

講座

プラズマエッチングのシミュレーション

## 2. 緩和連続モデルによる 酸化膜エッチング用プラズマのシミュレーション

真 權 利 明  
(慶應義塾大学理工学部)

Capacitively Coupled Plasma Simulation for Oxide Etching  
by Using Relaxation Continuum Model

MAKABE Toshiaki

*Department of Electronics and Electrical Engineering, Faculty of Science and Technology,  
Keio University, Yokohama 223-8522, Japan*

(Received 24 August 2001)

### Abstract

Plasma for oxide etching is usually provided in a two-frequency capacitively coupled plasma (2f-CCP) in mixtures of  $C_2F_4$  molecules and Ar. The plasma is produced by very high frequency (VHF), and ions are accelerated to the wafer by a low frequency (LF) voltage source under a collision-dominated region. The continuum (fluid) model will be appropriate for the purpose of simulating the plasma structure and the surface interaction within a reasonable computational time. In this article, we describe the governing equation system and an example regarding of a low temperature plasma for etching in 2f-CCP, by using the relaxation continuum model.

### Keywords:

oxide ( $SiO_2$ ) etching, plasma simulation relaxation continuum model, time development analysis, Boltzmann equation, energy relaxation, momentum relaxation, surface continuity equation, pulsed two-frequency CCP capacitively coupled plasma

### 2.1 まえがき

集積回路の微細加工のツールとなる低温プラズマとそのプロセスを対象としたモデリングは、80年代初めに産声を上げた。ドライエッチングは大変複雑な工学技術である。プラズマの構造やプラズマが接する基板表面で繰り広げられる複雑な反応から生まれるプロセス機能をすべて診断(実験)から求めることは難しい。さりとて、純粹に解析的な理論手法で歯が立つような課題でもない。ここに、気相における原子(分子)衝突素過程と固体表面での反応素過程をもとに行う計算科学の立場に立った

author's e-mail: makabe@mkbe.elec.keio.ac.jp

コンピュータシミュレーションが総合力としての役割を演ずる機会が生まれてきた。

モデリングには、まず、エッチングリアクタの幾何形状、原料ガスやその解離種のマイクロな衝突素過程とマクロな圧力、流量や印加電圧(電流)波形などを用意し設定する。次に、リアクタ内で生成される電子、正負イオンと原料ガスや解離分子が繰り広げる衝突・反応・輸送現象を記述する支配方程式を閉じた形で構成する。支配方程式系を先の外部条件のもとで数値解析し、プラズマリアクタ内に生成されるプラズマの時空間構造をパー

チャル化し、その構造を介して得られる基板表面のエッチングの機能を予測することである。したがって、モデリングは原子分子・表面のデータベースや各要素をもとにプラズマエッチングを予測しデザインする方向のシンセシス (synthesis) な営みである。これは計測を通してプロセスの診断・分析評価に進むアナリシス (analysis) と比べ、その手法と方向を異にする。

計算科学は対象とする自然 (実像) をモデル化して模写 (シミュレーション) することであり、モデル化の手法やシミュレーション方法はいろいろある。プラズマエッチングのモデルも例外ではなく、種々の連続体 (流体) モデル (Continuum (Fluid) Model) と粒子モデル (Particle Model) が提案されている [1]。ここでは、 $\text{SiO}_2$  のエッチングを対象に、プラズマと表面極微細構造を持ったエッチング表面での物理的・電気的現象をシミュレーションし予測する基本的な方法のうち、緩和連続モデルによるシミュレーション手法を簡単に記述しよう。慣用的なプラズマリアクタは、CF系ガスを Ar で希釈した原料ガスを 10 mTorr - 100 mTorr、数 10 sccm 流した空間にある平行平板の一方の電極にコンデンサを介して超高周波 (27 MHz, 60 MHz など) 電源を、また加工するウェハを載せた対向電極に同様に低周波 (<1 MHz) 電源を印加した平行平板形の容量結合プラズマリアクタを基本とする (Fig. 1 参照) [2]。ここで記述する低温プラズマエッチングは、現在盛んに発展している領域であることを踏まえて、単にモデル化やモデリングシミュレーシ

ンの手法を記述するのみでなく、初心者のために随所に解説事項を織り込んでいる。しばしば、くどく感ぜられる点、ご容赦いただきたい。

## 2.2 連続体 (流体) モデルとは

原料ガス中、自由空間内での電子の自由行程 ( $\lambda_{e0}$ ) がプラズマリアクタの寸法 ( $L$ ) に比べて十分に小さい ( $\lambda_{e0} < L$ ) 場合、電子は電界や磁界の印加された原料ガスのなかで電子流体 (連続体) として同様の輸送を示す。超高周波 (Very High Frequency: VHF) や極超高周波 (Ultra High Frequency: UHF)、あるいは、数 100 G の磁場が印加された原料ガス中では、電子の空間トラップが生じるために、リアクタ内に ( $\lambda_{e0} > L$ ) の関係があっても、電子流体として取り扱い可能な領域が生まれる。連続体モデルの適用範囲は外部条件により複雑に変化する。

連続体 (流体) モデルは、荷電粒子それぞれに関するボルツマン方程式 (Boltzmann eq.) の速度モーメントから得られる輸送方程式、すなわち、粒子数密度連続式、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 (Maxwell's eqs.) をもとに、連続体 (流体) としての放電プラズマ構造を求める手法である (Fig. 2 参照) [3]。プラズマの生成とともに、原料ガスの枯渇現象や、解離ラジカル密度の上昇などが起これば、これらの中性分子それぞれの数密度連続の式が上記システムに組み込まれる。

