

対向ターゲット式スパッタ法により得られる薄膜の微細構造の 計算機シミュレーション

神戸明宏*, 星陽一**, 鈴木英佐***

COMPUTER SIMULATION OF THIN FILM MICROSTRUCTURE DEPOSITED BY FACING TARGET SPUTTRING

Akihiro KANBE, Yoichi HOSHI and Eisuke SUZUKI

ABSTRACT

In order to clarify the changes in film structure in relation to the sputtering conditions in a facing target sputtering system, we carried out three dimensional computer simulation based on Monte Carlo method. This simulation model includes Motohiro's model and Turner's model. First, distribution of the incidence angles of depositing particles to the substrate plane and deposition rate of the film were calculated for various sputtering gas pressure. The calculated distribution of the incidence angles and deposition rate were coincident well with experimental results. Then, according to the calculated angular distribution, atoms assumed to be hard spheres were deposited on substrate by using Henderson's model. This simulation showed that film density decreases and film roughness increases as the sputtering gas pressure increases since the self shadowing effect becomes more prominent at a higher gas pressure. When surface migration of the deposited atoms due to thermal stimulation through lattice vibration was took into the simulation, the surface migration causes a significant increase in film density and leads to a decrease in film roughness.

1. はじめに

スパッタ法による薄膜形成技術は必要不可欠の技術として各種デバイスの作製に利用されている [1-2]。しかし、膜の構造や磁気特性はスパッタガス圧や基板の位置、基板温度、スパッタ法の種類などの膜堆積条件によって著しく変化するために実験的にスパッタ法による最適な膜形成条件を決定しているのがごく一般的である [3-4

]。膜堆積条件の著しい変化の原因として、スパッタ粒子が基板に入射するときの入射角度分布や入射エネルギー分布の変化、プラズマ中の荷電粒子による基板衝撃、基板表面状態の影響などが考えられているが、実験結果からの定性的な議論がほとんどであり、未だスパッタ膜の堆積過程の十分な理解が得られているとは言えない。

そのような観点から計算機シミュレーションを

* 大学院電子工学専攻

** 電子工学科助教授

***情報処理教育研究センター助教授

1996年10月8日 受理

用いてスパッタ膜堆積過程の理解をより明確にする試みが国内外の多くの研究者達により試みられてきた [5-14]。筆者らもスパッタ粒子の基板への入射過程を計算機シミュレーションで検討するとともに、このスパッタ粒子が基板上に堆積する場合の自己陰影効果に起因する膜構造の変化などについて検討してきた [15]。しかし、これまでのシミュレーションモデルではスパッタガスの運動がスパッタ粒子に比べて無視できるほど遅い場合のみを取り扱っており、5 mTorr 以上の高いガス圧領域に対しては適応できなかった。さらに、スパッタ粒子の基板上への堆積においても、堆積粒子の基板上での熱励起による移動は考慮していなかった。そこで本研究では、高ガス圧領域でも対応できるようにスパッタガスの運動を考慮したモデルに改良するとともに、付着粒子の熱励起による移動も考慮できるようにした。ここでは特に、①スパッタ粒子の基板への入射角度分布、入射エネルギー分布、基板上での膜厚分布のスパッタガス圧による変化、②入射角度分布による膜構造への影響、③基板温度の変化による膜構造および膜表面形態の変化、の三点に焦点を絞り、対向ターゲット式スパッタ法を用いた膜形成について検討した。以下に本研究で用いたシミュレーションモデルを示すとともに、得られた結果について報告する。

