明されていないため、実用化に際して様々の問題に直面している。そこで本研究では、高密度プラズマと呼ばれるプラズマソースより誘導結合プラズマと電子サイクロトロン共鳴プラズマを取り上げ、これらの構造を解析するためのシミュレーション法を開発し、プラズマ装置開発に資することを目的とした。

### 第2章 誘導結合プラズマのPIC/MC法による自己無撞着なシミュレーション

近年誘導結合プラズマは、比較的低圧力、無電極、大口径高密度プラズマを簡単な装置構造で生成できることから半導体製造装置への応用が急速に進み、例えば、エッチングプロセスにおいて広く量産に用いられている。既存の研究においては、誘導結合プラズマの解析は流体モデルを採用しているのがほとんどである。流体モデルには、計算量が少ないという利点があるが、プロセス特性に影響を及ぼす反応性ガスの解離に参与する電子のエネルギー分布を求めることができないということや、電子・イオンなどの移動度や、拡散係数を定めることが容易ではないという問題がある。よって本章では、それらの問題がない粒子モデルである Particle-in-Cell/Monte Carlo(PIC/MC)法を、円筒にコイルを巻いた形状の誘導結合プラズマに適用した。円筒は軸方向に長くコイル端の効果が無視できるとし、その中に静止したアルゴンガスが満たされている。また、プラズマ密度の不均一は径方向のみであると仮定

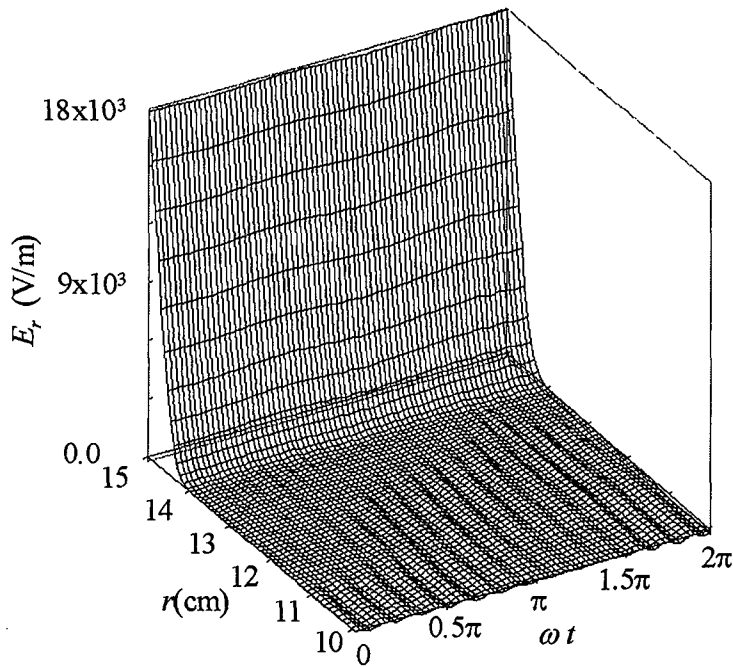


図1 バルク部における  $E_r$  のプラズマ振動

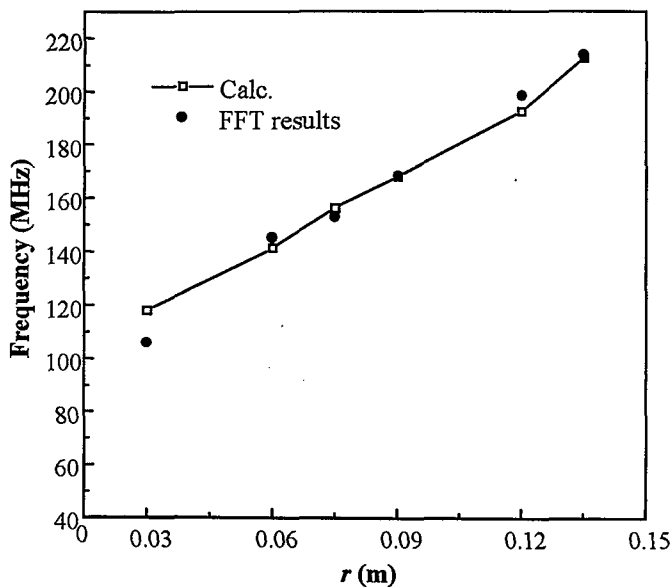


図2 プラズマ周波数

バルク中での電子温度の上昇による電離の増加と、低気圧になることによる衝突頻度の低下のトレードオフにより生ずることが分かった。

した。電界の半径方向成分は空間電荷分布からポアソン方程式を解くことにより求めた。コイルにより誘導される電磁界は、プラズマの誘電率を粒子のサンプリングから求まる電子密度と運動量移行衝突周波数より決め、マクスウエル方程式を差分化し Thomas 法で解くことにより求めた。荷電粒子の運動は、粒子それぞれの運動方程式を解くことにより求めた。電子と中性粒子の弾性衝突のほか、26 種の非弾性衝突は Nanbu の方法により取り扱った。

