



解説

半導体プラズマプロセスシミュレーションと TCAD

斧 高一

(京都大学大学院工学研究科)

Numerical Simulation and Technology Computer-Aided Design of Plasma Processing for the Fabrication of Semiconductor Microelectronic Devices

ONO Kouichi

Department of Aeronautics and Astronautics, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Kyoto 606-8501, Japan

(Received 21 September 2004)

Plasma processing, such as etching and deposition, is an indispensable processing technique in the fabrication of modern semiconductor microelectronic devices. Nowadays, increasingly strict requirements are being imposed on plasma processing technology, as integrated circuit device dimensions continue to be scaled down. The numerical simulation is strongly required for a better understanding of the physics and chemistry underlying the processing, and for a design of plasma reactors and plasma processes requiring less experimental efforts. This paper presents an on-going study of the plasma simulation for plasma reactors and the process simulation for microstructural features on substrates, in view of the goal to a technology computer-aided design (TCAD) of plasma processing. Attention is placed on etching in parallel-plate radio frequency (rf) and inductively coupled plasmas, with emphasis on the physical and chemical model used in the simulation.

Keywords:

plasma processing, plasma etching and deposition, processing plasma, plasma-surface interaction, microstructural feature, feature profile evolution, numerical simulation, plasma simulation, process simulation, fluid model, particle model, technology computer-aided design

1. はじめに

プラズマを用いた薄膜形成(CVD, スパッタリング), 表面改質(酸化, 窒化), および微細加工や薄膜除去(エッチング, アッシング)は, プラズマプロセスあるいはプラズマプロセッシングと総称される. 1970年代に研究開発が始まったプラズマ応用技術であるが, 宇宙や核融合分野とならび, いやそれ以上に精力的な研究開発が民間主導で進められ, 今日, 半導体デバイス[1, 2]やマイクロマシン(MEMS デバイス)[3, 4]製造をはじめとした先端工学分野で不可欠のプロセス手段となっている.

プラズマプロセス技術の研究開発は, これまで特に, シリコンをベースとした半導体集積回路デバイス(Si-LSI)の高性能化(高集積化, 高速化)・多様化と, それに伴う電極や配線などの回路パターンの微細化に対応して進展してきた. 現在, パターン寸法(パターンの溝幅・線幅や孔・柱径)が $0.18\ \mu\text{m}$, さらに $0.13\ \mu\text{m}$ の微細加工ルールによるデバイスが量産され供給されているが, 半導体デバイスの微細化はとどまるところを知らず, さらに $\text{sub } 0.1\ \mu\text{m}$ ($90\ \text{nm}$, $65\ \text{nm}$, $45\ \text{nm}$)に対応する技術の研究開発も進んでいる. $0.1\ \mu\text{m}$ レベルのパターンの加工において許容される加工寸法精度(マスクと形成されたパターンとの寸法差)は

author's e-mail: ono@kuaero.kyoto-u.ac.jp

$0.01\ \mu\text{m}$ 以下($10\ \text{nm}$ 以下)であり, いわゆるナノの領域に入る. また, $0.1\ \mu\text{m}$ レベルのパターンへの薄膜形成に関しても, その段差被覆性(ステップカバレッジ)などの観点から, $10\ \text{nm}$ よりはるかに薄い膜厚でのプロセス制御が不可欠である. 一方, 生産性の観点から基板(ウエハ)の大口径化も進み, 今日直径 $8\ \text{inch}$, $12\ \text{inch}$ ($200\ \text{mm}$, $300\ \text{mm}$)が主流であるが, さらに大口径($400\ \text{mm}$)基板の検討も始まっている.

半導体プラズマプロセスでは今後も, 大口径基板に対する優れた生産性(プロセス速度, 制御性, 再現性)を保ちつつ, 微細パターンの加工性(形状異方性と寸法精度, 材料選択性)や薄膜特性(段差被覆性, 電氣的・機械的特性), 損傷性(ダメージ), ウエハスケールでの巨視的な均一性, およびチップサイズ・セルサイズレベルでの微視的な均一性, の観点から不断の技術開発・改善が求められる. また最近ではプロセス反応ガスの地球環境問題(地球温暖化, オゾン層破壊)への対応も必須であり, さらに, 微細化に伴い新しいデバイス構造や材料への対応も急務である. 極薄ゲート酸化膜の窒化, 高誘電率ゲート絶縁膜やキャパシタ絶縁膜の形成・加工, 低誘電率層間絶縁膜の形成・加工, などがあげられる[5].

ところで、半導体プラズマプロセスの分野では、プロセスプラズマの基礎研究の観点のみならず、技術開発の高度化と効率化のために、従来からバーチャルプラズマプロセスともいえる計算機（コンピュータ）シミュレーションの研究が盛んに行われ、プラズマやプロセスの開発現場でも近年徐々に使われるようになってきている。プラズマプロセス技術は、プラズマリアクタ（反応装置）、反応ガス、そしてそれらを使いこなすプロセス技術（制御技術）の3つの要素から成り、基板表面でのプロセス機能は、プラズマリアクタにおけるプラズマの構造やガスの流れ、およびプラズマ気相や基板表面などで生じる反応が複雑に絡み合って発現する。したがって、プラズマプロセスにかかわるパラメータは膨大で、その技術開発には多大な時間とコストを要するため、先に述べたような、今後のさらなるデバイスの高性能化と微細化に対応したプラズマプロセス技術の進展において、実験手法と相補的なシミュレーションの必要性・重要性はますます高まっている。

本稿では、半導体プラズマプロセスシミュレーションの構成について述べ、平行平板型容量結合高周波プラズマ（CCP）[6]と平面コイル型誘導結合高周波プラズマ（ICP）[7]に関する著者等の研究を紹介する。前者では粒子モデルによりアルゴン（Ar）プラズマを、一方後者では流体モデルにより塩素（Cl₂）プラズマを取り扱い、エッチングプロセスでの微細加工形状をシミュレートする[6,8]。著者は数年前まで半導体プラズマプロセス自体の研究開発に従事し[9-11]、シミュレーションの研究を始めたのはそれ以降である。プロセスプラズマの基礎研究、ならびにモデリング・シミュレーションの基礎にある方程式系の詳細、および数値シミュレーションの具体的手法とそれらの数学的厳密性については、専門の方々によるテキストや解説[12-22]を参照されたい。本稿は、シミュレーションに基づく物理モデル（現象モデル）の本質と限界、および半導体プラ

ズマプロセスの技術計算支援設計（TCAD: Technology Computer-Aided Design）に向けての今後の課題に重点を置く。なお TCAD とは一般に、計算機上での解析や設計に必要なソフトウェア（シミュレータ）、または解析や設計作業（シミュレーション）のことをさす。

2. プラズマプロセスシミュレーションの構成と TCAD

半導体プラズマプロセスシミュレーションは、プラズマシミュレーション（装置シミュレーションとよぶことも多い）とプロセスシミュレーションに大別できる。プラズマシミュレーションでは、状況に応じて粒子モデルと流体モデルが用いられるが、プロセスシミュレーションでは一般に粒子モデルを用いる。プラズマリアクタの中を空間的にながめると、Fig. 1に示すように、プラズマプロセスにかかわる物理的・化学的機構は、1)プラズマ気相での粒子輸送と反応過程、2)プラズマと接触したリアクタ壁や電極表面での反応過程、および3)基板表面での反応過程、に大別でき、さらに基板表面では4)微細パターン構造内での粒子輸送と表面反応過程がプロセス特性を決定づける[9-11]。これら4つのカテゴリーの粒子輸送と反応過程は相互に絡みあい複雑ではあるが、近年多くの実験的・理論的研究が進み理解も深まってきた[23-25]。

