

学 位 論 文 題 名

MODELLING OF RADIO FREQUENCY NON-EQUILIBRIUM PLASMAS
(rf 非平衡プラズマのモデリング)

学位論文内容の要旨

近年、半導体産業の発展にともない、半導体デバイスの高性能化等を目的として、製造・加工技術の開発、高度化が進められている。

半導体製造プロセスは、大きく、液相によるウェットプロセスと、気相を用いるドライプロセスに分かれるが、近年は、デバイスの高集積化、環境問題などから、後者のドライプロセスが、広く用いられている。

半導体ドライプロセスには、プラズマエッチングやプラズマCVD (chemical vapour deposition) があり、これらのプロセッシングにおいては、プラズマの性質が、材料やデバイスの性能に大きく影響する。したがって、より高度な、また、目的にかなうプロセッシング技術を開発するためには、プラズマの性質を把握することが必要である。

これまで、新しいデバイスや材料の製造にあたっては、実験を繰り返し、その中から、最適なプラズマの状態・条件を経験主義的な方法で探し出してきた。しかしながら、そのような経験的な方法によらずにプラズマの性質を把握し、プロセスの最適条件を予測することは、プロセスの最適化並びに開発の効率化のために極めて重要である。

経験主義的な方法によらずに、プラズマの性質を把握する方法の1つとして、計算機シミュレーションによる解析が挙げられる。この方法は、計算機の高速度・大容量化にともない、有力な手段となる可能性があり、近年、プラズマCVD、プラズマエッチング等に適用する研究が進められている。

本論文は、経験的な要素をできるだけ排除した、プロセッシングプラズマのシミュレーション解析を行なうためのモデルの構築とシミュレーション技法の開発を目的としている。

プロセッシングプラズマのシミュレーション解析を、本論文では、便宜上、以下の3段階に分けて考えている。

(モデル1) プラズマ中の電子、イオンの挙動の解析 (plasma kinetics)

(モデル2) 励起・解離種(ラジカル)の反応、輸送過程の解析 (plasma chemistry)

(モデル3) 膜表面反応・堆積過程の解析(surface reaction and film growth)

本論文においては、まず、上記各段階についてのシミュレーションモデルを構築している。プラズマプロセッシングにおいては、膜堆積やエッチングに必要なラジカルやイオンは第一次的に電界により加速された電子の、母ガス分子への衝突により生成される。モデル1は、電子、イオンの挙動を調べることににより、プロセスに必要なラジカル種の発生や、基板へのイオン衝撃を明らかにするものである。モデル2では発生したラジカルの気相反応、輸送過程をシミュレートし、基板表面に到達するラジカル種について予測を行う。最後にモデル3により、膜堆積過程をシミュレートする。これまでに、上記の個々の過程についてのシミュレーション解析は、いくつか行われてきている。しかしながら、実際のプロセッシングにおいては、これらの現象は、互いが密接に関係しつつ複合的に進行している。したがって、実際のプロセスを適切に予測するには、プロセスの全過程を統合的かつself-consistentにシミュレートできるモデリングを行なうことが、必要であると考えられる。

本論文では、現在プラズマCVDに多く用いられている非平衡rfプラズマを対象とし、rfプラズマCVDによる水素化アモルファスシリコン(a-Si:H)膜堆積の全過程のシミュレーションモデルの構築を目的としている。ここでは、モデル1からモデル2を経てモデル3の方向への一方向の流れのシミュレーションを行なうだけでなく、各段階のシミュレーション結果を前段階へフィードバックすることにより、self-consistentにプロセスをシミュレートする方法を示している。