2. 膜堆積過程のシミュレーションモデル

本研究では種々のスパッタガス圧におけるスパッタ粒子の基板への入射角度分布を Motohiro のモデル [5] に Turner らのスパッタガスとの衝突過程のモデル [7] を取り入れたモデルにより算出した。ターゲットからスパッタ粒子が放出される時の放出角度分布は余弦則を、その時のエネルギー分布は Tompson 分布 [8] を用いた。スパッタ粒子とガスとの衝突散乱過程は Abrahamson の 2体衝突ポテンシャル [9] を用いた弾性衝突とし、スパッタガスの温度を 400℃ と仮定して計算した。シミュレーションでは図 1 に示すターゲット・基板配置を持つ対向ターゲット式スパッタ装置を用いて Ar ガス中で銅をスパッタした場合

の薄膜の堆積について検討した。

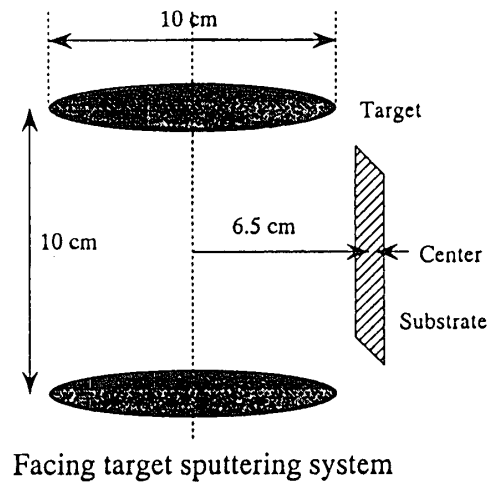


図 1 実験装置の概略図

この入射角度分布を用いて、スパッタ粒子を約 $180 \text{ \AA} \times 180 \text{ \AA}$ の銅の fcc (111) 基板上に入射させ、堆積させた。スパッタ粒子は半径 1.28 \AA の球とし、Henderson らのモデル [10] に従って、3ヶ以上の堆積粒子と接触する位置に付着させた。付着時に膜表面原子との間に働く原子間力は考慮しなかった。付着後の原子の熱励起による移動は Müller のモデル [11-13] および Müller-Pfeiter らの論文 [14] を参考にして表面を移動する単位時間当たりの移動回数 N を、

$$N = v_0 e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} \dots (1)$$

k_B : ボルツマン定数 T : 温度

ここで活性化エネルギー ΔE は、3ヶの原子と接している場合には

$$\Delta E = Q = \left(5 + \frac{20T}{3T_M} \right) k_B T_M \dots (2)$$

T_M : 融点

また、3ヶ以上の n ヶの粒子と接している場合には

$$\Delta E = (n-3)\phi + Q \dots (3)$$

とした。

ここで ϕ は原子・原子間の結合エネルギーである。

また、格子振動の周波数 ν_0 は、

$$v_0 = \left[\frac{8 k_B T}{\pi m} \right]^{\frac{1}{2}} / d \dots (4)$$

d : 原子間距離 m : 原子の質量

で求めた。

3. 結果と検討

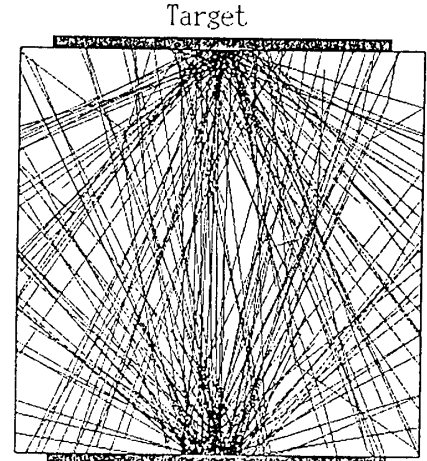
3. 1 高ガス圧領域でのスパッタ粒子の基板入射角度分布

図2に対向ターゲット式スパッタ装置を用いてスパッタしたときの、スパッタ粒子が基板に到達するまでの軌跡をシミュレーションした結果の例を示す。スパッタガス圧の上昇とともに、衝突・散乱過程が顕著になる様子が分かる。図3にスパッタ粒子の基板到達時の入射角度分布の計算結果を示す。比較のため、図4に入射角度分布の実測値をしめす。実測値の入射角度分布がシミュレーション結果より広がっているのは、測定に用いたスリット径がスリットから基板までの距離2mmに比較して直径1mmφと大きかったためである。いずれにせよ、対向ターゲット式スパッタの場合2つのターゲットからスパッタ粒子が到達するために、±45°付近にピークを持つ入射角度分布を示す。さらに、ガス圧が増加すると低入射角粒子と高入射角粒子とがともに増加し、入射角度分布が大きく広がる事が分かる。

