

トレンチ形状へのスパッタ粒子のフラックス分布の評価

ペガサスソフトウェア株式会社
中館 博

2005年4月8日

概要

テスト粒子モンテカルロ法を用い、ターゲット-基板間の距離が cm スケールのマグネトロンスパッタ装置内で、ターゲットからスパッタされて基板上的 μm スケールのトレンチ形状へ到達するスパッタ粒子のフラックス分布を評価する。

1 計算体系と方法

ターゲット-基板間の距離が cm スケールのマグネトロンスパッタ装置内で、ターゲットからスパッタされて基板上的 μm スケールのトレンチ形状へ到達するスパッタ粒子のフラックス分布を評価する。テスト粒子モンテカルロ法 [1] を用いる。

マグネトロンスパッタ装置のターゲット-基板間の距離 (TS 間距離) は多くの場合、cm のオーダーである。一方で、トレンチの形状は μm のオーダーであり、長さスケールが 4 桁異なる。ターゲットから放出されたスパッタ粒子がトレンチの各部に到達するまでの過程を一つの計算体系として計算しようとする、トレンチのサイズに合わせた小さいメッシュサイズでマグネトロンスパッタ装置内をメッシュ分割する必要がある。その結果メッシュ分割数が非常に大きくなり、計算時間や計算機のメモリ量の制限から事実上計算を行うことが出来ない。そこで 2 つの段階に分解して計算することを考える。

まず第一段階として、cm オーダーでの計算体系で、テスト粒子モンテカルロ法によりターゲットから放出されるスパッタ粒子が基板表面近傍に到達するまでを解析する (図 1)。この計算では、装置内を数 cm 飛行して基板付近へ到達するスパッタ粒子の速度分布関数を求めることを目的とする。スパッタ粒子は Cu 原子とし、10eV の Maxwell 分布で放出されると仮定する (図 2)。y 方向正の向きがに放出されるとして、次式に従った分布である。

$$\begin{aligned} f_x(v_x) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_x^2}{2kT}\right) \\ f_y(v_y) &= \begin{cases} \frac{m}{kT} v_y \exp\left(-\frac{mv_y^2}{2kT}\right) & (v_y > 0) \\ 0 & (v_y \leq 0) \end{cases} \\ f_z(v_z) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv_z^2}{2kT}\right) \end{aligned} \quad (1)$$

ここで m スパッタ粒子の質量、 k はボルツマン定数、 T はスパッタ粒子の温度である。いまスパッタ粒子は 10eV ($=T_e$) としているので q を電荷素量 ($1.602 \times 10^{-19}\text{C}$) として $kT = qT_e$ と考えれば良い。この分布は、境界の外部に平衡

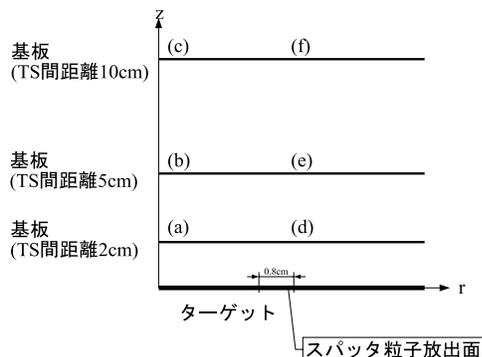


図 1: ターゲットと基板、スパッタ粒子放出面。円筒座標系で計算する。スパッタ粒子放出面は $3.2\text{cm} \leq r \leq 4.0\text{cm}$ の範囲、TS 間距離は 2.0cm, 5.0cm, 10.0cm とした。(a)~(i) の基板表面でスパッタ粒子の速度分布をサンプリングする。(a)~(c) は $r=0.3\text{cm}$, (d)~(f) は $r=5.5\text{cm}$ の位置である。