プラズマエッチングで使用される非平衡低温プラズマは、普通  $n_p \leq 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ 、5 mTorr  $< p < 100$  mTorr の条件で維持され、電子-分子間の近距離衝突レートが電子-電子 (イオン) 間の遠距離衝突レートより桁違いに大きい領域で生成されている。したがって、電子のエネルギーは近距離衝突の影響を受けて、原料ガスとその解離原子・分子の属性を直接反映することから複雑で、マクスウェル分布  $f_{M1}(\epsilon)$  からずれたエネルギー分布  $f(\epsilon)$  をもつのが普通である。電子励起のしきい値  $\epsilon_{th}$  (10 eV - 20 eV) を超えたエネルギー領域で  $f(\epsilon) > f_{M1}(\epsilon)$  となることが知られている。高周波 (RF) プラズマはリアクタ内でイオンが優勢なシース (sheath) と正負の荷電粒子密度がほぼ等しく準中性のバルクプラズマ (bulk plasma) の二領域からなる構造をもち、シースやバルクプラズマは同期定常をもって時間変調されている。

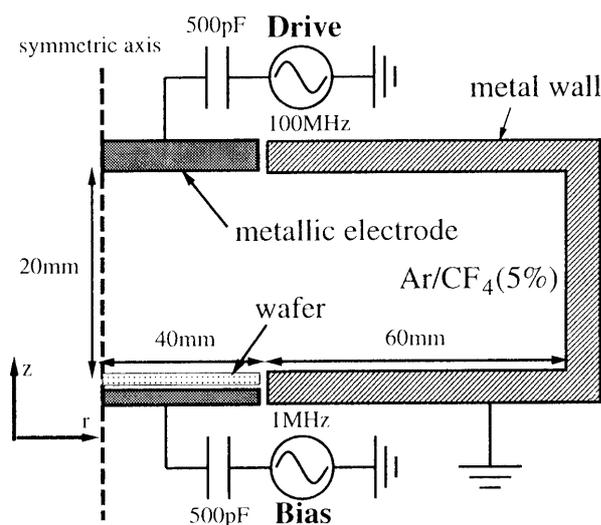


Fig. 1 Basic arrangement of a two frequency capacitively coupled plasma (2f-CCP) reactor.

## 2.3 高周波プラズマと電子の運動量・エネルギー緩和

プラズマの取り扱いはその空間電位  $V$  をもとに行われ

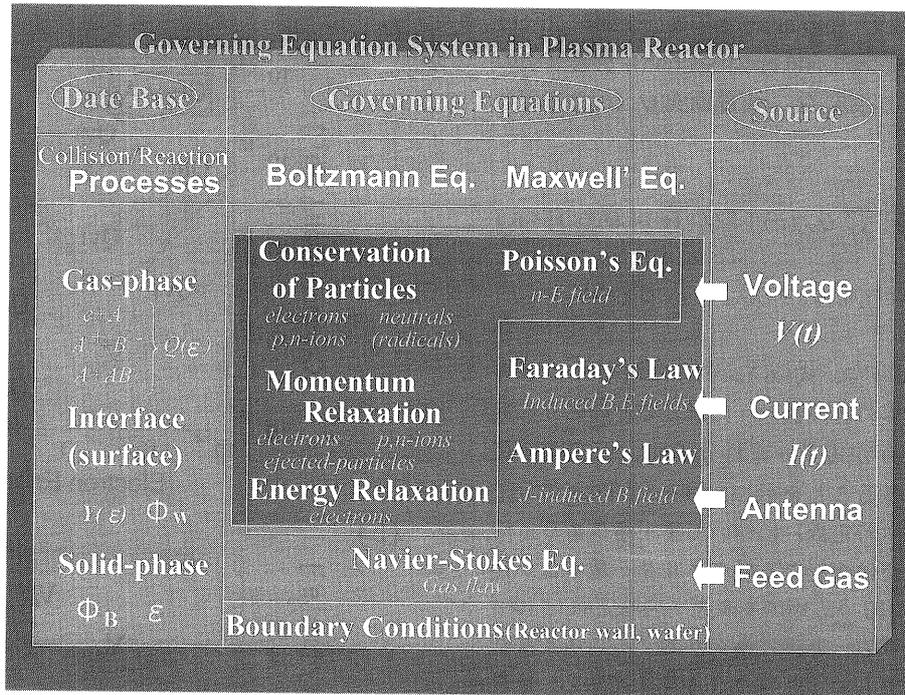


Fig. 2 Governing equations for modeling of capacitively, inductively, and antenna coupled plasmas.

るのが一般的である。しかし、プラズマソースの形状や外部条件からエッチングの機能を予測するためには、電子とイオン対を生成する電子のネット衝突電離レートの時空間像の把握が欠かせない。電子は外部電界  $E$  からエネルギーを得るわけだから空間電位の傾き（電界）が独立変数として必要となる。電子は「電界下の運動」と「分子との衝突」を繰り返す。相次ぐ衝突間に電子が得るエネルギーは自由行程 ( $\lambda_e$ ) を用いて、定性的に  $eE\lambda_e$  と書ける。したがって、電界  $E$  と原料ガスの数密度  $N$  の逆数の積、換算電界 (reduced field)  $E/N$  が電子やイオン集団の輸送を記述するパラメータとして広く使われている。低温プラズマは普通、電子（あるいはイオン）と中性分子の近距離衝突に支配されるから、電子(イオン)はプラズマ中で  $E/N$  をパラメータとして原料ガスに固有な輸送特性を示すことになる。