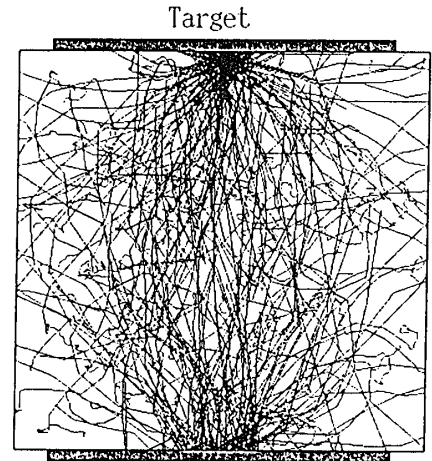
図5にスパッタガス圧を変えたときの基板入射粒子のエネルギー分布の計算結果を示す。ガス圧が10 mTorr以上になると、スパッタガスとの衝突散乱により、基板入射時のエネルギーが減少し、1 eV以下の低エネルギー粒子が主になっていくことが分かる。

図6にスパッタガス圧を変化させたときの膜厚分布の計算結果、図7に比較のため実測値を示す。スパッタガス圧の上昇とともに、中心から離れたところの膜厚の増加が確認できる。これは、スパッタ粒子のガスとの衝突散乱によりターゲット近くの基板上により多くの粒子が堆積するようになるためと考えられる。また、高ガス圧下でも計算機シミュレーションの結果は実験結果と良い一致を示していることから、本シミュレーションが少

なくとも入射角度分布および膜厚分布を推定する方法として有効である事を示唆している。



Target
(a)2mTorr



Target
(b)10mTorr

図2 スパッタ粒子の軌跡

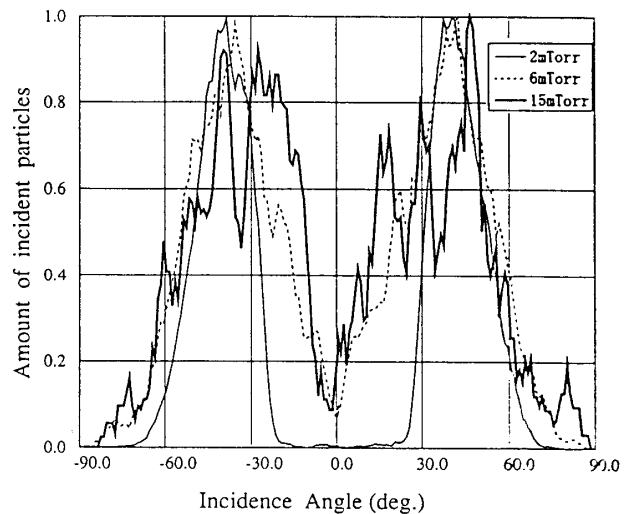


図3 入射角度分布 (計算値)