プラズマ（装置）シミュレーションは、放電プラズマの構造とガスの流れを考慮に入れて、上記1), 2), 3)に関するモデリングを総合的に行う。反応ガスは、主にプラズマ気相中の電子衝突過程によって励起、解離、電離され、生成されたイオンおよび中性の反応活性種は、未分解のガス分子とともに輸送されて基板表面に入射する。またリアクタ壁や電極表面は、イオンや中性活性種の消滅にかかわる主要なフィールドであり、気相中の反応粒子の組成と密度に大きく影響を及ぼす。基板表面での反応は、反応ガス

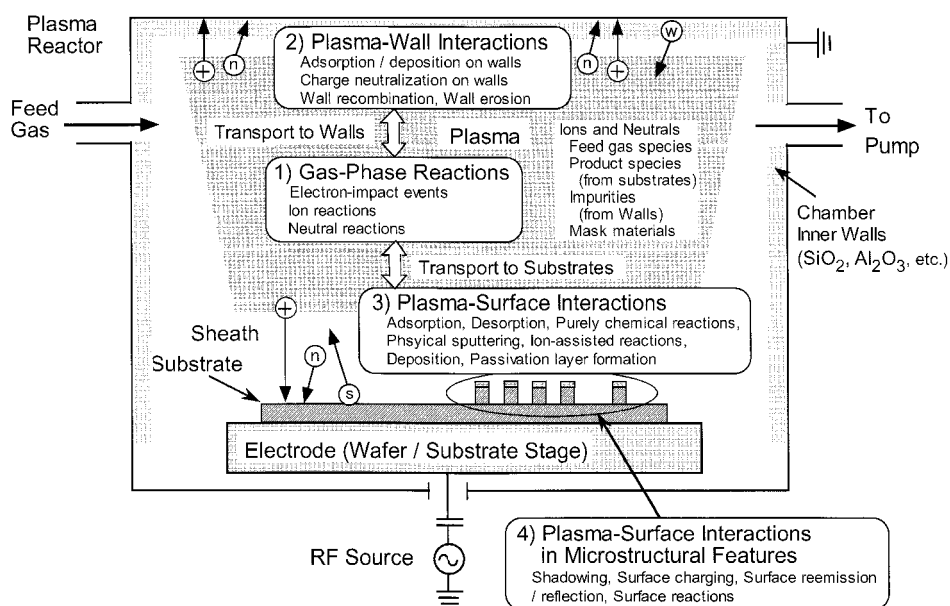


Fig. 1 Schematic of the reaction processes that occur in a plasma reactor during materials processing of a substrate, including gas-phase reactions, plasma-wall interactions, and plasma-surface interactions in large open fields and also in microstructural features.

から生じたイオンや中性活性種などの化学組成、それらの表面入射フラックスと速度分布（入射エネルギーと角度分布）、さらに表面温度に依存する。ここで、プラズマは電気的にほぼ中性であるが、プラズマと接触する基板や電極・リアクタ壁など固体表面上には、空間電荷層であるイオンシースが形成され、イオンや電子の振る舞いはシースの影響を受ける。なお、プロセス時のプラズマ中には、反応ガス分子とそのフラグメントのほか、基板からの反応生成物、壁からの不純物、マスク物質なども含まれる。このような反応ガス以外に起源を有する反応粒子の存在と、それらの基板表面反応やプロセスへの影響は、近年実験的にはよく認識されるようになってきたが[9 11]、シミュレーションではまだほとんど考慮されていない。このように、プロセスプラズマに含まれる反応粒子の種類は多種多様であり、それらの粒子間の相互作用（衝突/反応過程）も複雑・膨大である。したがって、プロセスプラズマのプラズマシミュレーションでは、計算機の容量（速度）の観点から、反応粒子の種類が少ない系については粒子モデルを用いることも多いが、多数の反応粒子種と反応過程を考慮する必要のある場合には流体モデルを用いるのが現状である。

プロセスシミュレーションは、プラズマシミュレーションからの、基板表面に入射する反応粒子の組成・フラックス・速度分布を入力パラメータとして、上記4)に関するモデリングを行う。基板表面の微細パターン構造内表面でも上記3)の巨視的基板表面での反応が基本であるが、パターン内での粒子軌道は種々の影響を受け、パターン内を輸送されてパターン底面や側壁に入射する粒子フラックスは、プラズマから基板表面への入射に比べ減少し不均一になる。微細パターンによる影響として、パターン構造の幾

何学的形状による制限（幾何学的シャドーイング）、パターン内表面の局所的な電荷蓄積（チャージアップ）、パターン内表面での反射や再放出、などがあげられる[10 23]。こうした反応粒子の微細パターン内での輸送と表面過程に起因して様々なプロセス特性が発現する。微視的均一性と総称され、プロセス速度、加工形状・選択性、薄膜の段差被覆性・電気特性などが、パターンの幾何学的構造（パターン寸法、アスペクト比）やパターン密度の局所的な差違に依存する現象であり、今後、ダメージとともに、実験・シミュレーションの両面から理解と解決を要する重要な課題である。

実際のプロセス開発では、Fig. 2に示すように、プラズマリアクタの多彩な装置パラメータ（装置関数/外部制御パラメータ）を調整することによってプラズマ特性（プラズマパラメータ）を制御し、基板表面に入射するイオンや中性活性種などの反応粒子の特性を最適化して、様々な材料やデバイス構造に対応するプロセス特性を得ることが課題である。したがって、半導体プラズマプロセスシミュレーションのゴールは、シミュレータに装置パラメータを入力すると、種々のプロセス特性が出力として得られる形態であり、装置パラメータを変化させてプロセス機能が予測でき、実際のプロセスと比較して現象を支配する装置パラメータ・プラズマパラメータや粒子輸送・反応過程が解析できて、半導体プラズマプロセス開発（プロセス設計）に供しうる実用的な TCAD に至る。

これまで数多くのプラズマリアクタが開発されプロセスに適用されてきたが、装置パラメータ プロセス特性の間の相関関係は必ずしも一対一対応でなく複雑であり、実験上もシミュレーション上も完全な理解には至っていない。現在は、中間にプラズマ特性の実験的診断や数値的評価を

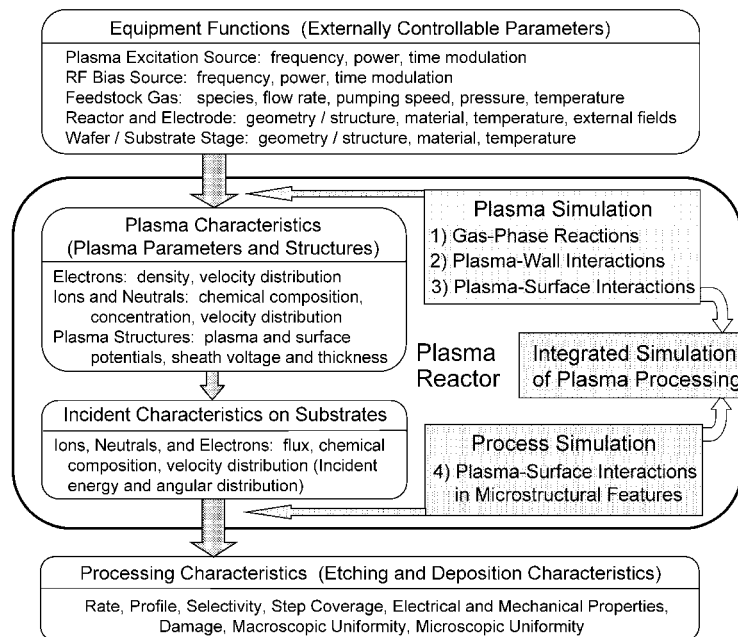


Fig. 2 Schematic of the flow of plasma processing, where we employ a number of externally controllable parameters of the plasma reactor to control the plasma properties, and in turn to obtain the processing characteristics to be achieved. Also shown is what the plasma (equipment) simulation and the process simulation deal with in view of the flow of plasma processing.