アルゴンプラズマの解析を行った結果、比較的低気圧領域において図 1 に示す様なバルク部における径方向電界の振動が観測された。この振動のパワースペクトルが最大となる周波数とプラズマ密度より決まる計算値のプラズマ周波数を比較すると一致し、観測された振動がプラズマ振動であることが分かった。さらにプラズマ振動の周波数が、径方向に変化するプラズマ密度に対応して変化する様子もシミュレートされた (図 2)。誘導結合プラズマのシミュレーションにおいてプラズマ振動を観測した例は他にない。

このほかに、誘導結合プラズマのプラズマパラメータが示す圧力依存性を明らかにした。プラズマ密度が低い場合、圧力低下と共に電子温度は単調に増加するが、電子密度はバルクでは増加し壁近傍では減少した。これは、バ

### 第3章 誘導結合プラズマリアクタ内の塩素によるシリコンエッチングの DSMC モデリング

エッチングプロセスにおいて、エッチャントとして主要な役割を果たすものの一つは中性種である。よって、ウエハへの中性種の数流束分布を予測することは、エッチングの均一性を予測する上で重要となる。3章では、誘導結合プラズマ(ICP: Inductively Coupled Plasma)リアクタ内での塩素原子によるシリコンのエッチングを考える。シリコンエッチングのプロセス圧力は一般に低く、従来の平行平板型のプラズマでは対応できない数 mTorr 台の圧力域を使用する場合もある。この圧力域で中性種の挙動を解析しようとする、塩素分子の平均自由行程が 1mTorr で 23mm となりすべり流から中間流の領域になるので、流れ場の解析は Direct Simulation Monte Carlo(DSMC)法に依らなければならない。よって本章では DSMC 法を用いて塩素分子、塩素原子等の中性種の流れ場を解析する。エッチャントは塩素原子であると仮定し、その誘導結合プラズマ中での生成レートは第2章で開発した PIC/MC 法によるシミュレーション法を用いてサンプリングした。このとき径方向の電界成分はシースモデルを用い既知とした。ウエハ表面での反応と反応副生成物( $\text{SiCl}_2$ )の生成、エッチャントである塩素原子の生成、原料ガスの塩素分子の流入、排気口よりの排気を DSMC 法により取り扱う。これより軸対称形の ICP リアクターでは塩素分子、塩素原子、 $\text{SiCl}_2$  の3つの中性種を考慮することになる。これらの6種類の衝突は重み付きの最大衝突法により取り扱った。特に3章では、圧力を一定にした場合、塩素ガス流量が及ぼすエッチレートへの影響を調べた。

その結果、流量の減少と共にエッチレートは下がりエッチレートの不均一性が大きくなることが分かった。また、流量によらずウエハ周辺部分でのエッチレートが上がり、そのエッチレートが上がる領域は流量が増加すると狭くった。この特性は、塩素原子の流れ場により説明できることが分かった。拡散と流れによる塩素原子の数流束は、流量と共に増加しエッチレートに大きく寄与する。またエッチャントの流れはウエハ端と基板端の間に岐点をもつが、これは流量が減少した時に外側にずれ、ウエハの中心側に向かう強い内向き半径流れを生む。この流れが塩素原子をウエハ周辺部へ運び、これによって流量が少なくなった時ウエハ周辺部でのエッチレートが上がり、その均一性を悪くすることが分かった。

### 第4章 ECR プラズマの流体モデルによる解析

電子サイクロトロン共鳴(ECR: Electron Cyclotron Resonance)を用いたプラズマリアクタは、他のプラズマソースと比較して低圧力でのプロセッシングが可能で、高密度プラズマを比較的低電力で生成でき、また無電極放電により金属汚染の心配がない。さらにプラズマの生成と基板に入射するイオンのエネルギーを独立に制御できる利点から、いくつかの半導体製造プロセスに採用されている。しかし、ECR プラズマを制御するパラメータは、マイクロ波のモード、マイクロ波導波管形状、マイクロ波導入窓形状、ガス導入位置、外部磁場形状、リアクター形状等数多く存在する。よって、ECR プラズマリアクタの設計を試行錯誤で行うのは非常に困難であり、モデリングにより仮想的なリアクタを設計しシミュレーションで諸因子の影響を調べることは、ECR プラズマリアクタの設計において重要である。本章では、ECR プラズマリアクタの設計支援を目的に、計算負荷が軽いため多くの放電条件の計算を行える流体モデルを開発し、生産ラインレベルの ECR プラズマリアクタの解析に適用した。

このモデルは電磁波の伝搬を解析する部分、プラズマの生成と輸送の部分、中性種の輸送と反応を

取り扱う部分よりなる。電磁波の伝搬は波動方程式を有限要素法により解析した。プラズマの誘電率テンソルは外部磁場強度と計算された電子密度より決定される。電子温度は、電磁波の解析より求められた電界と誘電率からきまる電力吸収を用い、電子のエネルギー保存式を解くことにより求めた。プラズマの生成は、電子の生成レートを求める際マクスウエル分布を仮定し計算した。電子の輸送は差分化した電子密度連続の式を陽解法により解く。中性粒子の電子衝突による生成は電子の生成と同様に計算し、中性種同士またはイオン-中性種間の反応による中性種またはイオンの生成は既知の反応レートにより求めた。中性種の輸送も密度連続の式を差分化し陽解法で解いた。以上説明した 3 つの部分で自己無撞着に解析してリアクタの定常状態を得た。