さて、電子やイオンはプラズマ中でその運動量とエネルギーを近距離衝突（ネット衝突レート： $\Lambda_T$ ）を介して電界とバランスさせているために、プラズマが（超）高周波電源（周波数： $\omega$ ）で生成・維持される最近のドライエッチャーでは、

$$\omega \geq \Lambda_T \quad (1)$$

の領域が出現し、電子やイオンが瞬時局所の換算電界値  $E(r,t)/N$  から有限の遅れをもって輸送される。この衝

突緩和（collision relaxation）現象を電子（質量  $m$ ，電荷  $e$ ）の運動量とエネルギーについて簡単に説明しよう。高周波電界

$$E(t) = E_0 \cos \omega t \quad (2)$$

が印加された原料ガス中（質量  $M$ ，数密度  $N$ ）の輸送はボルツマン方程式の2項近似理論（two-terms approximation）から扱える[1]。電子の速度分布は

$$g(v, t) = g_0(v, t) + \cos \theta g_1(v, t) \quad (3)$$

と書ける。 $g_0(v, t)$ 、 $g_1(v, t)$  はそれぞれ速度分布の等方成分 (isotropic part) と指向性成分 (anisotropic part) で、 $\theta$  は電子の速度 ( $v$ ) と電界 ( $E$ ) の逆向きがなす角である。速度分布の等方、指向性両成分はボルツマン方程式から、特に、時間依存性に着目して

$$\frac{\partial}{\partial t} g_0(v, t) + \xi [E_0, \omega, g_1(v, t)] = -\frac{1}{\tau_e(v)} g_0(v, t) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} g_1(v, t) + \xi [E_0, \omega, g_0(v, t)] = -\frac{1}{\tau_m(v)} g_1(v, t) \quad (5)$$

と緩和方程式の形に書くことができる[1, 4, 5]。ここで、エネルギーの緩和時間 (energy relaxation time)  $\tau_e(v)$

と運動量の緩和時間 (momentum relaxation time)  $\tau_m(v)$  は衝突断面積 (collision cross section) (弾性衝突の運動量移行  $Q_m$ , 励起衝突  $Q_{ex}$ , 電離衝突  $Q_i$  など) を用いて, それぞれ,

$$[\tau_\epsilon(v)]^{-1} \sim Nv \left[ \frac{2m}{M} Q_m(v) + \Sigma Q_{ex}(v) + Q_i(v) \right] \quad (6)$$

$$[\tau_m(v)]^{-1} = Nv [Q_m(v) + \Sigma Q_{ex}(v) + Q_i(v)] \quad (7)$$

と書ける. したがって, 式(6), (7)は電子のエネルギーと運動量が電界の周波数 ( $\omega$ ) に対してどのように遅れ, 緩和していくかが電子-原料分子間の衝突断面積セットから把握できることを示している. 1 Torr の分子中の衝突緩和時間 (時定数) についてまず述べよう. 一般的に, 弾性衝突だけが起こる低エネルギー域では, 運動量の緩和時間 ( $\sim 10^{-8}$  s) がエネルギーの時定数 ( $\leq 10^{-5}$  s) より数桁短く, また, 非弾性衝突がおこるエネルギー域では両者がほぼ等しい  $10^{-9}$  s の値をもっている. 原料ガスとして  $CF_4(5\%)/Ar$  を例にとり, 電子の(a)衝突断面積, (b)衝突周波数, (c)衝突緩和時間 (1 Torr あたり) の間の関係 (読み方) を Fig. 3 に示した.

### 2.4 緩和連続モデルと支配方程式

電子やイオンの衝突緩和時間は2.3に述べたように原料ガス (数密度  $N$ ) の圧力  $p$  に逆比例する. したがって, プラズマが低圧化し, その生成電源が (超) 高周波化している最近のプラズマエッチングでは, 瞬時局所の換算電界から直接輸送パラメータを決めることは物理的厳密性に欠けてくる. そこで, 連続体モデルのなかで, 電子やイオンの運動量とエネルギーが空間の瞬時局所電界値に衝突緩和する現象を, 物理的に自然で単純な時定数 (衝突緩和時間)  $\langle \tau_m \rangle, \langle \tau_\epsilon \rangle$  の形にとり込んだのが緩和連続モデル (Relaxation ConTinuum Model: RCT model) である [6].

原料ガス中で電子衝突により生まれる正, 負イオンと電子が莫大な数集まって, 独特な放電プラズマ構造をつくるわけだから, 電子, 正イオン, 負イオンや解離分子 (ラジカル) の時空間構造をポアソン場で知ることが基本である. 荷電粒子の数密度連続式と電界, 電位分布を求めるポアソン方程式 (Poisson's eq.) が最低限必要で, その支配方程式 (Governing eqs.) は二次元空間  $r(z, t)$  での時間発展の形で (Fig. 2 参照)

電子の数密度連続式:

