マグネトロン・スパッタ・ターゲットのエロージョン・レート 分布の数値シミュレーション*

小林 司**・細川 直吉**・板垣 克則**・内山 智雄**

(受理1993年12月2日, 掲載決定1994年2月5日)

Simulation of Erosion Rate Distribution on a Target used in a
Magnetron Sputtering System

Tsukasa KOBAYASHI, Naokichi HOSOKAWA, Katsunori ITAGAKI
and Tomoo UCHIYAMA

(ANELVA Corp., Yotsuya 5-8-1, Fuchu, Tokyo 183)

(Received December 2, 1993, Accepted February 5, 1994)

1. はじめに

半導体製造用, 液晶表示デバイス用のマグネトロン・スパッタリング装置は近年ますます大型化する傾向にある。そこでは, 経済性の観点からターゲットの利用効率が常に注目されている。ターゲットのエロージョン形状は, ターゲットの利用効率や膜厚分布等に直接影響するため, これを磁界分布等から予測できれば装置設計上非常に有用と考えられる。

マグネトロン・スパッタリングのターゲット・エロージョン分布の本格的シミュレーションは, Wendt¹⁾により初めて報告された。そこでは, 磁界中の電子の運動を解析することにより, 二次元的なエロージョン分布が計算されている。Sheridan²⁾は, 磁界中の多数の電子の運動, イオン化をモンテカルロ法により扱い, 円形カソードのエロージョンを解析した。以後同様な方法による解析が種々報告されているが^{3,4,5)}, それらは二次元あるいは円形カソードに限られていた。最近, 吉川⁶⁾は Sheridan と同様な方法で矩形カソードの三次元シミュレーションを行なった。モンテカルロ法では, 出発電子

の分布と最終的に得られるイオンフラックスの分布が矛盾しないように, 繰り返し計算を行ない収束解を求める必要がある。このような計算には多大な計算時間が必要となり, 近年手軽に利用出来るようになったワークステーション上での実行が難しい。今回, Wendt¹⁾の方法を三次元に拡張し, 収束解を求めるための繰り返し計算が不要な方法を検討した。また, この方法を15.7×55.88 cm サイズの矩形プレーナー型マグネトロンカソードに適用したところ, 実測との良い一致がみられた。

2. モデル

マグネトロン放電は, ターゲットに衝突したイオンにより発生した二次電子がシース電界により加速され Ar 原子に衝突し, これにより発生した Ar イオンがシース電界により加速されてターゲットに入射する, というサイクルで維持されている。近似的に, 電界はシース中のみに存在し, パルクプラズマ中では電子は磁界のみにより拘束されて運動すると考えられる。ターゲット上のある微小領域を考えると, この領域から放出された二次電子はシース電界, 磁界に拘束されて運動し Ar をイオン化することにより, ターゲット上の他の領域のイオンフラックスに影響を与えている。Wendt¹⁾はこれを数学的に表現した。位置 x におけるイオンフラックス $j(x)$

* 平成5年11月29日第34回真空に関する連合講演会で講演

** 日電アネルバ研究開発本部 (〒183 東京都府中市四谷 5-8-1)

について次のような式が成り立つ。

$$j(x_k) = \int K(x_k, x_i) j(x_i) dx_i \quad (1)$$

ここで、 $K(x_k, x_i)$ は x_i から放出された電子が x_k の位置のイオンフラックスに及ぼす寄与を示す影響関数 (Green function) である。上式は、ある位置の $j(x)$ はターゲット全域からの電子の寄与の足し合わせであることを表しており、 $j(x)$ に対するセルフコンシステントな形式になっている。上式を数値的に解くことにより、イオンフラックス分布、すなわちエロージョン分布が計算される。この計算は最終的に固有値問題に帰着され、 $j(x)$ は対応する固有ベクトルとして求まる。

影響関数 $K(x_k, x_i)$ は電子の運動を解析することにより計算することが可能である。Wendt らは、二次元の問題で、シースが十分薄く電子が磁界のみにより拘束されて運動すると仮定すると、 $K(x_k, x_i)$ はベクトルポテンシャル A を用いて簡単に表現できることを示した。一方、三次元の問題でも (1) 式は一般的に成り立つ。ここで $K(x_k, x_i)$ を計算するには、個々の電子の電磁界中での運動を追跡する必要がある。位置 x_k から出発した電子の軌道を追跡し、位置 x_i における電子密度を求める。この電子密度と発生するイオンフラックスは比例すると考えられるので、 $K(x_k, x_i)$ は電子密度の計算から求められる。

従来行なわれていたモンテカルロ法では、最初にターゲット上から放出される二次電子の分布を適当に仮定する。この電子の軌道を追跡しイオン化点を求め、イオンフラックス分布を算出する。しかし、このイオンフラックス分布は最初に仮定した二次電子放出分布とコンシステントでないで、両者の分布が一致するまで Fig. 1(a) のように計算を繰り返す必要がある。一方 Wendt の方法では、最初にやはり多数の電子の軌道追跡という

手間はかかるが、Fig. 1(b) のように (1) 式により直接イオンフラックス分布が求められるため、繰り返し計算を行わずに済むという利点がある。しかし、今までに三次元の問題にこの方法を適用した例は報告されておらず、本報が初めてである。

3. 計算条件

前述の Wendt の方法を、実際に 15.7×55.88 cm サイズの矩形マグネトロンカソードに適用した。電子の軌道を計算するためには、電磁界が既知でなければならない。ここでは電界はシース中で一定、シース電圧 -400 V、シース厚 4 mm とし、バルクプラズマ中では電界ゼロと仮定した。また、三次元の磁界解析は汎用有限要素法ソフト ANSYS により行なった。これにより得られる離散的な磁界を内挿することにより、任意の点での磁界を求めた。解析を行なった 15.7×55.88 cm サイズの矩形マグネトロンカソードの形状模式図とターゲット表面上における磁界分布を Fig. 2 に示す。同図はターゲット表面に平行な磁界成分 $B_{||}$ を 50 ガウス間隔で等高線表示したもので、右半分のみを示している。端部の $B_{||}$ は意図的に大きくしてある。これは後述するように、基板に堆積する膜の膜厚分布を均一化するためである。

