

## 学術論文

マイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置の数値解析コードにおける  
プラズマ電子密度分布の計算も含めた解析スキームの検討

## Numerical Simulation Code for Microwave Excited Surface Wave Plasma Semi-conductor Process

畑口雅人<sup>\*1</sup>(正員), 西川崇之<sup>\*2</sup>, 川口秀樹<sup>\*3</sup>(正員), 鏡 慎<sup>\*3</sup>

Masato Hataguchi (Mem.), Takayuki Nishikawa, Hideki Kawaguchi (Mem.), Shin Kagami

The microwave excited surface wave plasma process enables us to do less damage processing by active neutral gaseous and wide area processing. On the other hand, the surface wave plasma is strong coupling phenomena of microwave and plasma, and detail understanding of the phenomena by any pure analytical methods is not easy. Authors have been working in development of numerical simulation tool for this equipment by using FDTD method. So far the FDTD method with appropriate plasma macro model which is partially based on experimental data of electron density was proposed and good agreements with experimental results was obtained. As the next stage of the development of the numerical code, this paper presents estimation of electron density distribution in simulation.

**Keywords:** Plasma semi-conductor process, Surface wave plasma, FDTD simulation, Self-consistent analysis

## 1 はじめに

プラズマ半導体プロセスの飛躍的な高効率化をめざし、マイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置の開発が行われている<sup>[1-2]</sup>。マイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置では、マイクロ波により薄い面状の高密度プラズマを発生させ、そこで生じる中性励起粒子を用いてウェハーなどの半導体処理が行われる。中性励起粒子を用いるために半導体基板へのダメージが少なく、かつ、プラズマは広い面状となるため大口径処理が可能となるなどの効率化が期待されている。しかしながら、2.45 GHz のマイクロ波の波長が装置サイズと同程度であるので、マイクロ波の強度分布は装置形状やサイズに敏感に影響を受けることになり、これにより、プラズマの発生形態も装置形状やサイズに強く依存するため、実験的・試行錯誤的に適切な装置形状を決定するのが容易ではないという問題点もある。実際、これまでの同装置の製作は、設計者の知識と経験を頼りに、試行錯誤的に表面波プラズマ分布を発生させる装置サイズが決定されていた。これに対し、著者らは、装置内部で発生しているマイクロ波とプラズマが結合した現象を把握し、適切な装置形状の設計を行うための明確な指針を得るべく、FDTD法を用いた同装置の数値解析コードの開発を行ってきた<sup>[3-7]</sup>。と

りわけ、これまで、マイクロ波中のプラズマの振舞いに対するマクロモデルを提案することにより、実際の装置で表面波プラズマを発生させることのできたサイズやプラズマ密度分布など、種々の実験結果の再現が可能なることを示した。しかしながら、これまでの数値解析では、プラズマの電子密度分布に関しては、同装置での実測値を用いており、必ずしもそれだけで独立した数値シミュレーションとなっていなかった。これに対し、本研究では、プラズマの電子密度分布もあらかじめ設定することなしに、シミュレーションの中で決定しながら装置を解析するスキームについて検討したので報告する。

## 2 マイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置

本論文で取扱うマイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置の外観を Fig.1 に示す。マグネトロンで発生した 2.45 GHz のマイクロ波は、方形導波管 TE10 モードで同図上部のモードコンバータに送られ、そこで、円筒導波管 TM01 モードに変換された後、コニカルホーンにより大口径化され、誘電体板を介して酸素等のガスの満たされた空洞に注入される。そしてこのマイクロ波がガスの電離を誘起しプラズマを誘電体板下の空洞内に発生させる。このとき、プラズマ密度  $n_e$  から決まるプラズマ周波数  $\omega_p$ ,

$$\omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n_e}{\epsilon_0 m_e}} \quad (1)$$

連絡先：畑口雅人，〒071-8142 旭川市春光台 2 条 2 丁目 1-6，旭川工業高等専門学校 電気情報工学科，  
hataguti@asahikawa-nct.ac.jp