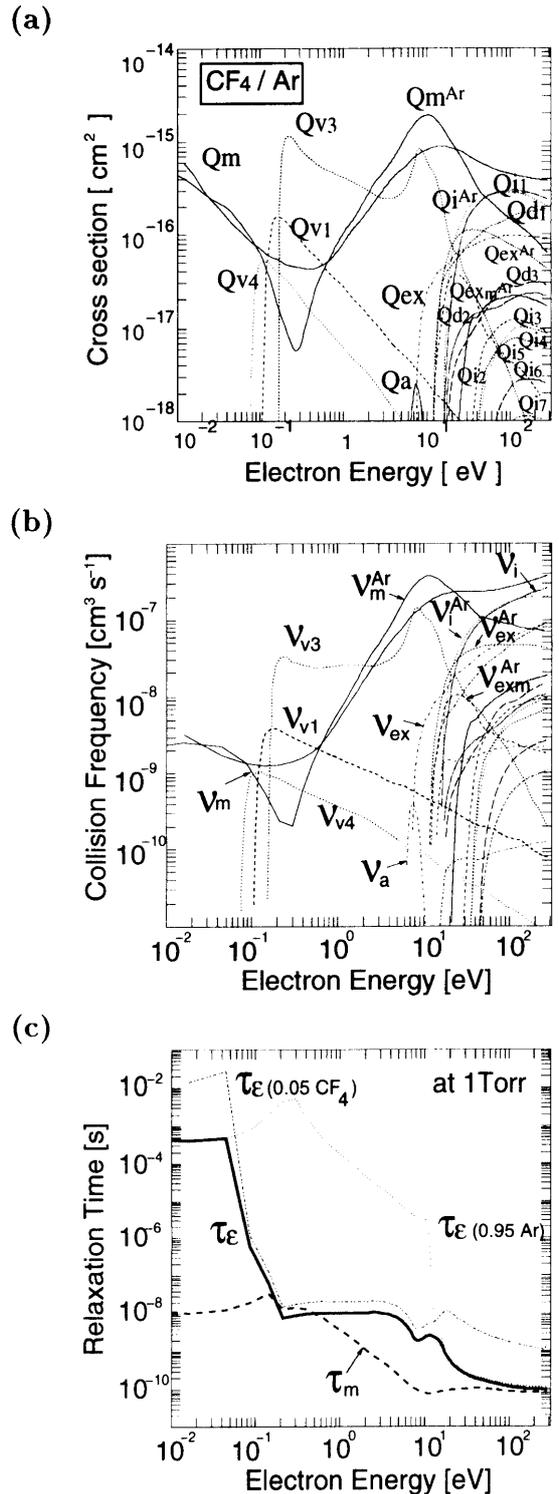


Fig. 3 Collision processes of the electron in  $CF_4/Ar$ . (a) Set of collision cross sections in  $CF_4$  and  $Ar$ , (b) Set of Collision frequencies in  $CF_4$  and  $Ar$ , and (c) Collision relaxation times in  $CF_4(5\%)/Ar$  at 1 Torr.

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_c(z,r,t) = & -\text{div}[n_c(z,r,t)\mathbf{V}_{dc} - \mathbf{D}_c \cdot \nabla n_c(z,r,t)] \\ & + \sum_j k_i N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) - \sum_j k_a N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) \\ & - k_{rc} n_c(z,r,t) n_p(z,r,t) + S_{co} \end{aligned} \quad (8)$$

正イオンの数密度連続式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_p(z,r,t) = & -\text{div}[n_p(z,r,t)\mathbf{V}_{dp} - \mathbf{D}_p \cdot \nabla n_p(z,r,t)] \\ & + \sum_j k_i N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) - k_{rc} n_c(z,r,t) n_p(z,r,t) \\ & - k_{rp} n_n(z,r,t) n_p(z,r,t) \end{aligned} \quad (9)$$

負イオンの数密度連続式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_n(z,r,t) = & -\text{div}[n_n(z,r,t)\mathbf{V}_{dn} - \mathbf{D}_n \cdot \nabla n_n(z,r,t)] \\ & + \sum_j k_a N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) - k_{rn} n_n(z,r,t) n_p(z,r,t) \end{aligned} \quad (10)$$

原料分子（解離分子，準安定励起分子など）の数密度連続式：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N_j(z,r,t) = & \text{div}[D_j \nabla N_j] \\ & - k_i N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) - k_a N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) \\ & \pm \sum k_k N_j(z,r,t) n_c(z,r,t) \pm \sum k_k N_j(z,r,t) N_k(z,r,t) + S_{j0} \end{aligned} \quad (11)$$

ポアソンの式：

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_r(z,r,t)) + \frac{\partial}{\partial z} E_z(z,r,t) \\ = -\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [(r \frac{\partial}{\partial r} V(z,r,t)) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} V(z,r,t)] \\ = e \frac{n_p(z,r,t) - n_c(z,r,t) - n_n(z,r,t)}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (12)$$

ここで， $z$ ， $r$  は軸方向と径方向の位置， $t$  は時刻である． $n_c$ ， $n_p$ ， $n_n$  は電子，正負イオンの数密度である．ここでは，原料ガス分子と，電子衝突により生成される解離分子や励起分子の時空間変化を中性分子の数密度連続式(11)で代表して書いた．考慮すべき分子の数だけ同様の連続式が必要となることは言うまでもない． $\mathbf{V}_{dj}$  は荷電粒子 ( $j = e, p, n$ ) のドリフト速度を， $\mathbf{D}_k$  は粒子 ( $k = e, p, n, j$ ) の拡散テンソルをあらわす． $k_i, k_a$  は電離と電子付着レート係数を，また， $k_{rc}$ ， $k_{rp}$  は電子-正イオン，正イオン-負イオン間の再結合レート係数を表す． $S_{co}$ ，

$S_{j0}$  は電極や側壁からの電子と中性粒子の放出項である． $\mathbf{E}(E_z, E_r)$  と  $V(z,r,t)$  は電界と電位を表す． $e$  は電気素量， $\epsilon_0$  は誘電率である．ここでは一価の正負イオンを考えている．(8)-(11)の  $\text{div}$  の中身はフラックス(流量)  $\mathbf{F}_j(z,r,t)$  を表すことに注意しよう．続いて，電子の運動量緩和を考えよう．運動量保存式は緩和方程式の形に

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n_c(z,r,t) m \mathbf{V}_{dc}(z,r,t)) \\ = e \mathbf{E}(z,r,t) n_c(z,r,t) - \frac{n_c(z,r,t) m \mathbf{V}_{dc}(z,r,t)}{\langle \tau_m \rangle} \\ - n_c(z,r,t) m \mathbf{V}_{dc}(z,r,t) \nabla \cdot \mathbf{V}_{dc}(z,r,t) \end{aligned} \quad (13)$$