状態で平均速度 0 の気体があると考えて、境界から計算領域内に流入してくる気体分子の速度分布に相当する、いわゆる余弦則に従った速度分布である。放出面からは $1.0 \times 10^{19} \text{m}^{-2} \text{sec}^{-1}$ のフラックスで一様な分布で放出すると仮定する。スパッタ粒子と装置内のバッファガス (Ar) との衝突を考慮する。Ar は温度 298.15K, 圧力 0.67Pa, 平均流速 0 で装置内に一様な密度で分布しているとして取り扱う。Cu と Ar の弾性衝突断面積をエネルギーによらず $3.0 \times 10^{-19} \text{m}^2$ と仮定すれば、Cu の平均自由行程は 4.8cm である。

第二段階として、 μm スケールでのテスト粒子モンテカルロ法シミュレーションを行う (図 3)。目的はスパッタ粒子を流入させて、トレンチの各部分へ付着するフラックスを求めることである。この際、第一段階の計算結果得られた速度分布を、流入するスパッタ粒子の速度分布として用いる。スパッタ粒子の平均衝突距離は μm スケールよりも十分大きいので、第二段階の計算では衝突は無視してもよい。ただし、衝突を考慮してもそれほど計算量は変わらないのでここでは第一段階と同じ手法で計算する。

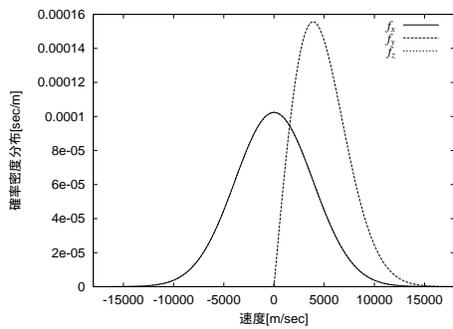


図 2: スパッタ粒子放出面から放出される粒子の速度分布

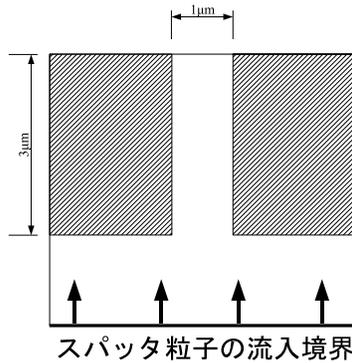


図 3: トレンチの形状。トレンチは半径方向にのびているとする。

2 計算結果

2.1 Cu の密度分布と基板上へのフラックス分布

図 4 に Cu の密度分布を示す。スパッタ粒子の放出面近傍の Cu 密度分布は、TS 間距離によらず同様な分布である。z 方向のメッシュ間隔が異なるため、ピークの密度は異なって見える。図 5 に基板に到達したフラックス分布を示す。TS 間距離が大きくなるほど一般的な分布に近づくが、フラックスの絶対値は小さくなる。

2.2 基板付近での Cu の速度分布

粒子の速度成分は円筒座標系ではなくカーテシアン系で考えた方が分かりやすいので、以下、 $v_r, v_z, rv_\theta \rightarrow v_x, v_y, v_z$ として表記する。図 6 の基板の各位置に到達したスパッタ粒子の速度分布を示す。速度分布関数を $f_{xyz}(v_x, v_y, v_z)$ とする。図の f_x, f_y, f_z は f_{xyz} のある方向についてのみ着目したもの、

$$f_x(v_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{xyz}(v_x, v_y, v_z) dv_y' dv_z' \quad (2-a)$$

$$f_y(v_y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{xyz}(v_x, v_y, v_z) dv_x' dv_z' \quad (2-b)$$

$$f_z(v_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{xyz}(v_x, v_y, v_z) dv_x' dv_y' \quad (2-c)$$

