

c-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットの評価

北海道大学 ○廣澤 憲麻, 室蘭工業大学 佐藤 孝紀, 川口 悟
要旨

半導体デバイス製造における正確なプラズマエッチングのため、c-C₄F₈ガスの正確な電子衝突断面積セットが要求されている。しかしながら、現在までに報告されている断面積セットには、考慮されている各断面積の形状やその数に違いが見られる。そこで、Monte Carlo Simulation によって求められた電子輸送係数とその実測値との比較により、これまでに報告されているc-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットの評価を行ったので、その結果について報告する。

1. はじめに

プラズマエッチングは半導体デバイス製造において不可欠なプロセスであり、半導体集積回路における、絶縁膜下にある半導体素子の各電極への通電経路であるコンタクトホール形成などにおいて、炭素およびフッ素で構成されるフルオロカーボンガスがプラズマエッチングに用いられている。特に、c-C₄F₈ガスを含む放電プラズマは、他のフルオロカーボンガスを用いた場合と比べて、下地のSiに対して高い選択比が得られることから、広く用いられている^[1]。フルオロカーボンガスプラズマ中のCF系のラジカルやイオンの生成量とその比がエッチングの形状に影響を及ぼすため、装置パラメータの最適化のために、実験だけでなく、シミュレーションも盛んに行われている。例えば、Haidar *et al.*^[2]はc-C₄F₈プラズマのシミュレーションを行っており、ガス圧および入力電圧に対するF、CFおよびCF₂ならびに正イオンのフラックスを求めている。正確なシミュレーションを行うためには、プラズマ中の電子群のふるまいを表す電子輸送係数、および各生成物の数密度の時間変化を表すレート係数が必要である。これらの係数は、電子とガス分子の衝突確率を表す電子衝突断面積を衝突の種類毎に示した電子衝突断面積セットから求めることができるため、正確な係数を求めるには、正確なc-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットが要求されている。

現在までに、Itoh *et al.*^[3]、Font *et al.*^[4]、Yamaji and Nakamura^[5]およびLiu and Xiao^[6]が Boltzmann 方程式解析または Monte Carlo simulation を用いた電子スオーム法によって、c-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットを推定している。また、推定した電子衝突断面積セットを用いて得られる電子輸送係数の値が実測値と同様の傾向を示すことも報告されている。しかし、これまでに報告された電子衝突断面積セットを比べると、同じc-C₄F₈ガスにもかかわらず、用いられている電子衝突断面積の形状、大きさおよびその数に相違があるため、使用する電子衝突断面積セットによって、電子輸送係数およびレート係数の計算結果が異なってしまう。従って、この電子衝突断面積の差異が、使用すべき電子衝突断面積セットの選択を困難なものとしている。

本研究の目的は、現在までに報告されているc-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットの妥当性を評価することである。このため、従来のc-C₄F₈ガスの電子衝突断面積セットを用い、Monte Carlo simulation によって電子輸送係数を求めるとともに、実測値との比較を行った。

2. 電子輸送係数の計算方法

印加電界により飛行する電子一つ一つのふるまいは、擬似乱数により確率的な事象の生起を模擬し、複数回試行による統計値から数値的に普遍的物理量を求めるモンテカルロ法によりシミュレートした。Monte Carlo simulation では、

運動量移行衝突

電子の運動の方向のみが変化

電子付着衝突

衝突した電子が分子に取り込まれて
負イオン化

振動励起衝突

分子の振動状態が変化

電子励起衝突

分子の電子状態が変化し、電子状態
によっては解離が発生

電離衝突

衝突された分子から電子が放出され
正イオン化

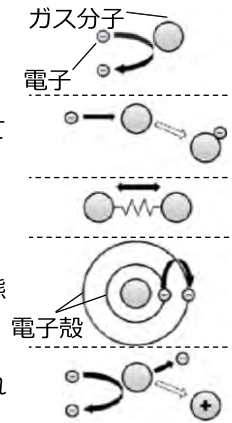


図1 電子とガス分子の衝突の種類

放電プラズマ中における電子運動の素過程である、飛行、衝突および散乱について、それぞれ、飛行時間の決定、衝突の発生の有無、ならびに衝突の種類決定、および衝突後の電子の散乱方向の決定を擬似乱数で行う。擬似乱数は Mersenne Twister 法^[7]により生成されたものを用い、他の方法により生成された擬似乱数よりも非常に長い周期と高い不規則性を保障した。