と書ける．ここで， $\langle \tau_m \rangle$  は運動量移行の時定数であり，DC電界下のドリフト速度  $V_{dc}^0$  から  $mV_{dc}^0/eE$  と表せる．電子-分子間の全衝突周波数(衝突断面積×電子速度)が電子の速度によらず一定(双極子相互作用)であれば， $\langle \tau_m \rangle$  は定数となり衝突断面積から直接求まる．正負イオンについても(13)と同様の運動量緩和方程式(momentum relaxation eq.)が書ける．

次に，電子のエネルギー量の緩和例として平均エネルギー( $\epsilon_m(z,r,t)$ )の緩和を考えよう．平均エネルギーの保存式は，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (n_c(z,r,t) \langle \epsilon_m(z,r,t) \rangle) = \\ - e E(z,r,t) \text{div}[n_c(z,r,t) \mathbf{V}_{dc}(z,r,t) - \mathbf{D}_c \cdot \nabla n_c(z,r,t)] \\ - \sum_j \left( \left\{ \frac{2m}{M} \langle \epsilon_m(z,r,t) \rangle \right\} + \sum k_{cx} \epsilon_{cx} + k_i \epsilon_i \right) n_c(z,r,t) N_j \\ - \text{div} \{ [n_c(z,r,t) \mathbf{V}_{dc}(z,r,t) - \mathbf{D}_c \cdot \nabla n_c(z,r,t)] \\ \langle \epsilon_m(z,r,t) \rangle \} \end{aligned} \quad (14)$$

である．ここで，平均エネルギー  $\langle \epsilon_m \rangle$  と移動度  $\mu$  (定数) を用いて実効電界を  $E_{\text{eff}} = \langle \epsilon_m \rangle / e \mu \langle \tau_c \rangle$  と定義しよう．(14)を実効電界  $E_{\text{eff}}$  の二乗に関する緩和方程式の形に書き直すと

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [E_{\text{eff}}(z,r,t)^2 n_c(z,r,t)] = \\ \frac{[E_{\text{eff}}(z,r,t)^2 - E(z,r,t)^2] n_c(z,r,t)}{\langle \tau_c \rangle} \\ - \text{div}[n_c \mathbf{V}_{dc} E_{\text{eff}}^2 - \mathbf{D}_c \cdot \nabla n_c E_{\text{eff}}^2] \end{aligned} \quad (15)$$

が得られる．電離や電子励起解離などしきい値エネルギー( $\epsilon_j$ )をもったレート係数  $k_j$  は，これらのしきい値より大きいエネルギー領域 ( $\epsilon \geq \epsilon_j$ ) における電子エネルギーの時定数( $\tau_{ij}$ )をもった，同様の緩和方程式の逐次解法から間接的に求まる．しかしこのエネルギー緩和時間( $\tau_{ij}$ )を厳密に求めることは容易ではなく，普通単一エネ

ルギーをもった電子の衝突緩和時間 (Fig. 3 参照) から推定される。

最後に、電子が連続体モデルで扱える場合、リアクタ内の原料ガス流れ (速度  $V_f$ ) は同様に連続体近似による非圧縮性のナビエ・ストークス方程式 (Navier-Stokes eq.)

$$\frac{\partial}{\partial t} V_f + V_f \cdot \nabla_r V_f = -\frac{1}{MN} \nabla p + \frac{\eta}{MN} \nabla^2 V_f \quad (16)$$

の解で与えられる [7]。ここで、 $\eta$  は粘性率である。電子、イオンの方向性速度はガスの流れ速度に比べ十分に大きく、普通荷電粒子の輸送はガス流れの影響を受けない。

## 2.5 外部条件と境界条件

酸化膜 ( $\text{SiO}_2$ ) エッチング用プラズマの基本は、2枚の平行板間に (超) 高周波電圧源

$$V_{\text{app}}(t) = V_0 \cos \omega t \quad (17)$$

で生成維持される容量結合プラズマ (Capacitively Coupled Plasma: CCP) にある (Fig. 1 参照)。この電圧源と生成されるプラズマの間にはインピーダンス整合 (impedance matching) 用のコンデンサ  $C_b$  が直列に接続される。この間の事情は、電源側の電極 (電位  $V_{\text{sus}}(t)$ ) に流入する電子、正負イオンのフラックス  $\Gamma_e(t)$ 、 $\Gamma_p(t)$ 、 $\Gamma_n(t)$  を用いて、

$$V_{\text{sus}}(t) = V_0 \cos \omega t + V_{\text{dc}}(t)$$

ここで

$$V_{\text{dc}}(t) = \frac{e}{C_b} \int_0^t \int_{\text{surf}} [\Gamma_p(t) - \Gamma_e(t) - \Gamma_n(t)] dS dt \quad (18)$$

の関係で表現できる。電極に出現する負の自己バイアス電位 (self-bias voltage)  $V_{\text{dc}}$  はコンデンサの大きさにより電源の一周の間で時間的に変化することもある。

さて、産業界では ULSI 製造の生産効率を高めるための方策の一つとして、高速エッチングが追求される。高速レートを得るための解の一つは、高密度プラズマと高イオンエネルギーの併用である。したがって、エッチングリアクターの「高密度プラズマ生成」とウェハーへの「高エネルギーイオン照射」の2つの機能を同時に実現するためのデザインがリアクタに求められる。Fig. 1 に示す2周波 CCP は次世代の  $\text{SiO}_2$  エッチング用に筆者らがデザインしているリアクタの原型である。高密度のプラズマは超高周波 (Very High Frequency: VHF)、100 MHz