本論文は全8章で構成されている。第1章は序論であり、プロセッシングプラズマのシミュレーション解析の重要性を述べるとともに、代表的な研究を、紹介している。

第2章においては、本論文におけるモデリングの中核をなすrf非平衡プラズマのモデリングとシミュレーション技法について述べている。まず、このモデルの基本手法である、モンテカルロ法による気体中の電子、イオンの挙動の解析法を説明している。また、プラズマCVDに用いられるプラズマのモデリングの一例として、本研究で構築した、平行平板、容量結合型rfプラズマのシミュレーションモデルについて述べている。このモデルは、ニュートンの運動法則、衝突も物理、電気磁気学、電気回路学など、物理学の基本的理論を組み合わせたものからなり、モデリングにあたり、プラズマの性質について得られた経験的な知見を用いていない。したがって、プラズマの性質をいわゆる第一原理に基づいて明らかにすることができるという原理的な特徴をもつ。また、従来のrfプラズマのシミュレーションにおいて問題であった、電子エネルギー分布の場所的非平衡性や時間的緩和が自動的に考慮されている。

第3章においては、本モデルをモデルガス中のrfプラズマに適用した結果を述べた。この結果、モンテカルロシミュレーション法により、定常放電のシミュレーションを行なうことが可能であることが示された。また、本シミュレーションの結果が、定性的な観点から判断して妥当なものであることが示されている。

第4章においては、本シミュレーション手法をプラズマプロセッシングのパッファガスとして用いられているアルゴンガスに適用した結果について述べている。これにより、いわゆる“electro-positive”なガス中のrf非平衡プラズマにおける、電界分布、電子エネルギー分布など、rfプラズマの重要な特性の一部を明らかにするとともに、実験とほぼ同条件下でシミュレーションを行ない、本モデルによるシミュレーション結果が、実験とも定性的に一致することを示している。

第5章においては、a-Si:H膜の原料ガスとして実用されているモノシラン(SiH_4)ガス中のrfプラズマのシミュレーションを行なっている。ここでは、イオン-中性種、イオン-イオン、電子-イオン間の反応計算を、モンテカルロモデルと同時に解くことによりモデル2と、モデル1とを統合している。シミュレーションの結果、膜形成に寄与するラジカル種の発生量や発生位置分布が求められた。さらに、 SiH_4 においては、プラズマ中に存在する負イオンの影響により、アルゴンのような“electro-positive”なガスとはプラズマの性質が異なることが予想されている。本章においては、負イオンの効果についての考察も併せて行なっている。

第6章においては、 SiH_4 rfプラズマにおけるラジカルの反応過程および輸送過程のシミュレーションを行なっている。各ラジカル種についての拡散方程式を解くことにより、 SiH_4 プラズマ中のラジカル分布、および基板表面へのラジカル束を求めている。ここでは、第5章で得られたラジカルの発生レートを拡散方程式内の発生項として用いることにより、モデル1とモデル2が統合されている。また、ここで、ラジカル種の表面反応を考慮したシミュレーションを行なうことにより、モデル3との統合も考慮されている。

第7章では、基板表面でのラジカル反応と、膜堆積過程のシミュレーションを行なっている。ここではモンテカルロ法に基づくa-Si:H膜のシミュレーションモデルを用いて、堆積率、水素含有量などを計算し、ほぼ実験による測定値に一致するものが得られた。さらに、このモデルにより、膜中の水素含有量などのパラメータの基板温度依存性、入射ラジカル束依存性などを調べている。また、ここで求められた、各ラジカルの膜表面における消失係数をモデル2にフィードバックし、新たに求められたラジカル束による再計算を行ない、プロセスを統合したモデリングの実現をはかっている。

第8章は結論であり、本論文で得られた成果を要約している。

学位論文審査の要旨

主 査 教 授 田 頭 博 昭

副 査 教 授 本 間 利 久

副 査 教 授 深 井 一 郎

副 査 教 授 長谷川 英 機

学位論文題名

MODELLING OF RADIO FREQUENCY NON-EQUILIBRIUM PLASMAS
(rf 非平衡プラズマのモデリング)

本論文は、半導体等のプラズマプロセスの高度化の要求に応えるため、それに多用される rf プラズマの性質を計算機シミュレーションにより解明し、これを基にプロセスの最適条件を予測する手法の開発を目的としたものである。

プロセッシングプラズマのシミュレーション解析を、本論文では、以下の3段階に分けて取り扱っている。

(モデル1) プラズマ中の電子、イオン挙動の解析 (plasma kinetics)

(モデル2) 励起・解離種(ラジカル)の反応、輸送過程の解析 (plasma chemistry)