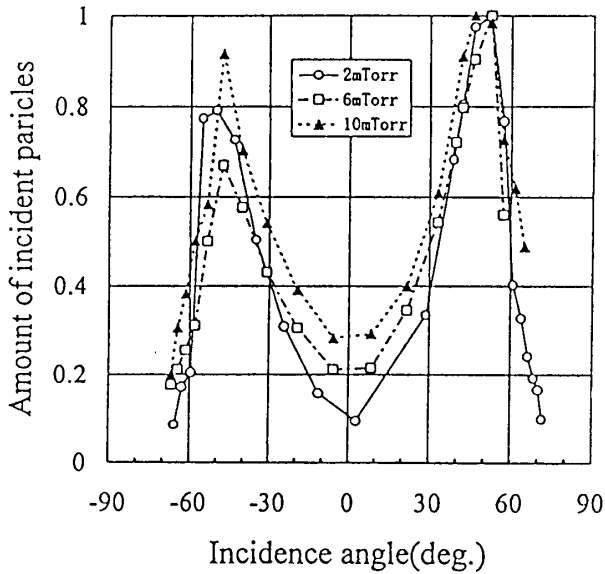


図4 入射角度分布 (実験値)

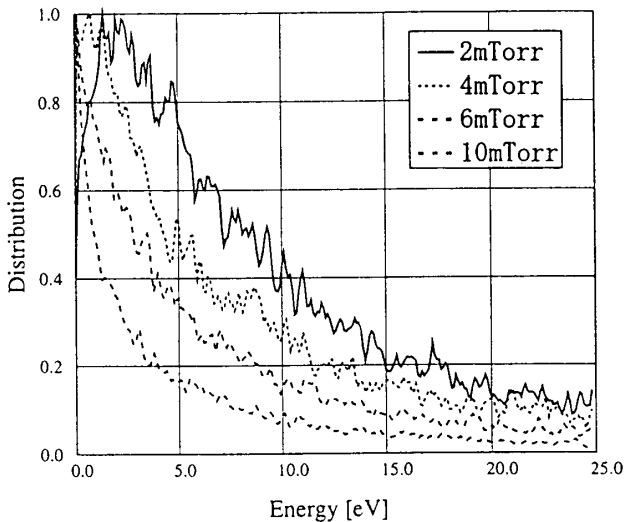


図5 基板入射粒子のエネルギー分布

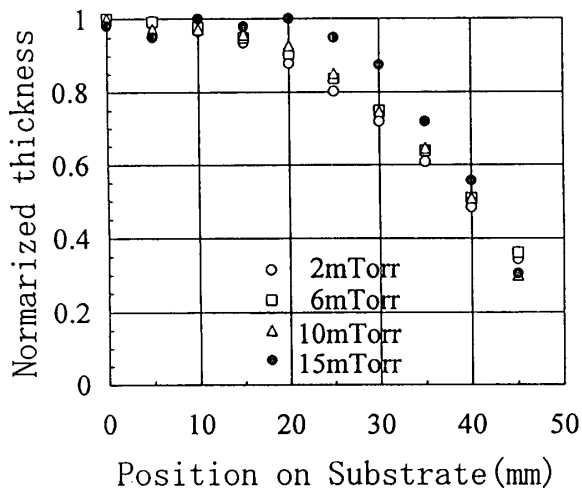


図6 膜厚分布 (計算値)

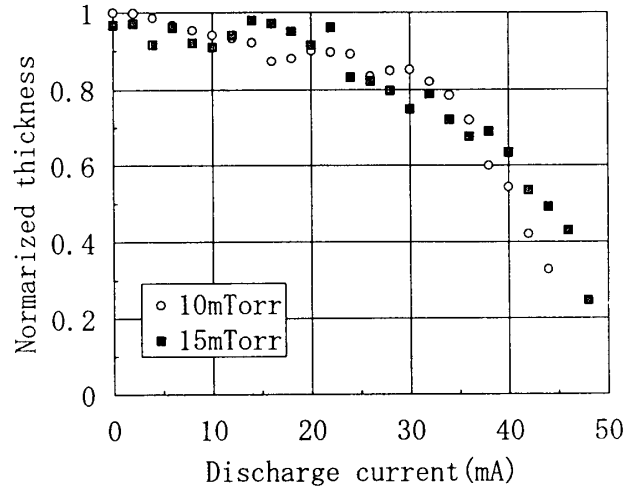
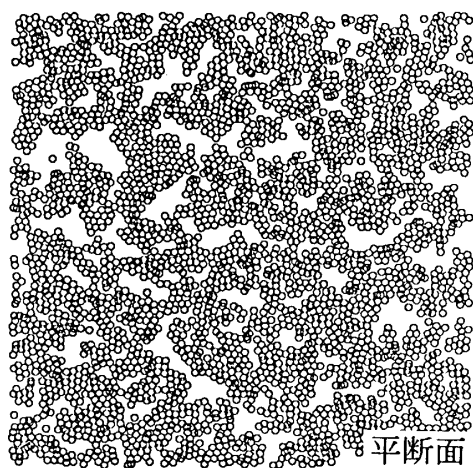
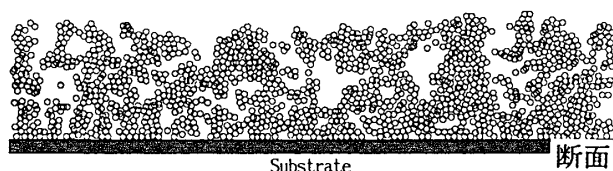