で生成し、ウェハーへのイオン加速は低周波 (Low Frequency: LF)、1 MHz で実現される系である。ウェハーバイアス電位はウェハー電源電圧と式(18)の関係がある。

つぎに、エッチング用ウェハーを備えたプラズマリアクタ内の、電位の与えられた、あるいは、浮遊電位にある金属や誘電体壁表面の境界条件を荷電粒子と中性分子について考えよう [1]。

### (1) 電子, 正負イオンについて;

金属あるいは誘電体壁に入射する荷電粒子は広い意味で両極性拡散に支配され、周期定常状態では電源の一周 ( $T = 2\pi/\omega$ ) にわたって各フラックスの和をとると

$$\int_0^T \int_S [\Gamma_p(z,r,t) - \Gamma_e(z,r,t) - \Gamma_n(z,r,t)]_{\text{surf}} dS dt = 0 \quad (19)$$

が成立している。

#### (1.1) 金属壁;

このとき荷電粒子が導電率の高い金属表面で瞬時再結合することを考えれば、

$$n_e(z,r,t)|_{\text{surf}} = n_p(z,r,t)|_{\text{surf}} = n_n(z,r,t)|_{\text{surf}} = 0 \quad (20)$$

とおける。

#### (1.2) 誘電体壁;

誘電率  $\epsilon$  をもった誘電体表面  $r(z,r,t)$  の表面電荷数密度を  $\sigma_{\text{surf}}(z,r,t)$  とすると

$$\sigma_{\text{surf}}(z,r,t) = \int_0^t e [\Gamma_p(z,r,t) - \Gamma_e(z,r,t) - \Gamma_n(z,r,t)]_{\text{surf}} dt \quad (21)$$

ここで、誘電体表面に垂直奥行き方向に微小距離  $\Delta z$  (あるいは  $\Delta r$ ) をとり表面の微小面積を  $\Delta S$  とすれば

$$\sigma_{\text{surf}} \Delta S = \rho_{\text{surf}} \Delta S \Delta z \quad (\text{or} = \rho_{\text{surf}} \Delta S \Delta r) \quad (22)$$

で正味の表面電荷密度  $\rho_{\text{surf}}$  を定義して、誘電率  $\epsilon$  のもとのポアソン方程式から誘電体表面の電位  $V_{\text{surf}}(z,r,t)$  を求めることができる。

#### (1.3) 有限の導電率をもった材料表面壁;

表面を含む厚さ  $\Delta z$  (あるいは  $\Delta r$ ) について、各荷電粒子の数密度  $n_{j(\text{surf})}$  に関する表面方程式

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} n_{j(\text{surf})}(z,r,t) = & \\ & - \text{div} \Gamma_{j(\text{gas})}(z,r,t) - \text{div} \{ \mathbf{J}_{j(\text{surf})}(z,r,t) / e \} \\ & - k_{sr} n_{j(\text{surf})} n_{k(\text{surf})} \end{aligned} \quad (23)$$

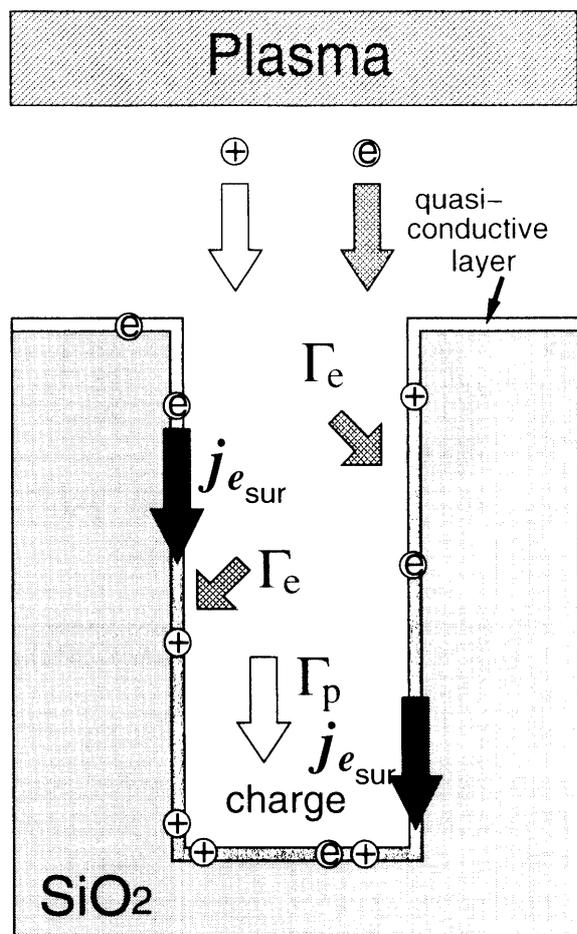


Fig. 4 Wall surface with finite conductivity exposed to a plasma.

を解けばよい (Fig. 4 参照) [8]. ここで,  $J_{j(surf)}$  は表面層導電電流,  $k_{sr}$  は表面層再結合係数である.

(2) 解離ラジカル分子など中性分子;

解離ラジカル分子が表面に入射することで化学エッチングが, またイオン衝撃で表面の物理スパッタリングが進行する. あるいはラジカル分子が吸着した表面がイオンエネルギーでアシストされる形でエッチングは進む. したがって, 解離ラジカル分子の境界条件はエッチング機構の鍵であり複雑である [1, 7]. プラズマのシミュレーションで, 中性分子については普通, 表面での反射係数  $R_{ref}$ , あるいは, ステイキング係数  $S_{st}$  を用いて,

$$\Gamma_j|_{out} = R_{ref} \Gamma_j|_{in} \quad (24)$$

と扱われることが多い. ここで,  $\Gamma_j|_{in}$ ,  $\Gamma_j|_{out}$  は表面に入射と表面放出の中性粒子フラックスである.