\*1 旭川工業高等専門学校 \*2 沖電気工業(株) \*3 室蘭工業大学

(ただし,  $e$  は素電荷,  $m_e$  は電子質量,  $\epsilon_0$  は真空の誘電率) が, マイクロ波周波数  $\omega$  より低いと, マイクロ波はプラズマ中を伝播し空洞全体に渡って分布し (以下, 体積波モードと称する), 一方,  $\omega_p$  がマイクロ波周波数  $\omega$  より大きいと, マイクロ波の電場を打消すよう十分早くプラズマが追従するためマイクロ波がプラズマ中に進入できなくなり (カットオフ状態), 結果として, 誘電体板直下の空洞上部に薄く広く高密度で局在するプラズマ (以下, 表面波プラズマと称する) が発生する (Fig.2)。このとき, マイクロ波の強度分布は, 円形導波路長, コニカルホーン長, 誘電体板厚さ, 空洞部分などのサイズ, さらには, 誘電体板の誘電率に敏感に影響され, 数 mm のサイズの違いで大きく変わってしまう。また, このマイクロ波分布はプラズマの発生にも大きく影響するため, したがって, プラズマが体積波モード, 表面波モードのどちらかになるかも, 装置サイズのわずかの違いに左右されることになる。とりわけ, この装置は全体がアルミで製作されており, 誘電体板もほぼ無損失であるため, マイクロ波電力はプラズマ領域においてのみ消費されるので, このプラズマの発生形態によっては, マイクロ波エネルギーのほとんどが再度マグネトロンにもどり, マグネトロンに深刻なダメージを与えてしまう危険性も

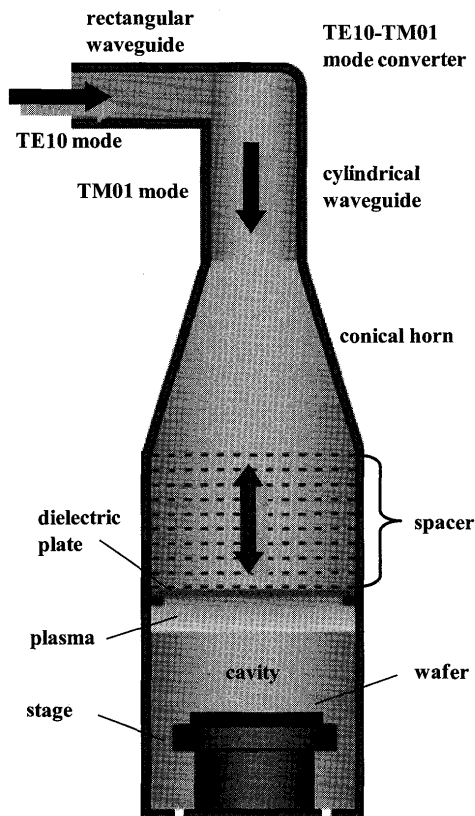


Fig.1 Overview of surface wave process

生じる。

このようにいろいろな要素が複雑に影響しあうシステムにおいても安定的に表面波プラズマを発生させる装置を製作するためには, 数値シミュレーションにより装置内部の現象を詳細に把握することが, 装置の設計に際し重要となる。

### 3 プラズマ半導体処理装置数値解析手法

#### 3.1 軸対称FDTD法

図1のマイクロ波励起表面波プラズマ半導体処理装置に対し, 本研究では, マイクロ波の挙動をFDTD法を用いて解析する。この際, とりわけ, 同装置内のマイクロ波やプラズマに直接影響するのは, マイクロ波が円筒導波管で TM01 モードとなった以降の下流部分のみであり, この部分では系は軸対称であるので, 計算の高速化の観点からマイクロ波の数値解析は, 以下の  $E_r$ ,  $E_z$ ,  $H_\theta$  を未知数とする軸対称TMモードのマクスウェル方程式に対しFDTD法を適用し行う,

