

氏名 やまざき おさむ
 山崎 修
 授与学位 博士(工学)
 学位授与年月日 平成16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) 航空宇宙工学専攻
 学位論文題目 粒子モデル解析と実験によるスパッタ成膜の研究
 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 西山 秀哉
 東北大学教授 江刺 正喜

論文内容要旨

1. 緒論

LSI (Large Scale Integration) 回路などの半導体デバイスや TFT-LCD (Thin Film Transistor · Liquid Crystal Display) をはじめとする電子デバイスは、高速化や高集積化への要求が加速しており、シミュレーションを利用した開発が不可欠になりつつある。デバイスの高速化のためには、配線材料を従来の Al から、より低抵抗な Cu へ変更することが有効である。Cu 配線にはダマシンプロセスを適用する必要があるが、このプロセスには高集積化に伴い素子が微細化に伴って、配線溝のアスペクト比(深さ/幅)が増大し、配線溝の底部まで導通のある Cu シード層の形成が困難になるという問題がある。そこで本研究では、Cu シード層形成のためのスパッタ装置およびその改良型のイオン化スパッタ装置による、Cu の成膜レートおよび堆積形状を計算するコンピュータシミュレーション手法を求めた。これにより装置構造の最適化や圧力、ターゲットと基板間の距離といったプロセスの最適化が可能となり、装置やプロセスの開発期間の短縮と開発コスト削減をはかることが可能となる。

2. 銅スパッタ成膜の粒子モデル解析と実験

図1に示すような Cu 配線のシード層作成用の Cu スパッタ装置をモチーフに、プロセス設計に用いることを想定したシミュレーション手法を求めた。ターゲットと基板間の距離やガス圧力といったプロセスのレシピから成膜レートを求めるため、シミュレーションは、以下のようにスパッタ装置内の現象を一貫して計算する方法で行った。

- ① PIC-MCC モデルを用いたプラズマシミュレーションにより、装置内部に発生するプラズマの分布と Ar⁺イオンのターゲットへの衝突頻度を求めた。
- ② ①で求めた Ar⁺イオンの衝突頻度に比例してターゲットから Cu 原子の放出させた。放出された Cu

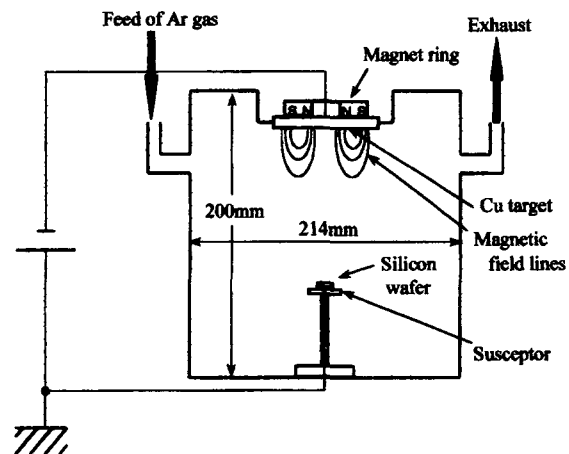


図1 スパッタ実験装置

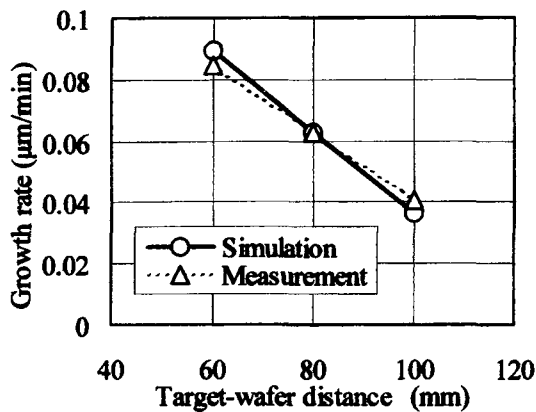


図2 ターゲットーウエハ間距離と成膜レートの関係
 圧力:0.8Pa
 パワー:200W

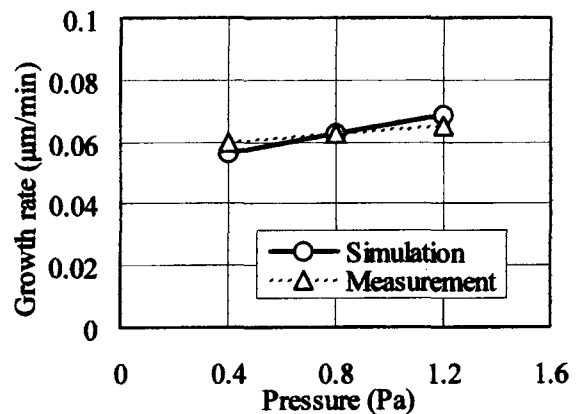


図3 ガス圧力と成膜レートの関係
 ターゲットーウエハ間距離:80mm
 パワー:200W

原子の速度は 10eV のマクスウェル分布, 角度分布はターゲット面に対する余弦則に従うと仮定した.