(モデル3) 膜表面反応・堆積過程の解析 (surface reaction and film growth)

本論文の著しい特徴の1つは、モデル1からモデル2を経てモデル3の方向への一方向のシミュレーションを行なうだけではなく、各段階のシミュレーション結果を他段階へフィードバックすることにより、self-consistentにプロセスをシミュレートする方法を示している点にある。

本論文は全8章で構成されている。第1章は序論であり、プロセッシングプラズマのシミュレーション解析の重要性を述べ、代表的な研究を紹介している。

第2章では、本論文の基本手法であるモンテカルロ法による気体中の電子、イオンの挙動解析法を説明するとともに、本論文で構築した、平行平板、容量結合型CVD用rfプラズマのシミュレーションモデルについて述べている。このモデルは、ニュートンの運動法則、衝突の物理、電気磁気学、電気回路学という、確立された物理法則のみからなり、プラズマの性質について経験的な知見を一切用いていない。したがって、プラズマの性質を”第一原理”のみに基づいて明らかにするという原理的な特徴をもつ。さらに、電子エネルギー分布の空間的非

平衡性や時間的緩和の定量的表現の問題が自動的に解決される旨を述べている。

第3章は、本モデルをヘリウムライクモデルガス中 rf プラズマに適用した結果を述べている。まず、モンテカルロ法により、定常放電のシミュレーションが可能であることをはじめ明らかにしている。また、結果を詳細に調べて、本シミュレーションが定性的に妥当なものであると判断されることを示している。

第4章では、本モデルをプラズマプロセスのバッファガスに用いられるアルゴンガスに適用している。その結果、電子付着のない実ガス中の rf 非平衡プラズマにおける、電界分布、電子エネルギー分布などの重要な特性を明らかにするとともに、実験とほぼ同条件下でシミュレーションを行ない、本モデルによるシミュレーション結果が、実験とも定性的に一致することを示している。

第5章では a-Si:H 膜の原料ガスとして実用されているモノシラン (SiH_4) ガス中の rf プラズマのシミュレーションを行なっている。ここでは、イオン-中性種、イオン-イオン、電子-イオン間の反応計算を、モンテカルロモデルの中で行うことにより、モデル2と、モデル1とを初めて統合した。このモデルにより膜形成に寄与するラジカル種の発生量とその位置分布を求めた。 SiH_4 では、プラズマ中の負イオンの影響が無視できないと予想されている。本章では、負イオンの効果に関する考察も併せて行なっている。

第6章では、 SiH_4 中 rf プラズマにおける、ラジカルの反応過程と輸送過程のシミュレーションを行なっている。各ラジカル種に対する拡散方程式を解きプラズマ中のラジカル分布と基板表面へのラジカル束を求めている。第5章で得られたラジカルの発生レートを拡散方程式の発生項として用い、モデル1とモデル2が統合されている。またここで、ラジカルの表面反応を考慮したシミュレーションを行なうことにより、初めてモデル3との統合も考慮されている。

第7章では基板表面のラジカル反応と、膜堆積過程のシミュレーションを行なっている。ここではモンテカルロ法に基づく a-Si:H 膜のシミュレーションモデルを用いて、堆積率、水素含有量などを計算し、ほぼ実験による測定値に一致するものが得られた。さらに、このモデルにより、膜中の水素含有量などのパラメータの基板温度依存性、入射ラジカル束依存性などを調べている。また、ここで求められた、各ラジカルの膜表面における消失係数をモデル2にフィードバックし、新たに求められたラジカル束による修正再計算を行ない、プロセスを統合したモデリングの実現をはかっている。

第8章は結論であり、本論文で得られた成果を要約している。

これを要するに本論文は、半導体等のプラズマプロセスにおいて多用される反応性 rf 非平衡プラズマのモデリングをモノシランガスの場合を例にとり、気相部分のみならず、これに重要な影響を与える膜堆積とその成長過程をも含めて自己無撞着に行う手法を確立したものであって、気体プラズマ工学ならびにプラズマプロセス工学に貢献するところ大である。よって著者は博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。