介して、装置パラメータ プラズマ特性、およびプラズマ特性 プロセス特性の相関関係の理解が進み、それぞれプラズマ(装置)シミュレーション、プロセスシミュレーションとして一部実用に供されている(これらは部分的なTCADといえる)。今後、両者を連携させて、装置パラメータ プロセス特性の比較に対応でき、プロセスの解析・設計に適用できる統合的なTCADに向けたプラズマプロセスシミュレーションの研究が盛んになっていくであろう。そのためには、プラズマリアクタにおけるプラズマの物理的・化学的状態とプラズマ・表面相互作用に関するより詳細で高度な理解とモデル化、そしてプラズマ気相および表面反応過程に関するより詳細で基礎的な数多くの原子分子データが今後ますます必要となることはいうまでもない。

3. 粒子モデルによるシミュレーション

粒子モデルを用いたシミュレーションは、荷電粒子(電子, イオン)に対するPIC/MC(Particle-in-Cell / Monte Carlo)法と、中性粒子(ガス分子, ラジカルなど)に対するDSMC(Direct Simulation Monte Carlo)法が知られる[18, 19]。いずれも、実在する各粒子を何個かずつまとめて1個のシミュレーション粒子で代表させ、代表粒子(超粒子, 標本粒子ともよぶ)の位置・速度を運動方程式を用いて時間的に追跡する。ここで、荷電粒子の振る舞いにかかわる電磁場の方程式、および各粒子間の衝突過程(気相の反応過程)をカップルさせて同時に解く。また、プラズマリアクタ内壁や電極、基板表面など固体表面で、各粒子に対する境界条件(表面反応過程)、特に電極が外部電源回路に接続する場合には、荷電粒子について外部回路と整合した境界条件を考慮する必要がある。粒子モデルによるプラズマシミュレーションでは、プラズマ気相での各粒子の速度分布や、基板表面に入射する粒子の速度分布が求まり、プロセスシミュレーションとの整合性がよい。

Fig. 3に平行平板型容量結合高周波プラズマリアクタの概要を示す[6]。シミュレーションでは、接地された円筒形容器(内径25 cm, 高さ4 cm)の一端に高周波電極(直径10 cm)が設置され、電極には、ブロッキングコンデンサ(容量 $C_B = 500$ pF)を介して、高周波電源(電源電圧 $V_s = V_0 \sin(\omega t)$, 周波数 $\omega/2\pi = 13.56$ MHz)が接続される。またArガスは容器内に一様に分布すると仮定して(圧力 P_0 , 温度 $T_0 = 300$ K)ガスの流れは考慮せず、 Ar^+ イオンと電子の荷電粒子に関して電場の存在下でPIC/MC法を用いて解析を行う。計算への入力パラメータは、電源電圧振幅 V_0 とガス圧力 P_0 である(実際のプロセスでは電源パワーを設定するが、シミュレーションでは計算終了後にパワーを算出することになる)。

シミュレーションではほかに次のような仮定を行う。(i)粒子間の衝突過程について、電子-中性粒子間衝突として弾性衝突、励起、電離を、イオン-中性粒子間衝突として弾性衝突と荷電交換を考える。中性粒子の励起・電離では準安定Ar原子の存在も考慮するが、基底状態と比較して密度は数桁小さく、基底Ar原子密度は一定とする。(ii)荷電粒子間のクーロン衝突は、ICPのような高密度プラズマの

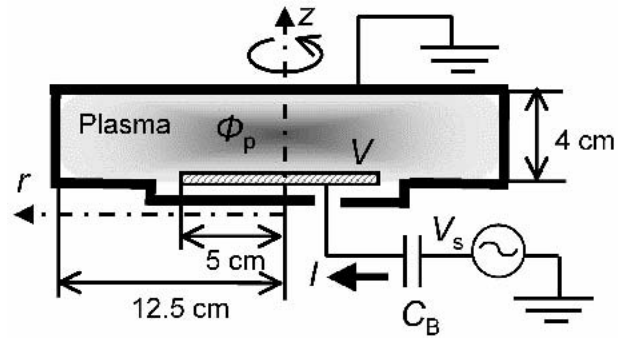


Fig. 3 Schematic of the asymmetric parallel-plate rf plasma reactor used in the present simulation study, where ϕ_p denotes the plasma potential, V and I the voltage and current at the rf-powered electrode, C_B the capacitance of the blocking capacitor, and V_s the voltage at the rf power source. A wafer to be etched is placed on the rf-powered electrode for reactive ion etching (RIE) of substrates.

場合重要になるが、ここではプラズマ密度が 10^9 cm^{-3} 程度であり無視する。(iii)プラズマリアクタ内壁では、壁に入射するイオンと電子は消滅(再結合)する。(iv)電極表面に高いエネルギーで入射するイオンは表面からの二次電子放出を促す。シミュレーションは、気相の電離による電子生成と電極表面での二次電子放出、および壁・電極表面での電子消滅がバランスしてはじめて収束する。また、(v)外部電源回路との整合に関しては、回路方程式とともに、電極表面での電荷保存と表面電荷-電場の関係式を考慮する。

Fig. 4に、 $P_0 = 200$ mTorr, $V_0 = 200$ Vの場合のシミュレーション例を示す。計算の空間格子は $\Delta r = 0.25$ cm, $\Delta z = 0.0625$ cm, 時間ステップは $\Delta t = 1.5 \times 10^{-11}$ s, 粒子数は 1×10^6 個(粒子1個は約 10^5 個の実在粒子を代表), 計算は高周波(rf)数10周期程度で収束し定常解が得られる。Fig. 4(a)に示す高周波電極にかかわる電圧-電流特性では、電極電圧は $V \approx V_{dc} + V_{rf} \sin(\omega t)$ であり非対称電極(高周波電極面積 > 接地電極面積)ゆえ直流自己バイアス電圧が生じる($V_{dc} \approx -150$ V), プラズマ電位も $\phi_p \approx (\phi_p)_{dc} + (\phi_p)_0 \sin(\omega t)$ と時間変動する(図中 ϕ_p at $r = 0, z = 1$ cm; $(\phi_p)_{dc} \approx 30$ V), 電子電流 I_e はプラズマ電位 ϕ_p と電極電位 V との差が最小になる時間あたりで($\omega t/2\pi \approx 0.25$)電極に流入する, イオン電流 I_i は時間的にほぼ一定に電極に流入する(イオン電流密度 ~ 0.08 mA/cm²), 電極の全電流 $I = I_e + I_i + I_d$ に変位電流 I_d が占める割合が大きく電源とプラズマのマッチングが十分でない(プラズマへの入力パワーの時間平均は ~ 5 W, C_B の値に依存), 電極上のシース厚みの時間変動に起因して電流 I, I_d には周期的な時間変動が重畳する, ことなどがわかる。またFig. 4(b)に示すプラズマリアクタ内の電位 ϕ と電子密度 n_e の空間分布(rf 1周期の時間平均)では、高周波電極やリアクタ壁近傍のシース構造がわかる。