図7 膜厚分布 (実験値)

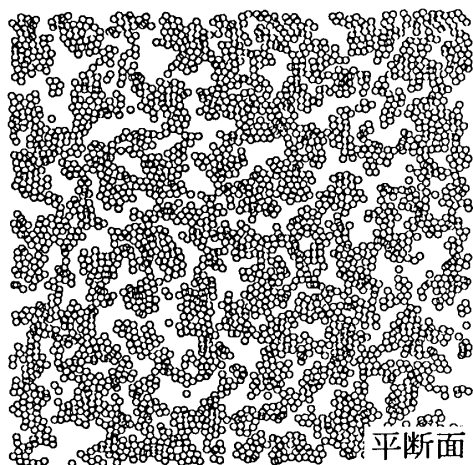
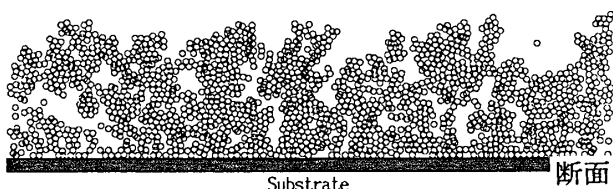
3. 2 スパッタ膜の微細構造

図8に計算機シミュレーションにより得られたスパッタガス圧2 mTorrと10 mTorrで堆積した膜の断面および平断面の様子を示す。このシミュレーションでは、堆積粒子は基板入射位置から3ヶ以上の粒子と接する位置に移動して付着すると仮定した。平断面の様子からガス圧を増加させると膜の密度は減少することが分かる。これは、スパッタガス圧が増加するにつれてスパッタ粒子の入射角度分布が広がったために、自己陰影効果がより顕著になったためと考えられる。このような変化は実際のスパッタ膜ではより顕著に認められ、低ガス圧領域で得られる緻密でなめらかな膜から、高ガス圧領域ではポラスで柱状構造がはっきりした膜へと変化することが知られている [3]。

図8のシミュレーションでは、スパッタ粒子が基板に入射するときの運動エネルギーや膜表面での熱励起による移動も考慮されていないため、膜構造は主に自己陰影効果の大小により決まってくることから、自己陰影効果を調べるモデルとして適当と考えられる。通常の膜堆積においては、付着後の粒子が熱励起により膜表面を移動することが知られている。図9に、付着後の粒子が熱励起されて表面を移動することを考慮したモデルにより堆積した膜の断面および平断面の様子を示す。このシミュレーションは、基板温度540℃、堆積速度100 Å/min、スパッタガス圧10 mTorr



(a)2mTorr



(b)10mTorr

図8 計算結果 (粒子の移動を無視)

