

スパッタリング形成薄膜の機能性向上のための
シミュレーションによる成膜過程再現

Computer Simulated Reproduction of Film Deposition Process
for Improving the Functionality of Sputtering Formed Thin Films

阪大院工, °(M2) 加藤瑞葵, 杵本敏司, 奥川将行, 小泉雄一郎

Osaka Univ., °Mizuki Kato, Satoshi Sugimoto, Masayuki Okugawa, Yuichiro Koizumi

E-mail: mizuki.kato@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

Ar ガスを用いたスパッタリングは、ターゲットと基板間にプラズマを発生させ Ar⁺によるイオン衝撃を利用する成膜技術であり、電極膜、磁性膜などの薄膜形成に利用される。しかし、成膜の過程は、材料原子の膜化は Ar 原子を巻き込みつつ 10⁻⁹ 秒スケールで瞬時に原子レベルで起こり、その場観察は難しい。特に、膜の形成途中に Ar⁺アシスト(膜表面への Ar⁺衝突によるエネルギー付与)を行うと、薄膜と基板の密着性向上や膜の表面粗さの減少などの効果が見出されているが、この成膜過程の理解は十分とは言えない。成膜過程の十分な理解により、所望の機能性の実現のための成膜制御に関する知見を得られること、より実用的な薄膜形成手法の提案が期待される。そこで本研究では、Ar⁺アシスト効果による膜の結晶配向性に着目し、実験とシミュレーションの比較を行うことで、ターゲットのスパッタも含めた薄膜形成過程の全体を可視化することを目的とする。

実験では、両極性低周波パルス電源を用いた。この方式では、スパッタリングと Ar⁺アシストのプロセスを1台の電源で遂行・制御できる。

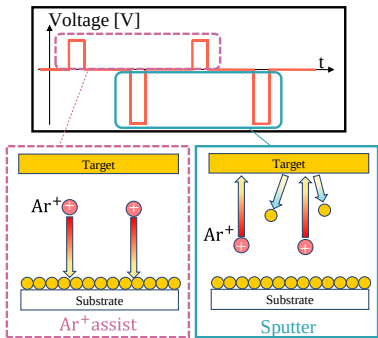


Fig.1. Schematic of sputtering and Ar⁺ assist

基板は Si (1 0 0)ウェハ(φ10×t 0.5 mm), ターゲットは Au (φ50mm 純度 99.95%) を用いた。ス

パッタのためのパルス電圧は一定にし、Ar⁺アシスト効果をもたらすパルス波高電圧 Va を 0V~450V の範囲で設定した。作製した薄膜試料について、X 線回折 (XRD) 測定および X 線反射率 (XRR) 測定を行った結果、Va = 300 [V]の場合に結晶粒径が大きくなる傾向が得られた。

シミュレーションでは、分子動力学 (MD) 法を用いた。まず、基礎的な知見を得るために堆積過程とスパッタ過程に分けてシミュレーションを行った。Table 1 に条件を示す。

Table 1 Simulation conditions

Au-Au potential	Embedded Atom Method (EAM)
Au-Ar & Ar-Ar potential	Lennard-Jones potential
Au lattice constant a_{Au}	4.065 Å
Atomic weight of Au m_{Au}	196.96657
Atomic weight of Ar m_{Ar}	39.948
Time step	1 fs/step
Energy of deposited atoms	a) 1 eV b) 5 eV c) 10 eV
Interval to deposit	a) 200 step b) 200 step c) 250 step
Sedimentary substrate	Au polycrystal
Energy of Ar atom to sputter	10~390 eV
Target crystal orientation	{100} {110} {111}

スパッタ過程再現では、エネルギーの異なる Ar を Au 単結晶面に打ち込むシミュレーションを行った。これより、(1 1 1), (1 1 0), (1 0 0) の順にスパッタされる原子が多いという結果を得た。堆積過程再現では、基板は Au 多結晶基板とし、スパッタ Au 原子の飛来時間間隔は堆積後の膜表面の温度緩和が適正になるように決定した。計算結果の一例として、エネルギーが 10 eV から 1eV に小さくなると表面の最大粗さは 3.5Å 程度大きくなった。講演時に詳しい結果を示し実験データの比較等の考察する予定である。

謝辞 本研究の一部は (公財)池谷科学技術振興財団の助成を受けた。