- ③ターゲットから放出された Cu 原子は背景ガスの Ar のみと衝突すると仮定し, テスト粒子モンテカルロ法を用いてチャンバ内での Cu 原子の輸送を計算した. 衝突は剛体球モデルとした.
- ④ Cu 原子がチャンバ壁面やウエハ面へ入射した場合, 一定の付着確率 S_c でその面に付着すると仮定した.
- ⑤ ②~④をウエハの小片上に付着した原子数が十分な数になるまで繰り返す. 成膜レートはチャンバ壁面やウエハ面の単位面積あたりに付着する Cu の数と比例すると仮定した.

このシミュレーションによって求めたターゲットと基板間の距離, ガス圧力に対する成膜レートの依存性および実測値を図 2, 3 に記す. これらのシミュレーション結果と実測値は非常によく一致していることから, シミュレーションが妥当であることを検証できた.

3. 銅イオン化スパッタにおける粒子輸送

半導体デバイスの微細化に伴い, 配線溝やビアホールのアスペクト比が増大しており, 通常のスパッタでは内部に膜切れの無いシード層を形成することが困難になってきている. このため図 4 に示すような, より埋め込み性の良いイオン化スパッタの開発と実用化が進められている. この装置は, ターゲットから放出された Cu 原子をチャンバ内部で, 高密度な誘導結合型プラズマ (ICP) によりイオン化し, ウエハに印加した RF バイアス電圧で配線溝やビアホールの内部にイオンを引き込むという複雑な方法をとっている. このため, 開発には非常に大きなコストと長い期間を

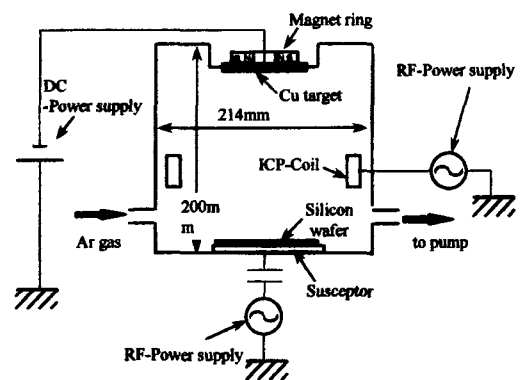


図4 イオン化スパッタ実験装置

要し、シミュレーションを併用したプロセス、装置構造の最適化が不可欠になっている。本章では、このシミュレーション手法を開発した。

シミュレーションは、ビアホールへのシード層形成を想定し、以下の流れで行った。

- ① プラズマシミュレーションから ICP の電子密度と電子温度を求め、これらと Cu 原子の電離衝突断面積から、Cu 原子のイオン化率を計算する。
- ② ターゲットのエロージョン分布を測定し、その量に比例した確率でターゲットから Cu 原子が放出するとした。このときの Cu 原子の速度は 10eV のマクスウェル分布、角度分布は余弦則に従うと仮定した。
- ③ チャンバ内の Cu 原子の輸送をテスト粒子モンテカルロ法で求める。
- ④ ③で求めたチャンバ内の輸送中 Cu 原子を、①で求めたイオン化率に従ってイオン化する。
- ⑤ Cu⁺イオンはウエハ表面に形成されたシース中の電界でウエハ法線方向に加速される。
- ⑥ Cu 原子とイオンはチャンバ壁面やウエハ面上において付着する。これからビアホール内部での Cu 膜の堆積形状も求める。

ビアホール側壁への Cu の堆積膜厚に対して、Cu 原子のイオン化を考慮していないシミュレーション結果（通常のスパッタ装置を使用したと仮定）とイオン化を考慮したシミュレーション結果を実験値と比較した。これを図5に示す。これより、Cu 原子のイオン化を考慮していないシミュレーション結果は実験値と比較してビアホールの入り口側面での Cu の膜厚が厚く、穴底部の膜厚が著しく薄いことがわかる。これからイオン化スパッタ装置の埋め込み特性に対してスパッタ原子のイオン化の効果は非常に大きく、これを無視できないこと、および本章のシミュレーション手法が妥当であることがわかった。