である。ここでは $f_{xyz} = f_x f_y f_z$ は成り立たず、各速度成分は独立ではないことに注意する必要がある。ターゲット

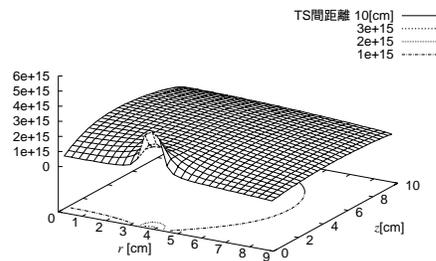
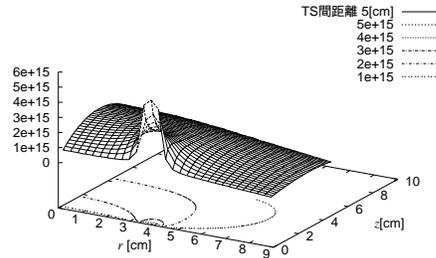
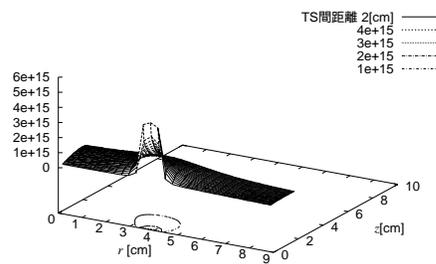


図 4: Cu の数密度分布。上からそれぞれ TS 間距離 2.0cm, 5.0cm, 10.0cm の場合。

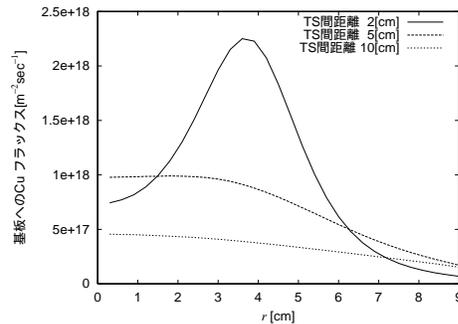


図 5: 基板に到達した Cu フラックス分布

トのスパッタ位置から遠いほど、速度の絶対値の小さい成分(熱速度成分)が増えてくる。バッファガスとの衝突によるものである。基板の中心近くでは、 f_x と f_z はほとんど同じ分布形になる。基板の外側では、 v_x が正の成分(円盤の外側に向かう成分)が多くなる。 f_z はどの位置でも正

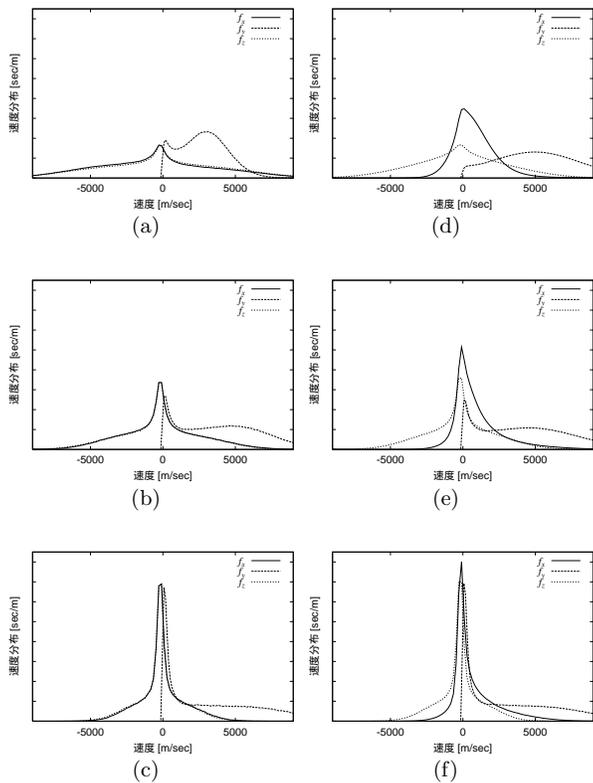


図 6: 基板の各位置に到達したスパッタ粒子の速度分布

負対称な分布になる。

2.3 トレンチの各部分へ到達した Cu フラックス

トレンチの各部へのスパッタ粒子のフラックスを示す。TS 間距離や基板の r 位置によって、基板付近に到達する Cu フラックスの絶対値は異なるが、ここでは速度分布関数の違いによる、トレンチ各部へ到達する Cu フラックスの相対的な変化に着目するため、図 3 のスパッタ粒子の流入境界から流入するフラックスは基板の位置によらず一定 ($1.0 \times 10^{19} \text{m}^{-2} \text{sec}^{-1}$) として計算した。