本手法では、まず Null Collision 法^[8]によって電子の飛行時間および衝突の発生の有無を決定し、古典力学と電磁気学にもとづいて電子の位置、速度およびエネルギーについて計算する。その後、図1に示される衝突の種類判定を行い、判定された各衝突による運動方向の変化(散乱)やエネルギーの減少、電子数の増減を反映させ、再度、飛行時間の決定と衝突判定を行う。これを着目電子が消滅、またはシミュレーション時間が経過するまで繰り返し反復する。また、以上の過程を、全ての電子に対して行う。

以上のシミュレーション結果から、電子輸送係数の算出に必要なサンプリングデータを用い、電子群の平均速度を表す電子ドリフト速度 W 、電子群の電極方向の広がりを表す縦方向拡散係数 ND_L 、および電離の起こりやすさを表す実効電離係数 $(\alpha - \eta)/N$ を求めた。ここで N は気体分子数密度で、 $N = 3.535 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (0 °C, 1 Torr) としている。

本研究では上述の手法により、従来研究に比べ、適切な放電基礎過程を考慮したシミュレーションモデルを適用でき、使用した電子衝突断面積セットによる電子輸送係数を正確に求めることができる。

3. 断面積セットの評価および考察

上述した手法による Monte Carlo simulation を、表1のシミュレーション条件で行った。また、シミュレーション時間および初期電子数については、プラズマが平衡状態とな

り、サンプリングデータの数値が安定となるような値を電界ごとに決定した。

図2、図3および図4はそれぞれ、これまでに報告された電子衝突断面積セットを用いて、本 Monte Carlo simulation によって得られた電子ドリフト速度 W 、縦方向拡散係数 ND_L および実効電離係数 $(\alpha - \eta)/N$ の値を、実測値^[9]と併せて示したものである。ここで E/N は電界を表す。

図2より、Itoh *et al.* ならびに Yamaji and Nakamura の電子衝突断面積セットによる計算値は、高い E/N において、実測値と異なった傾向を示す。また、Font *et al.* ならびに Liu and Xiao の電子衝突断面積セットによる計算値は、低い E/N において、実測値よりも小さい値を示した。また、図3より、Itoh *et al.* ならびに Font *et al.* の電子衝突断面積セットによる計算値は、実測値から大きく外れており、Yamaji and Nakamura ならびに Liu and Xiao の電子衝突断面積セットによる計算値も、実測値が報告されている全ての E/N の範囲において、実測値と同様の傾向を示しているとはいえない。さらに図4から、Yamaji and Nakamura の電子衝突断面積セットによる計算値は、全ての E/N において、実測値よりも高い値となっている。また、Itoh *et al.* ならびに Liu and Xiao および Font *et al.* の電子衝突断面積セットによる計算値は、それぞれ、 $E/N \leq 700$ Td および $E/N \leq 1400$ Td において、実測値と一致している。しかし、 E/N の増加にともなって、計算値と実測値の差が広がる傾向が確認された。

これらから、従来報告されてきた c-C₄F₈ ガスの電子衝突断面積セットを用いて得られた電子輸送係数の計算値は、広い範囲の電界において、必ずしも実測値と同様の傾向を示すとは限らないということが確認でき、より正確なシミュレーションモデルを考慮した電子衝突断面積セットの推定が必要であることがわかった。

4. おわりに

Monte Carlo simulation によって電子輸送係数を求め、その実測値と比較することで、現在までに報告されてきた c-C₄F₈ ガスの電子衝突断面積セットの評価を行った。本研究では、より適切な放電基礎過程を考慮し、また、Mersenne Twister 法による高品質な擬似乱数を使用することで、より正確な Monte Carlo simulation を可能とした。その結果、報告されている c-C₄F₈ ガスの電子衝突断面積セットを用いて求められる電子輸送係数の計算値は、必ずしも実測値と同様の傾向を示すとは限らないことが確認できた。

