スパッタの逆問題Ⅱ*

楠 本 淑 郎**

(受理1996年11月25日, 掲載決定1997年3月1日)

Inverse Problem of Sputtering II

Yoshiro KUSUMOTO

(Ulvac Japan Ltd., 2500 Hagisono Chigasaki 253)

(Received November 25, 1996, Accepted March 1, 1997)

1. はじめに

軸対称平行平板型マグネトロンスパッタにおいて, 最も平坦な膜厚プロファイルを与えるエロージョン強度分布の形を決定するのが本研究の目的である. 前報では平坦プロファイルからの自乗偏差を最小にする最適解はデルタ関数の有限和(幅ゼロの有限個のエロージョンリング)で与えられることを解析的に予想した¹⁾. 本報では, その予想を数値的に検証し, 最適解の存在領域と解の分岐の様子を調べる. またこの予想がより一般の逆問題に拡張できることも示す.

2. 問題の定式化と解析の結果

軸対称平板マグネトロンスパッタにおいて, 膜厚分布 $f(x)$ からエロージョン強度分布 $g(y)$ を求める逆問題は次の第1種積分方程式で定式化される.

$$f(x) = \int_0^a K(x, y) g(y) dy = (Tg)(x) \quad (1)$$

ここで K は下式で与えられる積分核, T は積分作用素である.

$$K(x, y) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \sqrt{(x+y+h)^2 - 4xy} \quad (2)$$

各記号の意味については Fig. 1 参照の事. (2) 式を導出する際以下の仮定を措いた.

1. 系の Geometry は軸対称である.

Fig. 1 Target-substrate geometry

2. スパッタ粒子は無衝突で基板に到達する.

3. スパッタ粒子の角度分布は余弦則に従う.

これらの仮定は問題にとって本質的なものではなく, 単に数学的簡便さから導入されたものに過ぎない.

T は線形作用素だから平均膜厚を 1 として f を規格化しておく. 即ち $\int_0^1 f(x) dx = 1$ と書いて,

$$\langle f \rangle = 1 \quad (3)$$

(3) 式より自乗偏差 J は簡単に

$$J = \langle f^2 \rangle - 1 \quad (4)$$

で与えられる. J を最小にする解を最適解と呼び, 対応する量に*を付けて区別する.

この時, $R(T)$ を T の値域として $K(x, y)$ の解析的性質から次の事がいえた.

* 平成 8 年 11 月 1 日 第 37 回真空に関する連合講演会で講演

** 日本真空技術 (〒253 茅ヶ崎市萩園 2500)

Fig. 2 Mapping of N-delta Solution in (a, h) plane

- A. $f=1 \notin R(T)$ (スパッタ量が有限である限り完全に平坦な分布は得られない.)
- B. $g^* \notin L^1[0, a]$ (最適解は可積分でない.)
- C. 充分小さな ε に対し $a/h < \varepsilon$ の時, $g^* = \gamma \delta(y-a)$ (充分小さいか, 遠いターゲットに対してはターゲット外縁上のリングソースが最適.)

上の B, C より一般の a, h の場合, 最適解は有限個の δ 関数で与えられると予想するのが自然である。即ち,

$$g_N^* = \sum_{k=0}^{N-1} \gamma_k \delta(y - y_k) \quad (y_0 > y_1 > \dots > y_{N-1}) \quad (5)$$

ここで, N は δ 関数の数, γ_k は正の数, y_k は k 番目の δ 関数の位置を表わすものとする。

3. 数値計算

(5)式に対応して像関数は,

$$f_N^* = u_0 + \sum_{k=1}^{N-1} \alpha_k u_k, \quad (\alpha_k = \gamma_k \langle K(x, y_k) \rangle) \quad (6)$$

と書ける。ここで, $u_0, u_k (k > 0)$ は

$$u_0 = K(x, a) / \langle K(x, a) \rangle, \quad (7a)$$

$$u_k = K(x, y_k) / \langle K(x, y_k) \rangle - u_0 \quad (7b)$$

で定義される。ただし $y_0 = a$ を仮定した。これは最小自乗偏差がターゲット半径に関して連続的に変化するという仮定に等価である。(6)式で与えた膜厚分布が規格化条件(3)を恒等的に満足するのは明らかであろう。

最適解である為には, $2N-2$ 個の停留条件

$$\frac{\partial f^*}{\partial \alpha_k} = 2 \langle u_k f_N^* \rangle = 0, \quad (8a)$$

$$\frac{\partial f^*}{\partial y_k} = 2 \alpha_k \left\langle \frac{\partial u_k}{\partial y_k} f_N^* \right\rangle = 0 \quad (8b)$$