Fig. 5に、Fig. 4の条件下で、シースを通過して高周波電極表面($r = 0$)に入射する Ar^+ イオンと電子の入射エネルギーと入射角度の分布(rf 1周期の時間平均)を示す。イオンは表面にほぼ垂直に入射し、入射エネルギーの分布は $E_{i0} \approx |V_{dc}| + (\phi_p)_{dc}$ を中心としてダブルピークを有する。

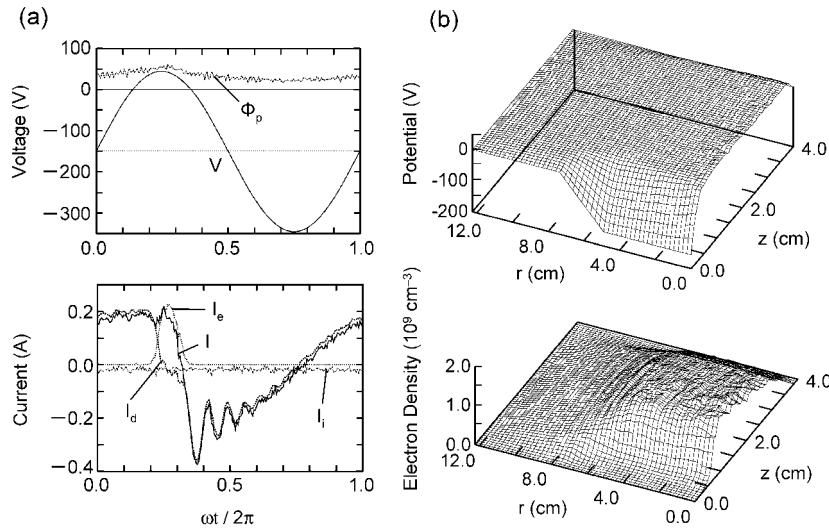


Fig. 4 (a) Potential (voltage V at the rf-powered electrode and plasma potential Φ_p at $r=0, z=1$ cm) and current (total current I at the rf-powered electrode and contributions of the ion I_i , electron I_e , and displacement I_d current) as a function of time in the rf cycle, simulated for asymmetric parallel-plate rf discharges in Ar of Fig. 3 ($P_0 = 200$ mTorr, $V_{rf} = 200$ V at 13.56 MHz). Here, the power averaged over one rf cycle is ~ 5 W. (b) Spatial distribution of the potential Φ and electron density n_e in the plasma reactor averaged over one rf cycle, obtained under the same conditions of (a).

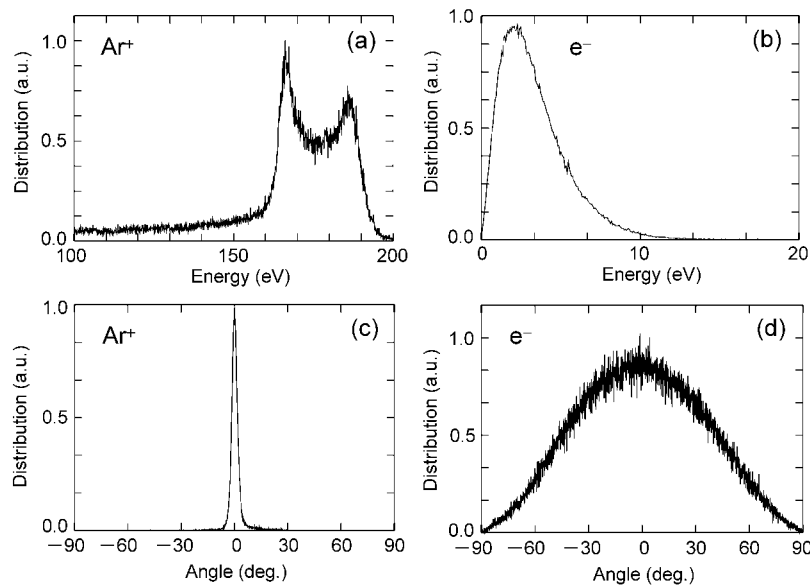


Fig. 5 Energy distribution of (a) ion and (b) electron fluxes incident on the rf-powered electrode, and the corresponding angular distribution of (c) ion and (d) electron fluxes. These are the data at $r=0$ averaged over one rf cycle, obtained under the same conditions of Fig. 4.

一方電子は表面にほとんど等方的に入射し、入射エネルギーの平均は気相での電子エネルギーの平均 $\langle \epsilon_e \rangle \approx 3.4$ eV 程度である。プラズマシミュレーションから得られるこのようなイオンと電子の表面への入射特性に関する結果を用いて、プロセスシミュレーションを行い、基板表面の微細パターンのエッチング加工形状を予測する。

Fig. 6 と Fig. 7 に形状シミュレーションの一例を示す [6]。Ar など不活性ガスを用いるエッチングは、反応ガスを用いる反応性イオンエッチングと比較して、エッチング性能（材料選択性、微細加工性）では劣るが、ガスの取り扱いが簡単であり、スパッタエッチあるいはイオンミリングとよばれ今日も多く用いられる。シミュレーションの観点からは、反応性ガスプラズマと比較して気相・表面での

反応過程に不確かさが少なく、正イオンと電子の振る舞いに起因して発現するプロセス特性、特にパターン表面の局所的な電荷蓄積に起因する現象を概観できる。模擬した微細パターン構造は無限に長い二次元トレンチで、マスクパターンの線幅と溝幅はいずれも $0.5 \mu\text{m}$ 、高さは $0.9 \mu\text{m}$ であり、マスクは絶縁体でエッチング中の変化はないとした。被エッチング材料は、Fig. 6 では絶縁体（例えば SiO_2 ）である。一方 Fig. 7 は、導電性膜（例えば doped poly-Si）のエッチングが終了し下地絶縁膜（ SiO_2 ）が露出して導電膜の各パターンが電氣的に孤立したオーバーエッチング時の状況であり、下地絶縁膜はエッチングされないとして導電膜側壁の形状変化に注目する。エッチング表面反応過程としては、入射イオンによる物理的スパッタリングのみを想定

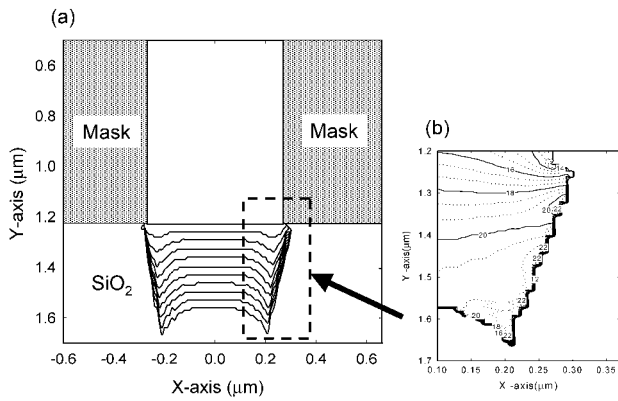


Fig. 6 (a) Feature profile sequences of the trench during etching of insulators (SiO₂) and (b) potential contours in the feature at the time of the end of calculation, simulated taking into account the effects of surface charging of masks and substrates (SiO₂). In (b), the potential is relative to that at the artificial lower sheath boundary, taken to be 3.6 μm above the top surfaces of the etching mask. The following conditions were assumed in the calculation: Ar plasma density of 10¹² cm⁻³, electron temperature of 5 eV, ion temperature of 0.5 eV, rf bias voltage of V_{rf} = 30 V (half of the peak-to-peak) and V_{dc} = -40 V (dc self-bias) at 13.56 MHz.