アルゴンガスに対する解析結果に対しては、同じリアクタ形状、同じ動作条件で測定したイオン飽和電流密度分布と計算値の比較を行った。測定値と計算結果はよく一致した。マイクロ波パワーを変化させても、計算値は測定されたイオン飽和電流密度を再現した。またマイクロ波のモードを選ぶことにより、プラズマの均一性を制御できる可能性があることが示された。本研究では  $TE_{11}$  モードでプラズマを生成するよりも、 $TE_{01}$  モードで生成したほうが径方向の均一性が上がることが分かった。さらに酸化膜を成膜する場合、同じ外部パラメータ（マイクロ波パワー、圧力）でもガス系（ $Ar/O_2/SiH_4$  と  $Ar/O_2/SiF_4$ ）が異なるときは、 $SiH_4$  系から得られる  $SiO_2$  膜と、 $SiF_4$  系から得られる  $SiOF_x$  膜の膜厚分布が大きく異なるという他者の実験結果を、ラジカル密度の空間分布より説明できた。すなわち、最も成膜に寄与すると思われる  $SiH_3$  密度の空間分布が  $SiO_2$  膜の膜厚分布と相関があり、同様に  $SiF_3$  密度の空間分布が、 $SiF_x$  膜の膜厚分布と相関があることが示された。よって成膜の均一性を実現するにはラジカルの空間分布を制御する必要があることが分かった。

## 第 5 章 結論

第 5 章に本研究を総括した。第 2 章の ICP のシミュレーションでは、従来のシミュレーション法では捕らえられなかったプラズマ振動を捕らえることができた。また ICP の放電構造を明らかにした。第 3 章では 2 章で開発した ICP のシミュレーション法と DSMC 法を組み合わせ、ICP リアクタ内での塩素によるシリコンのエッチングを解析し、流量を増大させることによりエッチングレートの均一性を高めることができることを示した。4 章では流体モデルにより ECR プラズマリアクタのシミュレーションを行い、マイクロ波モードによるプラズマの均一性制御の可能性とガス種による成膜分布の違いについて考察し、リアクタ設計の指針を得た。以上、本研究で開発したシミュレーション法が高密度プラズマリアクタ開発支援に有用であることを示した。

## 審査結果の要旨

エッチングや薄膜形成などの材料プロセッシングにおいて、プラズマの設計と制御は基盤技術となっているが、既存のプラズマ特性の解析法は未だ不十分である。本論文は、誘導結合プラズマおよび電子サイクロトロン共鳴プラズマの解析に適用可能なシミュレーション法を開発し、これを用いてリアクタ内のプラズマ構造を明らかにしたもので、全編5章よりなる。

第1章は緒論である。

第2章では、誘導結合プラズマのPIC/MC法を基本とした自己無撞着な粒子シミュレーション法を提案している。このような解法はこれまで待たれていたものである。この解法を一次元リアクタ模型内のアルゴンプラズマに適用し、電界、電子密度、電子温度に及ぼすガス圧力の影響を明らかにしている。また管壁でのイオンシースの自動形成過程と低圧力でのプラズマ振動の発生機構を示していることは、注目に値する。

第3章では、塩素の誘導結合プラズマの解析から、原子ラジカルの発生レートを求め、これを用いてDSMC法によりシリコンウエハのエッチング速度分布を見積もっている。大流量で分布の均一性が増し、かつエッチング速度が上昇することを明らかにしている。さらに塩素分子、塩素原子、反応生成物の密度場、温度場、流れ場の構造を詳細に調べ、前述のエッチング速度の流量依存性が、エッチャントである塩素原子の拡散と流れによって説明できることを示している。これらは新しい知見である。

第4章では、電子サイクロトロン共鳴プラズマの流体モデルによる解析法を提示し、これを実際のリアクタに適用している。解析により得られたアルゴンプラズマのイオン飽和電流密度の径方向分布は、実験値とよく一致している。またマイクロ波のモードを変化させることにより、プラズマ密度の径方向の均一性を向上させうることを示している。つぎに酸化膜の成膜を念頭に置き、ガスが $\text{SiH}_4$ と $\text{SiF}_4$ の場合を解析し、特定のラジカルの空間分布と実測された酸化膜の膜厚分布に相関があることを明らかにしている。これらは実用上重要な知見である。

第5章は結論である。

以上要するに本論文は、低ガス圧力高密度プラズマの新しい解析法を示し、これを誘導結合プラズマリアクタおよび電子サイクロトロン共鳴プラズマリアクタに適用し、ガス、プラズマおよびラジカルの空間分布と流れ場を明らかにしたもので、流体工学および電子工学の発展に寄与するところが少なくない。

よって、本論文は博士（工学）の学位論文として合格と認める。