4. 銅イオン化スパッタによる微細構造への成膜

微細化にとまらぬ、穴や溝の大きさに対する Cu の堆積量が増すにつれ、第3章のシミュレーション手法では堆積形状の誤差が大きくなる。これに対して以下の3つのモデルを追加を行った。

- ① Cu⁺イオンの付着確率入射角度依存性を考慮するために、入射角が 0~30 度の場合は全て付着、30~50 度の場合は確率 50 %で付着、50~90 度の場合は全て付着しないというモデルを追加した。ウエハに付着しなかった Cu⁺イオンは、ウエハから電子を得て Cu 原子に戻り余弦則で反射するとした。

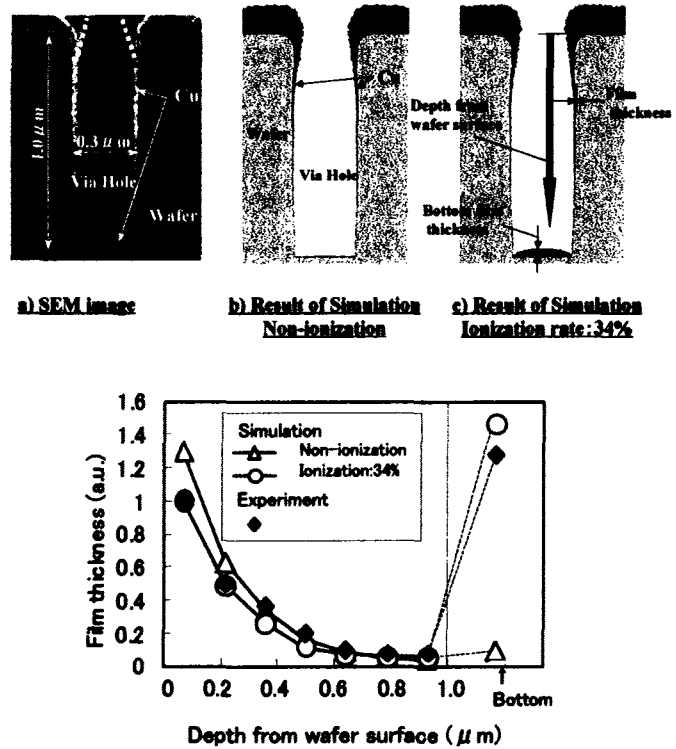


図5 ヴィアホールへのCu堆積
実測とシミュレーション結果の比較

② Cu^+ イオンによるウエハ表面のスパッタリングを考慮するために、スパッタ率を入射角が $0\sim 50$ 度で 40% 、 $50\sim 90$ 度で 0% とするモデルを追加した。また、 Ar^+ イオンによるウエハ表面のスパッタリングを考慮するため、プラズマシミュレーションで求めたイオンフラックスでウエハに衝突するとし、スパッタ率をイオンの入射角が $0\sim 40$ 度では 35% 、 $40\sim 90$ 度では 0% とするモデルを追加した。スパッタが起こる場合は、イオンの衝突した固体セルは空間セルに戻り、イオンがセルと接触した点から余弦則に従って Cu 原子が放出されるとした。

③ Cu 粒子のウエハ表面での拡散を考慮するために以下のモデルを追加した。

(a) Cu 原子およびイオンが入射し Cu 膜表面に接触する。

(b) 接触部のセルを中心にした正方形の領域（図では縦 5 nm ×横 5 nm ）内の空間セルに対して、その空間セルと隣接する固体セルの数を調査する。

(c) 隣接する固体セル数の最も多い空間セルまで Cu 原子は表面拡散によって移動したとする。範囲内に候補のセルが複数ある場合はランダムに決定する。

(d) 移動先の空間セルを固体セルに変えることで固着を表現する。

配線溝への埋め込みに対して、モデルを追加したシミュレーションの結果と実測値を図6に示す。両者は良く一致していることから、モデルの追加が妥当であることがいえる。

5. 電子デバイス開発および量産へのシミュレーション技術の応用

前章までで、 Cu スパッタおよび Cu イオン化スパッタの成膜レートや堆積形状を求める粒子シミュレーションを開発した。これを装置開発やプロセス適正化に応用することで、開発効率が大幅に改善する。しかし、これはスパッタシミュレーションの応用例の1つにすぎない。