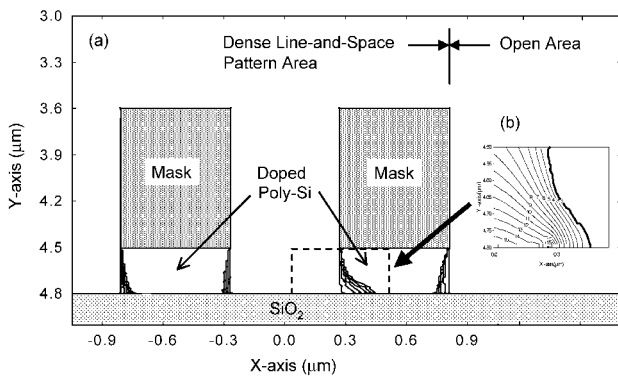


Fig. 7 (a) Feature profile sequences of the trench during overetch for conductive films (poly-Si) and (b) potential contours in the feature at the time of the end of calculation, simulated taking into account the effects of surface charging of masks and underlayers (SiO₂). The conditions for calculation were the same as in Fig. 6.

し、スパッタリング収率のイオン入射エネルギーと入射角度に対する依存性を考慮する。なお、パターン側壁でのイオンの低角度反射、絶縁体表面での電荷の移動、およびスパッタリング生成物のパターン表面への再付着の効果は考えていない。

形状シミュレーションでは、まず、基板表面の少し上方を境界としてイオンと電子を入射させ、微細パターン構造内でのイオン・電子の挙動と電位分布をPIC法により解析する。計算の空間格子は $\Delta x = \Delta y = 0.01 \mu\text{m}$ 、時間ステップは $\Delta t = 2 \times 10^{-11} \text{s}$ 、粒子入射境界はマスク上端から $3.6 \mu\text{m}$ 上方、入射粒子数は 1×10^3 個、計算は数 $10 \mu\text{s}$ 程度で収束し定常解が得られる。収束後、パターン内表面（側壁と底面）へのイオンの入射フラックスとそのエネルギー・角度分布をもとに、表面反応速度式を計算し、さらにセル・リ

ムーバル (cell removal) 法 [26] を用いて表面形状の進展を解析する。そして新しいパターン表面形状で再び PIC 法による解析を行い、作業を繰り返して、微細パターンのエッチング加工形状が求まる。Fig. 6 ではトレンチング、Fig. 7 ではノッチングとよばれるエッチングの形状異常が再現されている。いずれも、半導体プロセスにおける微細パターンのプラズマエッチングに際してしばしば直面する現象であり、一般に、基板表面へのイオン入射エネルギーを増大するプロセス条件で対応 (解決) する。トレンチングは、側壁に隣接するパターン底面に発生する局所的な溝である。一方ノッチングは、パターン側壁に形成される横方向に深い局所的な溝であり、ライン・アンド・スペース (L&S) パターンの最も外側のラインの内側側壁で、露出した下地絶縁膜との境界あたりに顕著に発生する。両者とも、イオンと電子の基板表面へはパターン内への入射角度分布の差異に起因してパターン内表面に局所的な電荷蓄積が生じ、パターン構造内の電界についてはイオン軌道が曲がり、パターン側壁や底面に局所的なイオン入射が生じることにより発現する。発現機構の詳細については著者の以前の解説に譲る [23]。

なお、この形状シミュレーション (Figs. 6, 7) は、それまでのプラズマシミュレーション (Figs. 3-5) と完全に一貫していないことを断っておく。Fig. 6 と Fig. 7 は、プラズマ密度が高く ($\sim 10^{12} \text{cm}^{-3}$)、イオンと電子の基板表面への入射フラックスが 2 桁程度大きく ($\sim 10 \text{mA/cm}^2$)、イオンの入射エネルギーが低い ($\sim 50 \text{eV}$) 状況の下、電荷蓄積の影響を顕著にしたものである。ICP や ECR (電子サイクロトロン共鳴) プラズマなどいわゆる高密度プラズマを用いたプロセスに相当する。高密度プラズマの場合、プラズマ励起とは別に高周波電源を基板ステージに接続して、高周波バイアスによる基板表面へのイオン入射エネルギーの独立制御を可能にしておき、低いイオン入射エネルギーのプロセスも可能である。このような高密度プラズマについて、粒子シミュレーションによる解析も多く行われているが [17-19]、プラズマ密度が高い場合、デバイ長についてはシース長が短いため、計算の空間格子を細かくとる必要があり、プラズマリアクタ内全体を粒子シミュレーションで解析するには現在の計算機性能ではまだ不十分である。プラズマと固体表面との間に適当なシースモデルを適用して実用に供しているのが現状であり、高密度プラズマプロセスに対応する一貫した粒子シミュレーションの発展が待たれる。

4. 流体モデルによるシミュレーション

流体モデルは、荷電粒子と中性粒子それぞれに関するボルツマン方程式のモーメント方程式である連続の式、運動量保存式、エネルギー保存式と、電磁場に関するマクスウェル方程式をもとに、連続体として放電プラズマ構造とガス流れを解析する手法である [16, 17]。ここで、各粒子間の衝突過程 (気相の反応過程) は、それぞれの保存式における輸送係数、および粒子の数密度、運動量、エネルギーの生成・消滅項として組み込まれる。また、プラズマリア

クタ内壁や電極、基板表面など固体表面で、各粒子に対する境界条件（境界での流入・流出フラックスと表面反応過程）を考慮する必要がある。なお電子の速度分布は、電子-中性粒子間衝突（弾性衝突、励起、解離、電離）の影響を受けて熱平衡分布（マクスウェル分布）からずれていることが一般的である。したがって、流体モデルを用いたプラズマシミュレーションでは、電子の速度分布（エネルギー分布）をボルツマン方程式やPIC/MC法を用いて解析するなど、ハイブリッドモデルを用いることも多い[27-29]。

Fig. 8に平面コイル型誘導結合高周波プラズマリアクタの概要を示す[7]。シミュレーションでは、接地された円筒形容器（内径30 cm、高さ9 cm）の一端にある誘電体窓上に平面コイル（5ターン）が設置され、プラズマ励起用の高周波電源（周波数13.56 MHz）に接続される。もう一端には基板ステージ（直径20 cm）が設置され、ブロッキングコンデンサを介して基板バイアス用の高周波電源が接続される。またCl₂ガスは誘電体窓直下の環状の入り口から容器内に流入し、基板ステージ周囲の環状の引き口から排気される。さらに電子の速度分布はマクスウェル分布と仮定し流体方程式を用いて解析を行う。計算への入力パラメータは、ガス圧力P₀、ガス流量F₀、プラズマへの入力パワーP_w、および基板ステージへの直流バイアス電圧V_{dc}である（基板ステージへの高周波バイアス自体に関する解析はしていない）。

シミュレーションではほかに次のような仮定を行う。(i)荷電粒子の運動は両極性拡散に、また中性粒子の運動も拡散に従う（いずれも運動量保存式は直接解かず、拡散方程式により解析する[30]）。このような簡単化されたモデルは、ドリフト拡散モデル、拡散モデルと呼ぶこともあり、

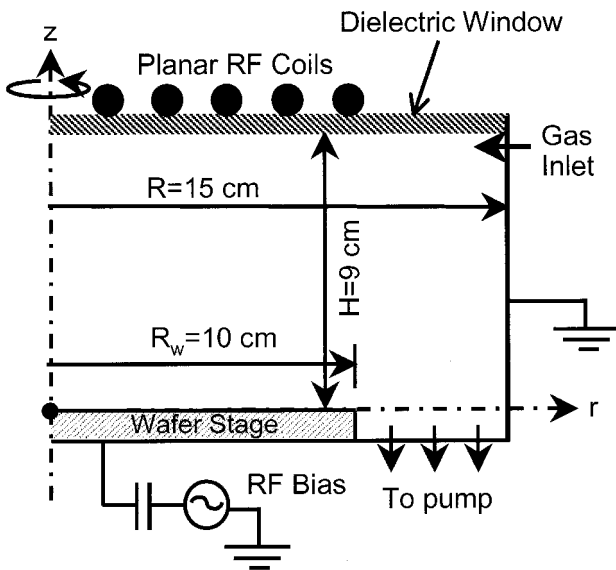


Fig. 8 Schematic of the inductively coupled plasma (ICP) reactor used in the present simulation study, where a five-turn planar rf coil is located on a dielectric window at the top for generation of ICPs, and an rf-biased wafer stage is located at the bottom for processing of substrates.

