

プラズマプロセスにおけるシミュレーション

○ 松永 史彦¹(1. ペガサスソフトウェア)

E-mail: matsunaga@psinc.co.jp

プラズマプロセス技術(プラズマ CVD, エッチング, スパッタリング等)においては, 通常ガス圧が 1Torr 以下の容器内に適当な方法で電力を注入して放電を起こす. そこで生成されるプラズマは電離度が低い (10^{-5} 程度) 非平衡・低温プラズマである. このプラズマ中で電界によって加速された高エネルギーの電子が分子と反応して, 成膜や表面の加工に必要なイオンやラジカル種が生成される. このようなプラズマのシミュレーションでは, 次の項目を考慮する必要がある: 1) 電子・イオン・中性粒子それぞれの輸送. 2) 各粒子種のエネルギー輸送. 3) 空間中での反応(電子-分子, 電子-イオン, イオン-分子, 分子-分子間の衝突). 4) 電磁場とのカップリング. 5) 固体表面における反応(境界条件).

1)と 2)に関しては粒子モデルによる定式化と流体モデルによる定式化があるが, ここでは後者について述べる. 支配方程式としては, a) 電子・各イオンに関する連続の式, b) 電子・イオンに関する運動方程式, c) 電子のエネルギー輸送方程式, d) 静電ポテンシャルに関するポアソン方程式, e) 各中性粒子種に関する連続の式, f) 中性粒子種の混合体としての運動方程式, g) 中性粒子種の混合体としてのエネルギー輸送方程式, を用いる. a) に関してはドリフト-拡散フラックス近似 $\Gamma_\alpha = \pm n_\alpha \mu_\alpha \mathbf{E} - D_\alpha \nabla n_\alpha$ がよく用いられる. ここで Γ は粒子フラックス, n は粒子数密度, \mathbf{E} は電場, μ は移(易)動度, D は拡散係数をそれぞれ表し, 添え字 α は粒子種を識別する指標である. \mathbf{E} は d) を解くことによって求められる. なお荷電粒子と中性粒子では運動の変化に関する緩和時間のオーダーが非常に異なるため(電子 ~ns, 分子 ~ms), 荷電粒子に関する a), b), c) と中性粒子に関する e), f), g) とは分離して解くのが普通である.(両者の計算を周期的定常状態にいたるまで反復する.) また 3) については各反応に関する衝突断面積あるいはレートコンスタントに関するデータをそろえておく必要がある. 特に電子-分子の弾性衝突は μ_e や D_e を求める際に必須であり, また電離や励起の衝突断面積はイオンやラジカルの生成率を求める際に無くてはならないデータである. 4) に関してはパワー投入機構が誘導結合型のプラズマ(ICP)やマイクロ波励起プラズマなどの場合, d)とは別にマクスウェル方程式を解いてプラズマに吸収されるパワー密度分布を求めて, それを c) にソース項として組み込むことが行われる. 5) は各粒子種ごとに表面での失活率(sticking coefficient)と反応による他粒子種の生成率を指定するが, それらを的確に与えることは実際問題として困難な場合が多いのが現状である.

PEGASUS/PHM モジュールは, 上に述べた方法で非平衡・低温プラズマのシミュレーションを行うソフトウェアである. 計算結果の一例として, メタンプラズマ(CCP: 温度 300K, 圧力 13.3Pa, 流量 400sccm, 駆動周波数 60MHz, パワー 1kW)における電子密度分布と各粒子種密度の最大値のグラフを以下に示す.