本章では、スパッタ成膜の粒子シミュレーションの応用例として以下の3例を示す。

- ①半導体配線材料 WSi の堆積形状の改善
- ②DVD メディア Ag 反射膜の成膜レート基板面内分布改善
- ③ TiN バリアメタル成膜用のスパッタ装置のダスト低減

6. 結 論

LSI の Cu 配線プロセスで重要な役目を果たす Cu シード層成膜をモチーフとして、スパッタおよびイオン化スパッタの成膜レートおよび堆積形状を予測するシミュレーション手法を求めた。さらにシミュレーション結果を実験値と比較することで妥当性を検証した。このシミュレーションにより、装置の構造の最適化やプロセスの適正化のための労力が削減できる。また、装置の理論的な性能限界を見極め、リスク回避を行うことも可能となる。

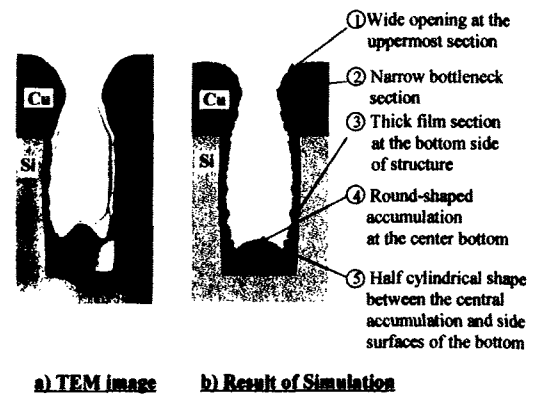


図6 溝への Cu 堆積形状
実測とシミュレーション結果の比較

論文審査結果の要旨

LSI の配線材料はアルミニウムから銅に移りつつある。配線溝に電気メッキで銅の埋め込みを行ない、余分の銅を CMP により削り取ることで配線が完了するが、電気メッキの前に薄い銅シード層を溝の表面に形成しておく必要がある。

本論文は、スパッタリングによる銅シード層の形成を、粒子モデル解析によって予測する方法を提案したもので、全編 6 章よりなる。

第 1 章は緒論である。

第 2 章では、マグネトロンプラズマの解析から出発して、イオンのターゲット入射、入射イオンによるターゲットからのスパッタ粒子の発生、スパッタ装置内におけるスパッタ粒子の衝突と輸送、スパッタ粒子の付着までを一貫してシミュレートする方法を提案し、本方法が膜成長速度の予測に有効なことを実験との比較により明らかにしている。また実験により、銅原子の付着確率を決定する方法を提案し、付着確率が 0.93 となることを明らかにした。

第 3 章では、イオン化スパッタにおけるスパッタ粒子の衝突と輸送を解析する方法を提案している。すなわち、プラズマ解析の結果を用いて銅原子の電離確率を決定し、さらに銅イオンの衝突・輸送、シースにおける加速を考慮したシミュレーション法を提案している。本方法を穴のカバレッジ計算に適用し、膜断面形状が実験で得た SEM 写真と良い一致を示すことから、方法の妥当性を明らかにしている。

第 4 章では、第 3 章の方法に、付着確率の角度依存性、アルゴンイオンによるスパッタリング、膜表面での銅原子のマイグレーションの効果を組み入れ、計算モデルの高精度化をはかっている。この改良した解析法で溝へのカバレッジ計算を行ない、シミュレーション結果が TEM 像と非常によく一致することを示している。これは本シミュレーション法の有用性を示したもので、重要な結果である。

第 5 章では、第 2 章から第 4 章で提案したシミュレーション法を、実際の生産プロセスや成膜装置の開発に応用し、有効なことを明らかにしている。すなわち、本方法を、ウエハ面内での膜厚の一様性の改善、DVD 用スパッタ装置の改善、DVD 用銀反射膜の成膜分布の改善、スパッタ装置内における微粒子発生の低減に役立てている。これは工業上重要な結果である。

第 6 章は結論である。

以上要するに本論文は、マグネトロンスパッタリングにおけるプラズマ生成から薄膜成長までを一貫してシミュレートする方法を提案し、かつ、実験によって方法の妥当性を検証したもので、機械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。