プロセスプラズマのプラズマシミュレーションにおいて、多くの反応粒子種とそれらの間の反応過程を考慮する場合、計算機の容量（速度）の観点からしばしば用いられる（もちろん、反応粒子種が少ない場合には、各粒子の運動量保存式をフルに解く場合も多い）。さらに、(ii)基板ステージにはSiウエハが設置され、Cl₂プラズマによるエッチングが進行するため、反応ガスにかかわる反応粒子Cl₂、Cl、Cl₂⁺、Cl⁺、Cl⁻に加え、反応生成物SiCl_x（x = 1 ~ 4）、SiCl_x⁺（x = 1 ~ 3）も存在する。(iii)粒子間の衝突過程では、電子-中性粒子間衝突、イオン-中性粒子間衝突に加え、イオン-イオン間衝突も考える。(iv)プラズマと接触したリアクタ内壁や基板表面など固体表面に対して、正イオンはボーム速度で、電子と中性粒子は熱速度で流入するが、負イオンはプラズマ電位により遮られる。(v)プラズマ気相でのイオンと中性粒子の温度は一定とする（T_i = 0.1 eV、T₀ = 300 K）。(vi)プラズマリアクタ内壁に流入する粒子について、Cl原子は壁で再結合してCl₂分子として気相に戻るが、ほかの粒子は壁で消滅する（再結合、付着）。また、(vii)基板の被エッチング表面は、反応層、保護膜堆積層、および清浄表面から構成されると考え、表面反応として、イオンアシストエッチング、化学エッチング、物理的スパッタリング、および保護膜堆積を考慮する。エッチング表面反応過程の詳細については著者の以前の解説等に譲る[9 11 23 24, 31]。

Fig. 9に、P₀ = 10 mTorr、F₀ = 200 sccm、P_w = 250 W、|V_{dc}| = 100 Vの場合のシミュレーション例を示す。計算の空間格子はΔr = 0.1 cm、Δz = 0.1 cmとし、電磁場、荷電粒子、中性粒子、気相反応、および表面反応に関する方程式を異なるモジュールに分け、完全陰的解法を用いて逐次解き進め定常解を求める。Fig. 9(a)では容器内のCl⁺イオンとSiCl₂分子の空間分布が、またFig. 9(b)ではCl⁺、Cl₂⁺イオン、

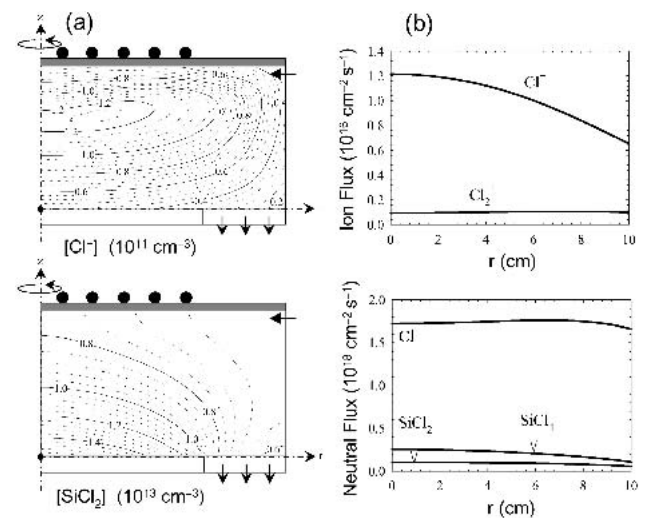


Fig. 9 (a) Spatial distribution of the concentration of Cl⁺ ions and SiCl₂ neutrals during Si etching in ICP Cl₂ plasmas (P₀ = 10 mTorr, F₀ = 200 sccm, P_w = 250 W, |V_{dc}| = 100 V). (b) Distribution of the ion (Cl₂⁺, Cl⁺) and neutral (Cl, SiCl₂, SiCl₄) fluxes incident on the substrate surfaces, obtained under the same conditions of (a).

Cl原子, および SiCl_2 , SiCl_4 分子の基板表面への流入フラックスの面内分布がわかる. プラズマシミュレーションから得られるこのようなイオンと中性粒子の表面への入射特性

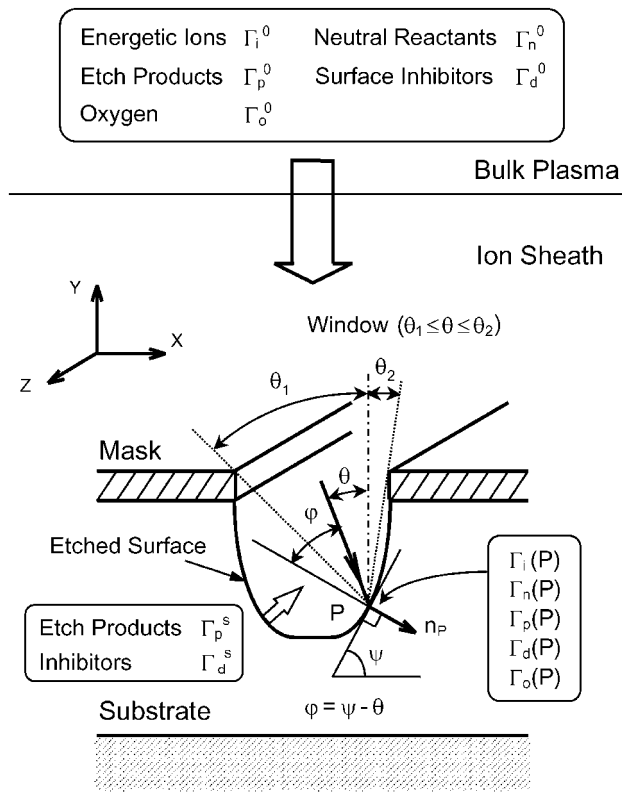


Fig. 10 Schematic of the geometry and situation for an infinitely long trench being etched, together with the coordinate system used in the simulation.

に関する結果を用いてプロセスシミュレーションを行い, 基板表面の微細パターンのエッチング加工形状を予測する.