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial H_\theta}{\partial t} &= -\left( \frac{\partial E_r}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial r} \right) \\ \epsilon \frac{\partial E_r}{\partial t} &= -J_r - \sigma E_r - \frac{\partial H_\theta}{\partial z} \\ \epsilon \frac{\partial E_z}{\partial t} &= -J_z - \sigma E_z + \left( \frac{\partial H_\theta}{\partial r} + \frac{1}{r} H_\theta \right) \end{aligned} \quad (2)$$

このとき, (2) には, 誘電体や導体壁に導電率がある場合に流れるオーム電流  $\sigma \mathbf{E}$  の他に, 後述のプラズマ中を流れる電流  $\mathbf{J}$  を分けて明示してある。

上部の方形導波管を取り払い2次元軸対称性をもつ簡単化した数値モデルを Fig.3 に示す。数値シミュレーションの際のマイクロ波に対する境界条件としては, 装置を取り囲む壁やステージは全て完全導体, 誘電体は導電率ゼロとし, 上部の円筒導波管の開口部には TM01 モードの位相速度に対する Mur 1次吸収境界条件を適用した。また, 円筒導波管の中段に, TM01

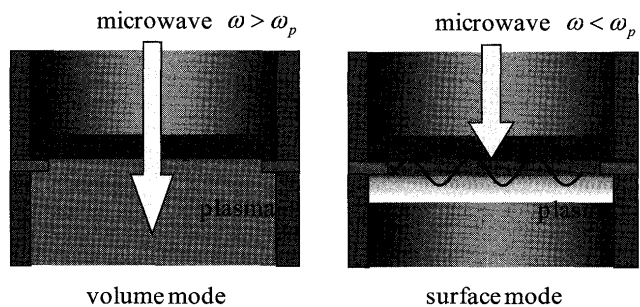


Fig.2 Volume and surface mode of plasma

モードの適切な強度のマイクロ波を励起することにより、1 kW マイクロ波入力を模擬する。さらに、パワー入力位置を挟むような上下の位置でポインティングベクトルを計算することにより、それぞれ空洞からの反射エネルギーおよび入射エネルギーを見積り、これらからプラズマがどの程度マイクロ波パワーを吸収するかを計算する。

### 3.2 プラズマのマクロモデル化

後述のように、本数値解析では、マイクロ波のシミュレーション自体、数十万～数百万回オーダーのタイムステップ繰返し計算を要し、非常に高コストな計算であるため、FDTD法におけるプラズマの取扱いにおいては、下記のようにプラズマをマクロモデル化して、(2) 右辺第一項のプラズマ電流を介してのみマイクロ波への影響するものとして取扱う。

従来このようなFDTD法におけるプラズマのマクロモデルとしては、プラズマ電流  $\mathbf{J}$  が、

$$\frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} = -\frac{n_e e^2}{m_e} \mathbf{E} - \nu_{\text{eff}} \mathbf{J} \quad (3)$$

なる方程式を満たし、これを (2) と連動させ計算を行う電磁流体モデルがあった<sup>[8]</sup>。しかしながら、このモ

デルを用いると、どのようなケースでもマイクロ波のエネルギーは、せいぜい 50% 程度しかプラズマに吸収されない。一方、実験では、入力マイクロ波エネルギーのほとんどが表面波プラズマに吸収されることがわかっており、(3) では実験を再現できないことが判明していた。このため、著者らは、(3) を修正し、プラズマとマイクロ波が共振し、エネルギーを効率よく吸収する機構を設けるべく、新たに、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \gamma \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) + \omega_0^2 \mathbf{P} &= \varepsilon_0 \omega_p^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial \mathbf{P}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (4)$$

なる分極ベクトル  $\mathbf{P}$  を用いたモデルを提案した<sup>[5]</sup>。実際、このモデルにより、適切な装置サイズ (Fig.3 のスペーサ長、誘電体板厚さなど) では、マイクロ波エネルギーがほぼ 100% 表面波プラズマに吸収される様子が再現でき、しかもそのサイズは数 mm の誤差で実験で用いた装置のものと一致することも確認した<sup>[6]</sup>。これにより、表面波プラズマが発生しやすい電磁場プロファイルなど、装置設計に際してのある程度の指針を得ることが可能になった。