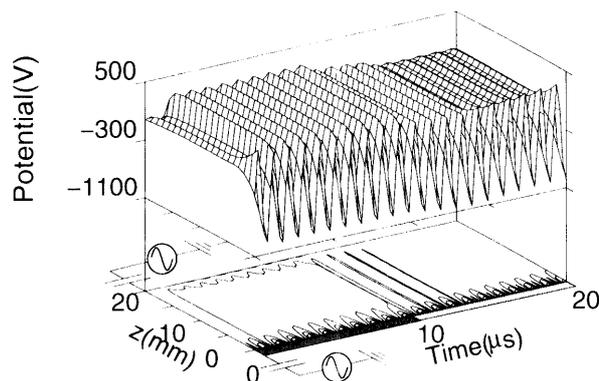


Fig. 5 Time and space distribution of the space potential in pulsed 2f-CCP at 50 mTorr in CF<sub>4</sub>(5%)/Ar, driven by VHF source ( $f=100$  MHz,  $V_0=300$  V) and bias source ( $f=1$  MHz,  $V_0=700$  V). On/off period is 10  $\mu$ s/10  $\mu$ s.

2.6 支配方程式の時間発展安定解法

高周波プラズマは周期をもって時間変調(周期定常)されるから, 時間発展解法により周期定常解を求めることが基本である. このとき, 中心となる移流拡散方程式 (8) - (10) の数値解法では, 時間ステップ  $\Delta t$  と位置ステップ  $\Delta z$  (あるいは  $\Delta r$ ) の大きさ相互の関係が解の安定を支配する.

1) 安定解は

$$\Delta t < \text{Min} \left[ \frac{\Delta z}{V_d}, \frac{(\Delta z)^2}{2D} \right] \quad (25)$$

の条件で与えられる. 普通, ペクレ数 (Peclet number)  $P_e$ ,

$$P_e = \frac{V_d \Delta z}{D} < 2 \quad (26)$$

で空間ステップの条件が与えられる [1, 9].

2) リアクタ内, 荷電粒子が電極や壁に近づくと数密度連続式は移流拡散方程式 (drift-diffusion eq.) から移流方程式 (drift eq.) に連続的に遷移するために, ペクレ数が急増し (26) の条件を守ることが難しい. このとき, Scharfetter-Gummel 法 [1, 10] や CIP 法 [11] による安定解法が使われる.

3) 時間ステップ  $\Delta t$  は誘電緩和時間則により

$$\Delta t < \frac{\epsilon_0}{e \mu_e n_e} \quad (27)$$

の制約を受けるために, 計算時間がプラズマの数密度に比例して増してしまう. この計算時間が莫大となること

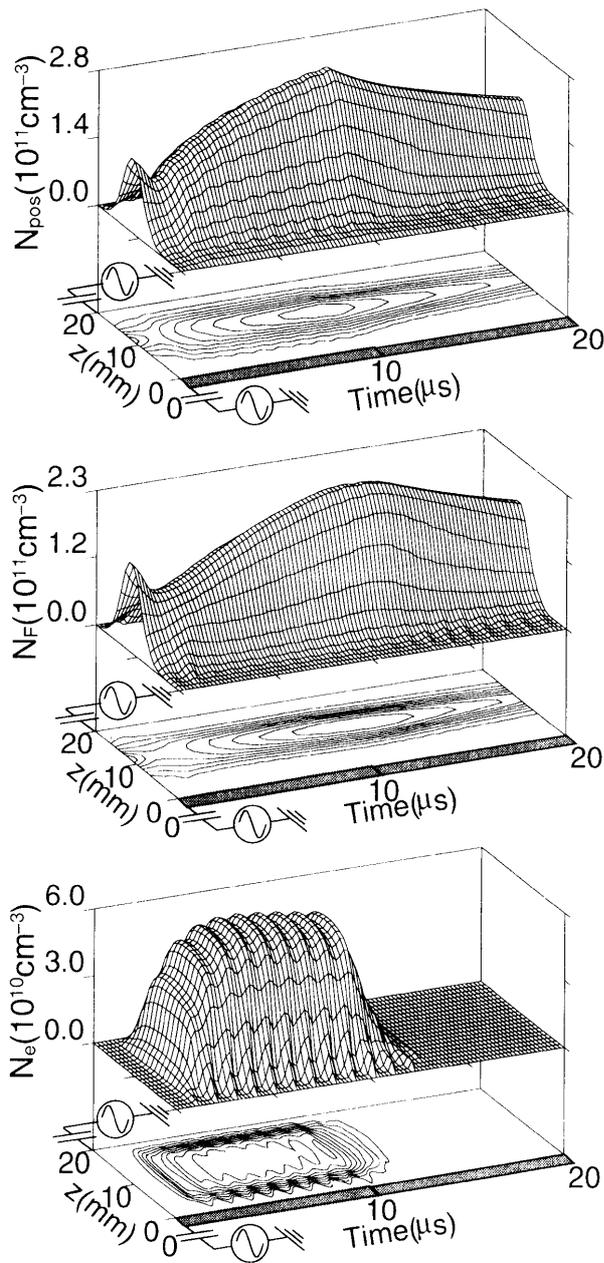


Fig. 6 Density distributions of positive and negative ions, and electrons during one period in the pulsed 2f-CCP. External condition is the same as those in Fig. 5.

を避ける一手法として、電位分布（ポアソン方程式）を時間発展の形にして解く方法（半陰解法）が提案されている[12].