仮にスパッタ粒子がバッファガスと衝突しないで基板にまで到達するならば、TS 間距離が長い方が v_y が大きい成分が相対的に増える (v_x や v_z の絶対値が大きい粒子は基板に到達せずに装置側壁にぶつかる) ため、基板に到達した粒子のうちトレンチの底部に達する粒子の割合が増加する。実際には TS 間距離が長い方が、スパッタ粒子は散乱されて熱速度の成分が増える。熱速度の成分は等方的な角度分布でトレンチに侵入してくるため、トレンチの入り口付近に付着する割合が多くなる。この二つの効果のバランスでスパッタ粒子がトレンチへ付着する分布が決まってくる。TS 間距離 10cm の場合は TS 間距離 5cm の場合に比べて、トレンチ入り口にやや多く付着していることが分かる。また TS 間距離 2cm の中心軸付近の場合 (a) については、スパッタ粒子が放出される面からの角度がきついために入り口付近に多く付着しているのであって、熱速度の割合が増えて

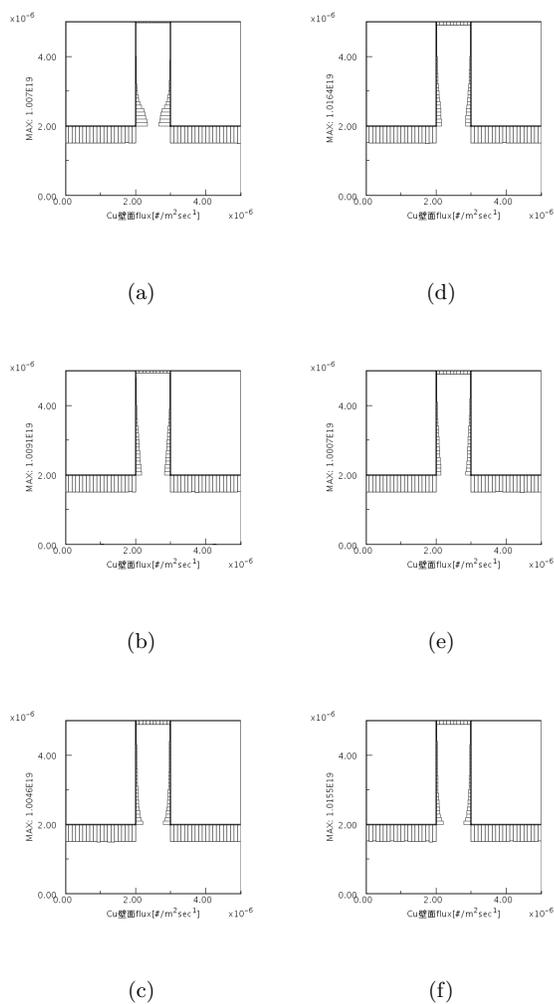


図 7: 基板の各位置における、トレンチへのスパッタ粒子のフラックス分布

いるわけではない。

3 おわりに

計算を 2 つの段階に分解することにより、現実的な計算時間でターゲットから放出されたスパッタ粒子が基板のトレンチへ到達するフラックスの分布を計算することができる。TS 間距離、バッファガスのガス圧などのパラメータを変えて計算することは容易である。スパッタ粒子の放出角度分布やエネルギー分布も考慮にいれればさらに具体的な計算になるが、一様分布とした計算と劇的に異なる結果になることは考えにくい。この計算結果に基づいて、トレンチの形状の時間変化を計算することが、次に考えられる。

参考文献

- [1] 南部健一. 原子・分子モデルを用いる数値シミュレーション 第 3 章モンテカルロ法の基礎. コロナ社, 1996.