参考文献

- [1] S.-X. Zhao *et al.*: Bulk Plasma fragmentation in a C₄F₈ inductively coupled plasma: A hybrid modeling study J. Appl. Phys. **117**, 243303 (2015).
- [2] Y. Haidar *et al.*: SF₆ and C₄F₈ global kinetic models coupled to sheath models, Plasma Sources Sci. Technol. **23**, 065037 (2014).
- [3] H. Itoh *et al.*: Electron transport coefficients in SF₆ and c-C₄F₈ mixtures, J. Phys. D **24**, 277 (1991).
- [4] G. I. Font *et al.*: Cross-section set and chemistry model for the simulation of c-C₄F₈ plasma discharges, J. Appl. Phys. **91**, 3530 (2001).
- [5] M. Yamaji and Y. Nakamura: Swarm derived electron collision cross section set for the perfluorocyclobutane molecule, J. Phys. D **37**, 1525 (2004).
- [6] X. L. Liu and D. M. Xiao: Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in c-C₄F₈, Eur. Phys. J. Appl. Phys. **38**, 269 (2007).
- [7] M. Matsumoto and T. Nishimura: Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator, ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation Vol. 8, No. 1, January pp.3-30 (1998).
- [8] H. R. Skullerud: The Stochastic Computer Simulation of Ion Motion in a Gas Subjected to a Constant Electric Field, J. Phys. D **1**, 1567 (1968).
- [9] 例えば、M. S. Naidu *et al.*: Electron transport, attachment and ionization in c-C₄F₈ and iso-C₄F₈, J. Phys. D **5**, 741 (1972).

表1 シミュレーション条件

ガス圧	1 Torr
温度	0 °C
電界	直流かつ一様
空間	自由空間
初期エネルギー (電子)	0 eV
初期位置 (電子)	(x,y,z) = (0,0,0)
初期速度 (電子)	(u _x , u _y , u _z) = (0,0,0)

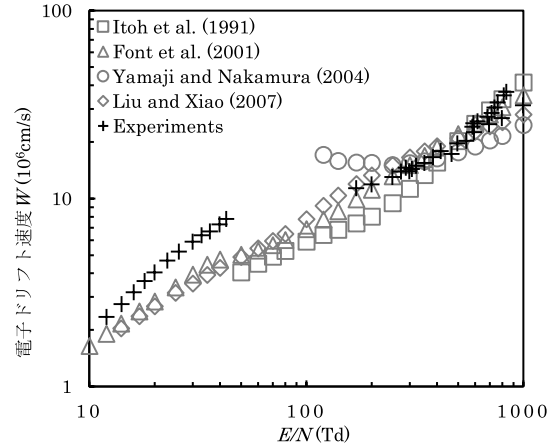


図2 電子ドリフト速度 W

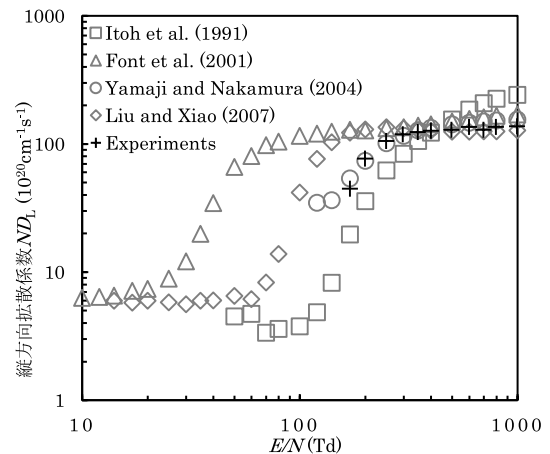


図3 縦方向拡散係数 ND_L

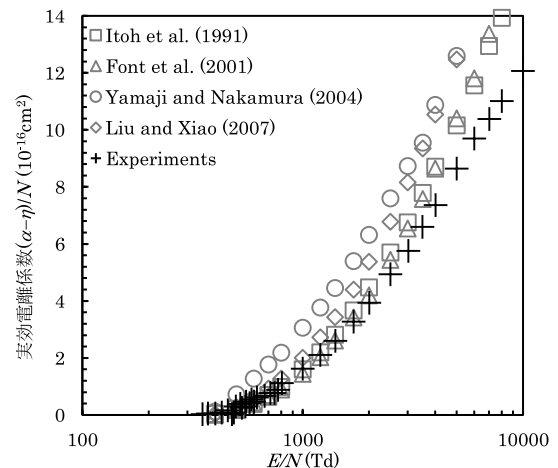


図4 実効電離係数 $(\alpha - \eta)/N$