形状シミュレーションにおいて模擬した微細パターン構造は, Fig. 10 に示すような無限に長い二次元トレンチで, マスクパターンの溝幅は $0.1 \mu\text{m}$, 高さは $0.2 \mu\text{m}$ であり, エッチング中の変化はないとした. エッチング中の基板表面 (Si) には, プラズマ気相からイオン (Cl_2^+ , Cl^+), 中性の反応活性種 (Cl_2 , Cl), 反応生成物 (SiCl_4 のような飽和種), 反応抑制種 (I) / 堆積種 (SiCl_2 などの不飽和種), および反応抑制種 (II) / 反応種 (酸素など) が流入し (フラックスはそれぞれ $\Gamma_i^0, \Gamma_n^0, \Gamma_p^0, \Gamma_d^0, \Gamma_o^0$), パターン内を輸送されて被エッチング表面の点 P に到達する. さらにパターン内の表面からは新たに反応生成物や反応抑制種 (I) / 堆積種が脱離し (Γ_{ps}, Γ_{ds}), 点 P に到達する. なお, パターン内表面の電荷蓄積によるイオン軌道の曲がりや, パターン側壁でのイオンの反射は考えていないが, パターン内表面での中性粒子の反射 (再放出) は考慮する. このような微細パターン内での粒子輸送と, パターン内表面への粒子の入射フラックス, ならびに表面反応速度を解析する手法については著者の以前の解説に譲る [10, 24].

Fig. 11 と Fig. 12 に形状シミュレーションの一例を示す. このシミュレーションでは, 微細パターン構造の内部・表面・基板内をすべて細かくセル ($\Delta x = \Delta y = 0.001 \mu\text{m} = 1 \text{nm}$) に分割したフルマトリクス方式で, 粒子輸送は速度分布関数で取り扱い, 表面過程, および界面の移動を計算している. 詳細は著者らの論文に譲る [8]. この手法により, 表面の多層の反応層や保護膜堆積層の挙動を扱うことができ, 反応層や堆積層を通過してのイオンの侵入, 中性

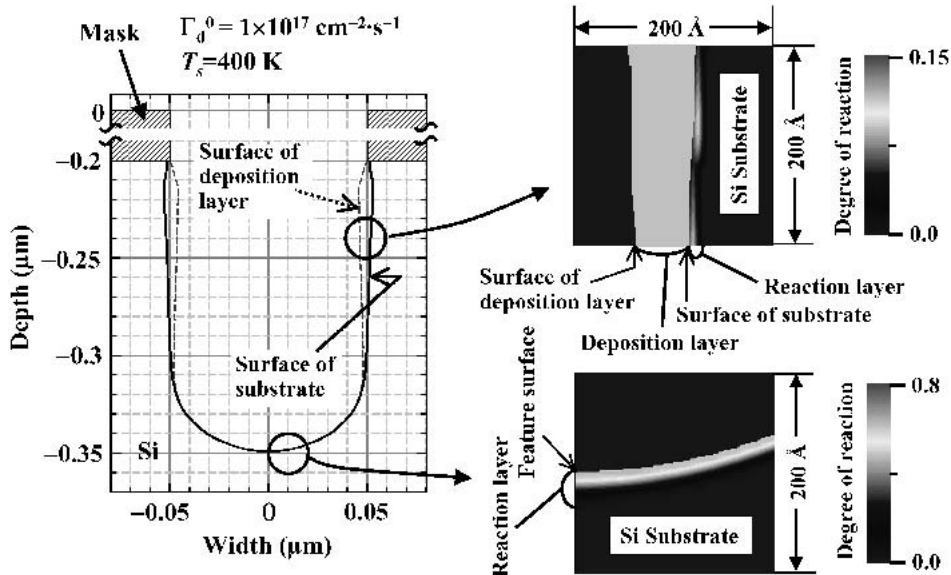


Fig. 11 Etched feature profile of the trench and enlarged view of the surface reaction layers, simulated based on the plasma simulation of Fig. 9. Here, the model employs a full matrix approach with the volume density function ϕ ($0 \leq \phi \leq 1$) in the entire computational domain for the materials concerned during etching. The infinitesimal volume of surfaces during etching was taken to consist of bare substrate (ϕ_s), reaction layers (ϕ_r), and inhibitor deposition layers (ϕ_d); the degree of reaction was given by $\theta_r = \phi_r / (\phi_s + \phi_r + \phi_d)$. The following conditions were assumed in the calculation for incident characteristics of ions and neutrals on substrate surfaces: ion energy $E_i = 100 \text{ eV}$, ion flux $\Gamma_i^0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, neutral reactant flux $\Gamma_n^0 = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, surface inhibitor flux $\Gamma_d^0 = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, surface temperature $T_s = 400 \text{ K}$ (the incoming fluxes of product species and oxygen were taken to be $\Gamma_p^0 = \Gamma_o^0 = 0$).

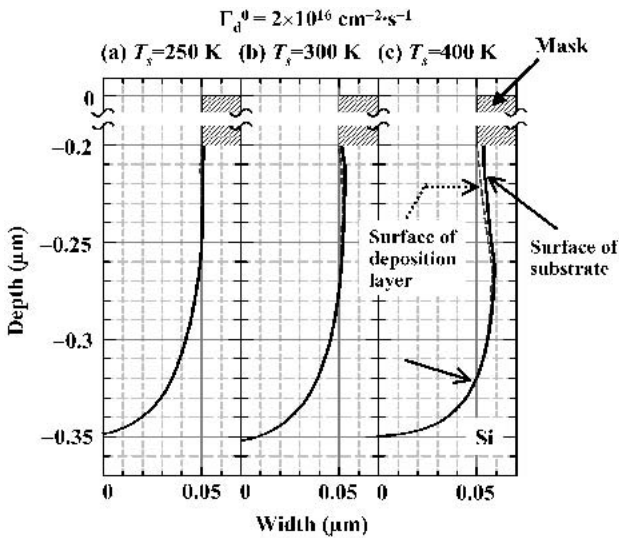


Fig. 12 Etched feature profiles of the trench simulated for different surface temperatures: (a) $T_s = 250$ K, (b) $T_s = 300$ K, (c) $T_s = 400$ K. The following conditions were assumed in the calculation for incident characteristics of ions and neutrals on substrate surfaces: ion energy $E_i = 100$ eV, ion flux $\Gamma_i^0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, neutral reactant flux $\Gamma_n^0 = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, surface inhibitor flux $\Gamma_d^0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ($\Gamma_p^0 = \Gamma_o^0 = 0$ as in Fig. 11).

の反応活性種や反応生成物の拡散，基板温度などの効果も取り扱うことができる．これらの効果の導入により，実際のプロセスで生じていると考えられる表面過程の影響をより詳細にシミュレーションの中に組み込むことができ，古典的／現象論的ではあるが nm スケールの表面・界面のダイナミクスとエッチング形状の進展を表現できる．

基板表面へのイオンの入射エネルギー $E_i = 100$ eV ($=|V_{dc}|$)，入射フラックス $\Gamma_i^0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ，中性反応種の入射フラックス $\Gamma_n^0 = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ の条件において，Fig. 11 では，反応生成物やスパッタ生成物の堆積種による保護膜堆積，ならびに保護膜堆積とスパッタリングによる堆積膜除去の競合が，異方性の高いエッチング形状を実現し加工寸法精度を向上させることがわかる（堆積種の入射フラックス $\Gamma_d^0 = 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ，基板表面温度 $T_s = 400$ K，なおここでは $\Gamma_p^0 = \Gamma_o^0 = 0$ ）．さらに Fig. 12 では，基板表面温度に依存する化学エッチングの反応速度，ならびに中性反応種や反応生成物の吸着・堆積係数が，加工形状と寸法精度に大きく影響を与え，基板表面温度の低下が高異方性エッチングに効果があることがわかる ($\Gamma_d^0 = 1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ， $T_s = 250 \sim 400$ K， $\Gamma_p^0 = \Gamma_o^0 = 0$)．このように精緻な形状シミュレーションは，nm スケールの加工形状・寸法精度の制御が求められる今後の高精度エッチングプロセス開発への対応が期待される．