電子の軌道は 10 ps の時間ステップでルンゲ・クッタ法により計算した。電子がターゲット上から出発するときの初速度はゼロとした。Ar 原子との衝突は、Sheridan ら²⁾ の場合と同様に、弾性散乱、イオン化散乱、励起散乱を考慮し、更に電子の散乱角度分布も考慮した。個々の電子の軌道は、電子のエネルギーが Ar のイオン化エネルギー約 16 eV 以下になるまで追跡した。また、簡単のために Ar との衝突周波数を 1.4×10^8 Hz 一定としエネルギー依存性を無視した。これは圧力にして約 1.3 Pa に相当する。

ターゲット・エロージョンの計算は、対称性を利用してターゲットの右半分を対象とした。ターゲットの右半分を約 5×5 mm の大きさの格子状領域に分割し、各領域から均一に 9 個の電子を放出させ、その軌道を追跡することにより、他の領域上の電子密度を求めた。この場合、(1) 式は 1375 元の非対称行列の固有値問題となり、この解法にはべき乗法を用いた。

4. 計算結果・考察

以上のようにして計算されたエロージョン分布を Fig. 3 に等高線表示した。また、部分的に実測と比較した結果を Fig. 4 に示す。同図には、矩形ターゲットの中央部 Y 方向断面 (Fig. 2 の A-A' 断面) 及び端部 X 方向断面 (Fig. 2 の B-B' 断面) におけるエロージョン分布

Fig. 1 Flow charts of the Monte Carlo method (a) and Wendt's method (b) for target erosion simulation in magnetron sputtering.

Fig. 2 Configuration of the 15.7×55.88 cm sized rectangular magnetron cathode (a) and contour lines showing the distribution of magnetic field component parallel to the target surface ($B_{||}$) at the target surface (b). Only right half part is shown. Numbers on the contour lines represent the intensity of $B_{||}$ in gauss.

Fig. 3 Contour lines showing the calculated distribution of target erosion in the 15.7×55.88 cm sized rectangular magnetron cathode. Only right half part is shown. Numbers represent the erosion depth in % normalized by the maximum.

Fig. 4 Cross-sectional profiles of calculated erosion depth (broken lines) and measured erosion depth (solid lines) along A-A' line (a) and B-B' line (b) shown in figure 2 in the 15.7×55.88 cm sized rectangular magnetron cathode. The calculated curves were adjusted to make the height of the peak coincide the measured one along A-A' line.

を示した。計算値は中央部 Y 方向断面の実測ピーク値で規格化した。実測値は Cr ターゲットによるものである。実測値と計算値は良く一致していることがわかる。

ターゲット中央部と端部では、端部の方がエロージョン深さが大きい。これは Fig. 2 の磁界分布を反映したものと考えられる。電界を E 、磁界を B と表すと、電子は $E \times B$ ドリフト、 $\nabla B \times B$ ドリフト、求心力ドリフト等により運動して⁷⁾、環状のトラックを形成している。このドリフト速度は磁界 B が大きい程小さくなる。そのため、局所的に B の大きな部分では電子密度が上昇し、その部分のエロージョン深さが大きくなると考えられる。実用的な観点からは、この効果により、基板に堆積する膜の膜厚分布を均一化することが可能になる。

また、 $\nabla B \times B$ ドリフトを考えると、電子が局所的に磁界の大きな領域に入ると出ていく場合で電子のドリフト運動の様子が異なる。これによりエロージョン分布にも、磁界の大きな領域を境にして（この場合 X 軸を対称軸として）何らかの非対称性が現われると期待されるが、今回の計算では特に目立った非対称性は現われなかった。実測でもこのような非対称性はほとんど観測されていない。Fig. 2 に示した程度の磁界の不均一性では、 $\nabla B \times B$ ドリフトがエロージョン分布に及ぼす影響は小さいと考えられる。

5. ま と め

マグネトロン・スパッタリングのターゲット・エロージョンのシミュレーションにおいて、Wendt の方法を三次元に拡張することにより、効率の良い計算法を検討した。この方法では、従来三次元のモンテカルロ計算で行われていた二次電子放出分布とイオンフラックス分布とをコンシステントにするための繰り返し計算が不要となる。この方法を 15.7×55.88 cm サイズの矩形マグネトロンカソードに適用したところ、エロージョンの実測分布と計算結果が良く一致し、このようなシミュレーションが有効であることが実証された。

【文 献】

- 1) A. E. Wendt, M. A. Lieberman, and H. Meuth, J. Vac. Sci. Technol. **A6**, (1988) 1827.
- 2) T. E. Sheridan, M. J. Goeckner, and J. Goree, J. Vac. Sci. Technol. **A8**, (1990) 30.
- 3) J. E. Miranda, M. J. Goeckner, J. Goree, and T. E. Sheridan, J. Vac. Sci. Technol. **A8**, (1990) 1627.
- 4) 井門俊治他, 核融合研究, **68**, (1992) 386.
- 5) 稲葉 宏他, 真空, **36**, (1993) 539.
- 6) 吉川幸雄他, 第10回プラズマプロセス研究会プロシーディングス, (1993) 137.
- 7) J. A. Thornton and A. S. Penfold, in *Thin Film Processes*, edited by J. L. Vossen and W. Kern (Academic, New York, 1978), p. 75.