で銅原子を堆積させた場合に相当している。膜の密度は付着後の移動がない場合と比べて著しく増加し、凹凸も減少することが分かる。この結果は、付着後の粒子の移動が膜の構造や密度を著しく変化させるものの、自己陰影効果による凹凸や、空孔の生成も同時に起こっており、所望の構造の膜を得るためには両者の制御が重要であることを示している。

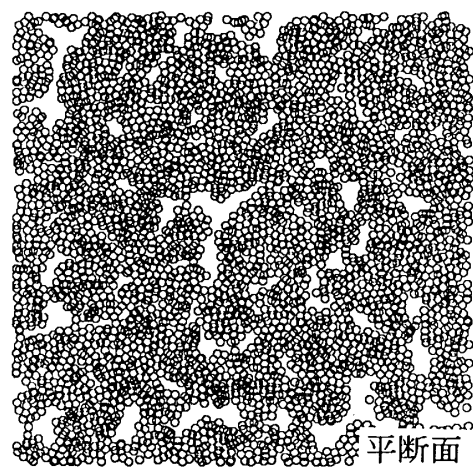
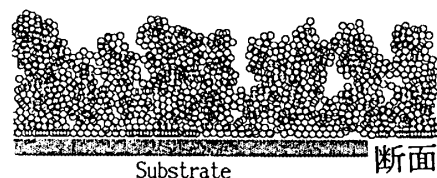


図9 計算結果 (粒子の移動を考慮)

4. 結論

本研究では、対向ターゲット式スパッタ法における薄膜堆積過程をモンテカルロ法を用いた計算機シミュレーションにより検討することを試み、以下の結果を得た。

(1) Motohiro と Turner のモデルに基づいた計算機シミュレーションは対向ターゲット式スパッタ装置における低ガス圧領域から高ガス圧領域までのスパッタ粒子の基板への入射状態を検討できる。

(2) 基板上へのスパッタ粒子の入射角度分布を用いて基板上に原子を入射させ、得られる膜の構造を検討する手法は、スパッタ膜堆積における自己陰影効果の影響を検討するために有効である。

(3) 膜表面で付着粒子の熱励起による移動が起こると、膜の密度は著しく増加するが、自己陰影効果により凹凸も形成される。

参考文献

- [1]M. Yoshikawa, G. Katagiri, H. Ishida, and A. Ishitani: J. Appl. Phys., 64(1988)p.6464
- [2]H. Seki, H. Ueda, K. Kuwahara, M. Odagiri, and T. Kunida: J. Mag. Soc. Jpn., 18(1994)Suppl. S1, p.541

- [3]Y.Niimura and M.Naoe:J.Appl.Phys.,
61(8)15 April,3155(1987)
- [4]M.Naoe and S.Kadokura:J.Magn.Soc.Japan.,
18,S1,331(1994)
- [5]T.Motohiro,and Y.Tada:
Thin Solid Films.,112,161(1984)
- [6]T.Motohiro:J.Vac.Sci.Technol.,4(2)189(1986)
- [7]G.M.Turner,I.S.Falconer,B.W.James,and
D.R.Mckenzie:J.Appl.Phys.,65(9)3671(1989)
- [8]D.Henderson,M.H.Brodsky,and P.Chaudhari:
Appl.Phys.Lett.,25(11)641(1974)
- [9]M.W.Thompson:Philos.Mag.,18,377(1968)
- [10]A.A.Abrahamson:Phys.Rev.,178(1)76(1969)
- [11]Karl-Heinz Müller:J.Appl.Phys.,vol.58,No.7
1 October(1985)
- [12]Karl-Heinz Müller:
J.Vac.Sci.Technol. A3(6),Nov/Dec(1985)
- [13]Karl-Heinz Müller:
J.Vac.Sci.Technol. A4(2),Mar/Apr(1986)
- [14]S.Müller,H.van Kranenburg and J.C.Lodder:
Thin Solid Films.,213,p143-153(1992)
- [15]星 陽一、鈴木 英佐:
月刊 IONICS.,第 21 巻別冊 1,p37-44,(1995)