5. おわりに

半導体プラズマプロセスシミュレーションの構成について述べ，平行平板型容量結合高周波プラズマと平面コイル型誘導結合高周波プラズマ，およびエッチング加工形状に関する著者等の研究を，シミュレーションに基づく物理モデル（現象モデル）の本質と限界，および半導体プラズマ

プロセスの TCAD に向けての今後の課題に重点を置いて紹介した．シミュレーションのゴールは，プラズマ（装置）シミュレーションとプロセスシミュレーションを統合した形態である．シミュレータに装置パラメータを入力すると，種々のプロセス特性が出力として得られ，装置パラメータを変化させてプロセス機能が予測でき，実際のプロセスと比較して現象を支配する装置パラメータ・プラズマパラメータや粒子輸送・反応過程が解析できる段階になると，半導体プラズマプロセス開発（プロセス設計）に供しうる実用的な TCAD に至る．現状まだその段階にはないが，今後のさらなる半導体デバイスの高性能化と微細化に対応したプラズマプロセス技術の進展において，実験と相補的なシミュレーションの必要性・重要性はますます高まり，シミュレーション技術の一層の発展が期待される．

なお，プラズマプロセスにより作製された薄膜の電気的・機械的特性 [32] や，プラズマによる薄膜特性の変化（ダメージ） [33]などを予測するプロセスシミュレーションは，形状シミュレーションと比較してまだ初歩的段階にあり，今後の研究が待たれる．また，形状シミュレーションについて今日，界面や境界の移動／進展を取り扱う種々の数学的手法が研究開発されてきているが [26]，微細パターン構造内の粒子輸送と表面過程に関して，3章で紹介した荷電粒子の輸送と表面の電荷蓄積に着目したシミュレーションと，4章で紹介した中性の反応活性種の輸送と表面の反応過程に着目したシミュレーションとの融合などもまだこれからである．

半導体プラズマプロセスシミュレーション技術の発展には，より高度で高速な計算機とともにシミュレーション手法の研究開発が必要なのはいうまでもない．しかし，それと同等あるいはそれ以上に重要なファクタは，実際のプロセスが行われているプラズマリアクタにおけるプラズマの物理的・化学的状态とプラズマ・表面相互作用に関するより詳細で高度な理解とモデル化，そしてプラズマ気相および表面反応過程に関するより詳細で基礎的な数多くの原子分子データの蓄積であると考えられる．パーチャルプロセスともいえるシミュレーションと実際の半導体プロセスとの不断の比較により，シミュレーションに基づく物理モデル（現象モデル）をブラッシュアップしていくことが，実用のみならず基礎的研究の観点からも重要かつ有効であろう．

謝辞

本稿中における著者等の研究の一部は，日本学術振興会からの科学研究費補助金の援助を受けて行われた．

参考文献

- [1] *ULSI Technology*, edited by C.Y. Chang and S.M. Sze (McGraw-Hill, New York, 1996).
- [2] J.D. Plummer, M.D. Deal and P.B. Griffin, *Silicon VLSI Technology: Fundamentals, Practice and Modeling* (Prentice Hall, New Jersey, 2000).
- [3] M. Elwenspoek and H.V. Jansen, *Silicon Micromachining* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1998).

- [4] M.J. Mandou, *Fundamentals of Microfabrication: The Science of Miniaturization, 2nd ed.* (CRC Press, New York, 2002).
- [5] 廣瀬全孝 : 応用物理 71, 1091 (2002).
- [6] Y. Osano, T. Nomura, K. Miki and K. Ono, *Proc. 16th Int. Symp. Plasma Chemistry, ISPC-16* (IUPAC, Taormina, Italy, 2003) Paper Po3.46; *Thin Solid Films* (submitted).
- [7] I. Fujikake, K. Ono, K. Takahashi and Y. Setsuhara, *Proc. 16th Int. Symp. Plasma Chemistry, ISPC-16* (IUPAC, Taormina, Italy, 2003) Paper Po6.33.
- [8] A. Sano, K. Ono, K. Takahashi and Y. Setsuhara, *Proc. 24th Symp. Dry Process, DPS-24* (IEEJ, Tokyo, 2002) p.177.
- [9] K. Ono, *J. Plasma Fusion Res.* 75, 350 (1999) in Japanese.
- [10] 斧 高一 : 応用物理 68, 513 (1999).
- [11] 斧 高一 : 表面技術 51, 785 (2000).
- [12] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, *Plasma Simulation via Computer Simulation* (Adam Hilger, Bristol, 1991).
- [13] M.A. Lieberman and A.J. Lichtenberg, *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing* (Wiley, New York, 1994).
- [14] W.N.G. Hitchon, *Plasma Processes for Semiconductor Fabrication* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).
- [15] *Handbook of Advanced Plasma Processing Techniques*, edited by R.J. Shul and S.J. Pearton (Springer, Berlin, 2000).
- [16] 真壁利明 : 応用物理 64, 547 (1995).
- [17] T. Makabe, *J. Plasma Fusion Res.* 77, 1009 (2001) in Japanese.
- [18] 南部健一 : 応用物理 68, 503 (1999).
- [19] K. Nanbu, *J. Plasma Fusion Res.* 77, 1137 (2001) in Japanese.
- [20] 浜口智志 : 応用物理 70, 1099 (2001).
- [21] S. Hamaguchi, *J. Plasma Fusion Res.* 77, 1221 (2001) in Japanese.
- [22] S. Hamaguchi *et al.*, *J. Plasma Fusion Res.* 80, 110 (2004) in Japanese.
- [23] 斧 高一 : 半導体大事典, 菅野卓雄・川西剛監修 (工業調査会, 東京, 1999) p.362.
- [24] 斧 高一 : 次世代 ULSI プロセス技術, 広瀬全孝編 (リアライズ社, 東京, 2000) p.436.
- [25] 斧 高一 : 新改訂・表面科学の基礎と応用, 日本表面科学会編 (エヌ・ティー・エス社, 東京, 2004) p.958.
- [26] J.A. Sethian, *Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision, and Materials Science*, 2nd ed. (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1999).
- [27] R.J. Hoekstra, M.J. Grapperhaus and M.J. Kushner, *J. Vac. Sci. Technol. A* 15, 1913 (1997).
- [28] A.V. Vasenkov and M.J. Kushner, *Phys. Rev. E* 66, 066411 (2002).
- [29] A.V. Vasenkov and M.J. Kushner, *J. Appl. Phys.* 94, 2223 (2003).
- [30] H. Kousaka and K. Ono, *Plasma Sources Sci. Technol.* 12, 273 (2003).
- [31] E. Gogolides, P. Vauvert, G. Kokkoris, G. Turban and A. G. Boudouvis, *J. Appl. Phys.* 88, 5570 (2000).
- [32] *Computer Simulation in Materials Science: Nano/Meso/Macroscopic Space & Time Scales*, edited by H.O. Kirchner, L. P. Kubin and V. Pontikis (Kluwer Academic, Boston, 1995).
- [33] K.P. Cheung, *Plasma Charging Damage* (Springer, Berlin, 2001).



あおの こういち
斧 高一

1978年京都大学大学院工学研究科航空工学専攻博士課程修了。1982年三菱電機株式会社入社。同社中央研究所, 半導体基礎研究所, 先端技術総合研究所において, 主に半導体プロセス・デバイスに関する研究開発に従事。1998年10月より京都大学大学院工学研究科航空宇宙工学専攻教授。現在, プラズマ・反応性気体理工学, マイクロ・ナノ工学, 宇宙工学に関する研究とともに, それらの融合領域の研究に従事。