## 2.7 プラズマエッチングと原料ガス

酸化膜( $\text{SiO}_2$ )のエッチングには、普通CF系のガスがArで希釈され使用される。CF系ガスは電子付着により

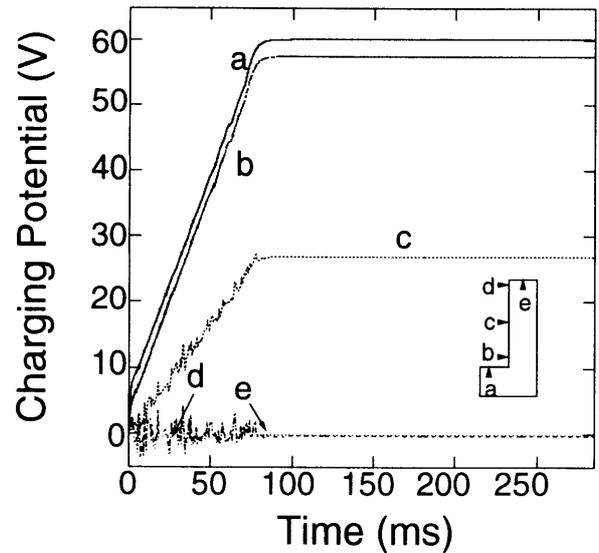


Fig. 7 Temporal distribution of the wall charging potential in a trench (width:  $0.05 \mu\text{m}$ ,  $0.5 \mu\text{m}$ ) with surface conductivity ( $10^{-8} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ ) in a cw plasma..

負イオン生成をおこなう。その解離電子付着断面積は普通  $10^{-18} \text{cm}^2$  の小さな値であるが、生成された負イオンは電子に比べて数桁大きい質量をもち、電極前の正イオンシースにより電気的なトラップを受けプラズマ中に蓄積される。最近の研究で、電子衝突励起を経由して生成される反応性の高い解離分子（ラジカル分子）が大きな電子付着断面積を有することも明らかになりつつある。このようにエッチング用プラズマでは負イオン密度が電子密度と同等の大きさを持つ場合が多く、容量結合リアクタのプラズマエッチングは負イオンプラズマで実現されていると言えよう。ここでは、 $\text{CF}_4$  (5%) / Ar を原料とした例をあげよう。先に、Fig. 3(a)(b)に  $\text{CF}_4$  と Ar、それぞれの電子衝突断面積（周波数）セットを示した。 $\text{CF}_4$  (5%) / Ar の意味は  $\text{CF}_4$  が 5% で Ar が 95% 含まれるまったく新しいガス分子の出現を意味する（Fig. 3(c)参照）。

## 2.8 シミュレーションが明らかにするプラズマ

本稿で説明した緩和連続モデルを用いた支配方程式系を数値計算することにより、プラズマの時空間構造やその独特な機能、ウエハー表面でのエッチング、チャージングなどを予測することができる。個々の内容はこの講座（シミュレーション）の意図と離れるため論じない。ただ、一例として、Fig. 1 の 2f-CCP をパルスプラズマ源とした場合の例を紹介する。外部条件は VHF ( $f=100$

MHz,  $V_0=300$  V), LF ( $f=1$  MHz,  $V_0=700$  V),  $CF_4$  (5%) / Ar (50 mTorr) でパルス on/off = 10  $\mu$ s / 10  $\mu$ s である. Fig. 5 はリアクタ対称軸上, 空間電位  $V(z, 0, t)$  の on/off 一周期特性である. on フェーズ, off フェーズ, それぞれで高速の正イオン, 負イオンをウエハーに照射できる形にデザインされている. このときの, 全正イオン ( $Ar^+ + CF_4^+$ ), 負イオン ( $F^-$ ), 電子数密度の時空間分布を Fig. 6 に載せた. Fig. 7 はこの二周波 CCP を連続駆動した際の  $SiO_2$  表面微細トレンチ内チャージングの様子の子測例である.

### 参考文献

- [ 1 ] 真壁利明: プラズマエレクトロニクス (培風館, 1999).
- [ 2 ] K. Maeshige, G. Washio, T. Yagisawa and T. Makabe, *submitted to J. Appl. Phys.*
- [ 3 ] T. Makabe, J. Matsui and K. Maeshige, *Sci. Technol. Adv. Materials* **2** (2001. Aug.); T. Makabe, J. Matsui and K. Maeshige, *AIP Journal* (*in press*).
- [ 4 ] T. Makabe, *Adv. Atomic and Molecular and Optical Phys.* **44** 127 (2001).
- [ 5 ] Edt by R.W. Crompton, M. Hayashi, D.E. Boyd and T. Makabe *Gaseous Electronics and Its Applications* (KTK Sci. Publishers (Tokyo), and Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1991) p.236.
- [ 6 ] K. Okazaki, T. Makabe and Y. Yamaguchi, *Appl. Phys. Lett.* **54**, 1742 (1989); T. Makabe, N. Nakano and Y. Yamaguchi, *Phys. Rev. A* **45**, 2520 (1992).
- [ 7 ] K. Maeshige, M. Hasebe, Y. Yamaguchi and T. Makabe, *J. Appl. Phys.* **88**, 4518 (2000).
- [ 8 ] J. Matsui, K. Maeshige and T. Makabe, *J. Phys. D* (*in press*).
- [ 9 ] J.H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics* (Springer, 1996).
- [ 10 ] D.L.S Scharfetter and H.K. Gummel, *IEEE Trans. Electron Devices* **ED-16**, 64 (1969).
- [ 11 ] T. Yabe and T. Aoki, *Comput. Phys. Commun.* **66**, 219 (232).
- [ 12 ] P.L.G. Ventzek, R.T. Hoekstra and M.J. Kushner, *J. Vac. Sci. Technol. B* **12**, 461 (1994).