18a-E9-2

プラズマ微細加工プロセスのモデリングと体系化：シリコンからメタル・高誘電体材料まで

Modeling of Surface Reaction Kinetics in Plasma Etching Processes for Silicon, Metal, and High Dielectric Constant (High-*k*) Materials

京大院工　○斧 高一
Kyoto Univ., ○Kouichi Ono
E-mail: ono@kuaero.kyoto-u.ac.jp

はじめに：プラズマを用いた微細加工 (プラズマエッチング) は今日、ULSI や MEMS デバイス作製など先端技術分野で不可欠のトップダウン微細加工プロセスであり、デバイスの微細化・高性能化に対応して引き続き、①微細パターンの加工性 (形状異方性と寸法精度，材料選択性)、②損傷性 (ダメージ) とともに、それらの ③チップ・セルサイズレベルでの微視的な均一性 (パターン密度・寸法・アスペクト比依存性)、④ウエハスケールの巨視的な均一性、および ⑤大口径基板に対する生産性 (プロセス速度，制御性，再現性)、の観点から不断の技術開発・改善が求められる。最近では、3 次元立体構造のフィン型トランジスタ (FinFET)、高誘電率 (high-*k*) ゲート絶縁膜やキャパシタ絶縁膜、メタル電極、低誘電率 (low-*k*) 層間絶縁膜など、新しいデバイス構造や材料への対応も求められる。このような状況の下、今後のナノスケールのプラズマエッチング技術の高精度化において、プラズマと表面との相互作用に関するより詳細で高度な理解と高精度な制御が一層重要となる。ナノスケールではプラズマから基板表面に入射する反応粒子の数が少なく (例えば、表面 1 nm^2 を深さ 1 nm 加工するに際して表面に入射するイオンは ＜100 個程度)、プラズマやプラズマ・表面相互作用の揺らぎ (不確定性／確率的要素) が加工精度に影響を及ぼす [1]。本講演では、塩素系・臭素系プラズマによる Si エッチングについて、プラズマ・表面相互作用のモデリングとプロセスの体系的な理解に関する筆者らの研究を紹介する。さらにメタル電極、高誘電率 (high-*k*) 絶縁膜のエッチングにも言及する。

モデリング・体系化：エッチング加工形状進展の経験的モデルは、連続モデルと離散モデルに大別される。いずれも、(1)微細パターン構造内における反応粒子の輸送、(2)パターン内の被エッチング表面での反応過程、および (3)被エッチング表面／界面の時間進展のモジュールから成り、入射粒子として、イオン、中性反応活性種、保護膜形成種 (堆積種、反応種) を考える [2]。従来の連続モデルでは、ナノスケールの極微細加工形状進展を再現することは難しい。筆者らは、モンテカルロ法を用いた独自の原子スケールセルモデル (ASCeM: atomic-scale cellular model) による 2D, 3D 形状シミュレーションを開発し、ナノスケールの Si エッチング形状 (CD ロス／ゲイン、マイクロトレンチなど) や形状のアスペクト比依存性のみならず、鋭い残渣やラフネス (周期的リップル構造を含む) など相互作用の揺らぎに起因する形状進展を再現した [3]。ASCeM はいわゆるセルモデルの改良であるが、被エッチング表面を含む解析領域を原子スケールの微小セルに分割して扱うこと、入射イオンの表面での反射・侵入を入射イオンと基板原子との間の二体ポテンシャルにもとづき連続的に計算することを特徴とする。一方、古典的分子動力学 (MD: molecular dynamics) シミュレーションは、エッチング表面反応過程に関する詳細な物理的・化学的理解、およびエッチング収率・しきい値やイオンの表面反射率など形状シミュレーションに必要な種々の基礎パラメータの取得や評価に不可欠である。MD は現時点で、イオンアシスト反応とともに重要な保護膜形成過程を十分考慮できず、また大規模・複雑なパターン構造にも対応できないが、10 nm あるいはそれ以下のレベルの極微細加工では、経験的モデルと相補的な MD ベースの形状シミュレーションが期待できる。

表 1. エッチング加工形状のモデリング

Empirical Model for Feature Profile Evolution during Plasma Etching

Module \ Model	Continuum	Discrete
Particle transport	Velocity distribution function	Monte Carlo
Surface reaction kinetics	Langmuir adsorption kinetics	Monte Carlo
Interface evolution	String model, Level set method, etc.	Cell model

Reactive Species during Si Etching in Cl_2 Plasmas

Role in surface Reactions \ Source		Feed gas	Reaction product	Impurity from walls & windows	Mask material
Neutral reactant		Cl_2, Cl			
Ion		Cl_2^+, Cl^+	$SiCl_x^+$, $SiO_xCl_y^+$	O_2^+, O^+	
Surface inhibitor	Depositive		$SiCl_x$, SiO_xCl_y		C_xH_y SiO_x
	Reactive			O_2, O	

[1] 斧 高一 ほか：表面科学 **34** (2013) 528.　[2] 斧 高一 ほか：プラズマ・核融合学会誌 **85** (2009) 165.
[3] H. Tsuda *et al.* : Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 08HC01.

© 2014 年　応用物理学会