Fig. 3 Bifurcation diagram of N-delta solution for $h=1$

($k=1, \dots, N-1$) を満たす必要がある。(8)式を連立させて, 多次元 Newton-Raphson 法で数値的に解く。ただし端点だけは特別に扱って $y_{N-1}=0$ で $\partial f / \partial y_{N-1} > 0$ なら $y_{N-1}=0$ とする。更に(8)式は必要条件であるから, 実際 J^* が任意の摂動に対して最小値を取る事を確認しなくてはならない。(5)式を仮定しているの摂動としては無限小振幅の u_N だけを考えればよい。即ち,

$$\delta J^* = 2 \langle u_N f_N^* \rangle \geq 0 \quad \text{for } y_N \in [0, a] \quad (9)$$

但し, 等号は $y_N = y_k$ ($k=0, \dots, N-1$) の時。

実際の数値計算では h を固定して, a を増加させ各点での最適解を求めた。 δ 関数の数 N を直接決める式はないから, 2 節 C で存在が保証された $N=1$ の解 (a が十分小さい状態) から出発して a を大きくしてゆき, (9)式が破綻した時点で N の数を 1 だけ増す。

こうして得られた, $a-h$ 平面における N の大域マップを Fig. 2 に示す。 $N-\delta$ 領域と $(N+1)-\delta$ 領域の境界を N 境界と呼ぶ。Fig. 2 には 1 境界と 2 境界, 更に $h=1$ と 3, 4, 5 境界の交点を示した。1 境界は 2 個目の δ 解 ((9)式の零点) が出現する場所である。2 個目の零点は横軸への接点としてではなく, 有限の角度で横軸と交わる交点として現れる事が, 数値計算の結果分かる。この場合(9)式の制限から交点は原点 (区間端点) 以外には有り得ない。即ち 1 境界は

$$\langle u_0 u_1 \rangle |_{y_1=0} = 0 \quad (10)$$

で与えられる。2 境界上での零点の増加の仕方も同様で, 2 境界の形は 1 境界をそのまま右ヘシフトした様に見える。3 境界以上も同様の傾向を示すものと予想される。

Fig. 3 に $h=1$ 上での解の分岐ダイアグラムを示す。ターゲット半径を横軸にとり, δ 関数の振幅 α_k を縦軸 (左), ターゲット半径に対する相対位置を縦軸 (右) に取った。ターゲット径の増大に従って新たに分岐した

Fig. 4 Least deviation plotted versus target radius

δ 解は、常にターゲット中心に現れ、暫く中心に留まった後、急激に外周方向へと動き始める。最も内側の δ 解がある程度原点から離れた所で原点に新たな δ 解が出現する。 N 境界と $(N+1)$ 境界間の間隔は N が大きくなるにつれ密に詰まってくる。一方、振幅は常に単調減少列を成す。 ($\alpha_0 > \alpha_1 > \dots > \alpha_{N-1}$)

Fig. 4 に $h=1$ の時の最適解に対応する最小偏差 $\sqrt{J^*}$ を示す。 N - δ 領域も縦線で区切って同時に図示した。最小偏差はターゲット半径と共に加速度的に急減少する。例えば、 $1\mu\text{m}$ 成膜時、基板半径の約1.5倍サイズのターゲットを使用し、3個のエロージョンリングを適宜配置すれば、偏差は $1\text{\AA}$ 以下となる。勿論こんな事は実際にはあり得ないが、膜厚均一性の理論的上限は比較的小さなターゲットサイズで驚くほど良い値を与える。

4. 一般化

最適解が δ 関数の有限和で書けると言う結論は、2節Bが成り立てば成り立つであろう。何故なら g^* の区間

$[0, a]$ での積分値は総スパッタレートに等しいから有界確定であり、なおかつ g^* が可積分でない（殆ど至る所でゼロ）となると δ 関数か、その微分以外に考えられないからである。2節Bが成り立つ為の十分条件は以下の各ケースでも成り立つことが示される。

① 軸対称性のない場合

円形以外のターゲット・基板の場合に対応する。

1次元問題の証明はそのまま2次元問題に拡張できる。但し2次元問題の最適解を具体的に求めるのは難しい。むしろ Tikhonov の正則化を行って近似解を求める方が実用的である。

② スパッタ粒子の角度分布が余弦則でない場合

角度分布が $\sum_{k=0} C_k \cos(2k+1)\theta$ の Fourier 展開で表わされる時。この場合の最適解は3節の Algorithm を用いて求めることができる。

③ 観測データに対する逆問題

データ列 $\{f_j\}$ ($j=1, 2, \dots, M$) が与えられた時、任意の補間法で作られる関数 $f_{\text{obs}}(x)$ ($x \in [0, 1]$) に対する最適解も可積分ではない。

5. おわりに

今回の結論は簡潔に

$$f \notin R(T) \cup R(T)^\perp \Rightarrow g^* = \sum_k \delta_k$$

と書くこともできる。これが広いクラスの問題に一般化できる所から、 δ のような特異超関数が現れる理由は、問題の Oversimplification によるものではなく、第一種積分作用素がもつ不適切性の本質的な反映であると考えられる。

〔文 献〕

- 1) 楠本：真空 38 (1995) 828.