### 3.3 プラズマ電子密度も含めた数値解析スキーム

上記の (4) のマクロモデルを用いた装置の数値解析コードでは、表面波モードが発生するスペーササイズなど、重要な実験結果を再現できることが確認できていたものの、その一方で、プラズマの電子密度分布  $n_e$  はあらかじめ決定することのできないパラメータとして残っていたため、数値解析に際しては実験での測定値を設定して計算が行われ、必ずしも実験から完全に独立した数値解析ツールにはなっていなかった。すなわち、本当の意味で、マイクロ波励起表面波プラズマ処理装置の設計支援ツールとして用いるためには、プラズマ中の電子密度も含めすべてを数値シミュレーションから決定できるスキームを実現する必要がある。

プラズマ電子密度分布も含めた数値解析コードの開発にあたって、これまでの実験やシミュレーションで判明している関連事項を以下にまとめる。

- (A) 実際の装置では、表面波モードと体積波モードが発生するときの違いは、スペーサ長と誘電体板の材質および厚さの違いのみであり、マグネロン出力、プラズマガスの種類や圧力等、他の条件はすべて共通であった<sup>[2]</sup>。
- (B) 表面波モードが発生したときの空洞は、非常に

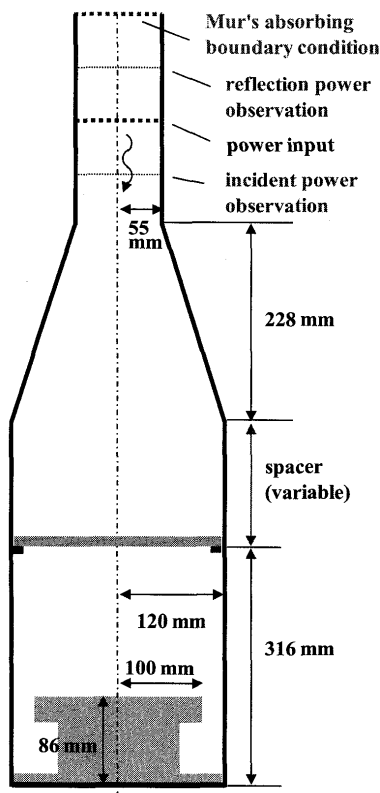


Fig.3 Axis-symmetric numerical model

高いQ値になっており、よって、強い電場が発生していたと考えられ、一方、体積波モードが発生したときの空洞は低Q値になっていた<sup>[6]</sup>。

(C) 表面波モードと体積波モードの境目のプラズマの電子密度は、2.45 GHz のマイクロ波に対しては、(1) より、 $n_e = 7.45 \times 10^{16} [1/m^3]$  であり、これより高いとカットオフ状態、すなわち、表面波モードになり、低いと体積波モードになる。

(D) シミュレーションでは、表面波モード発生時のプラズマ電子密度は  $1.0 \times 10^{17} [1/m^3]$  (実験値採用)、そこでの電場強度は  $16.5 [kV/m]$  であった<sup>[6]</sup>。

まず、気体の電離が電場による電子の加速および原子との衝突により発生することから、より強い電場が発生すればするほどプラズマ中での電離過程が進み

(Fig.4 参照)、より高密度なプラズマを発生させると考えられる。したがってまた、(A), (B) より、表面波モードが発生するかどうかは、空洞のQ値が高い、すなわち、強い電場が形成されるような空洞形状かどうかで決まるものと考えられる。この考え方をベースに、マイクロ波の電場強度に応じて適切なプラズマの電子密度を決定する手続きを従来の解析コードに組み入れ、電子密度の設定もシミュレーションの中で行えるよう数値解析コードの改良を行う。このとき、上記の手続きに加え、数値シミュレーションを行う上でもう一つ必要な作業が、電場強度を電子密度推定に用いる際の時間および空間的な平均化である。すなわち、Fig.4 のような電場による気体の電離プロセスにおいて、局所的な電場の強度がそのままその場所の電子密度に関係づけられるとは考えづらく、電離過程が十分進むには、ある程度の時間経過、さらに空間的な広がりが必要であり、それらが時間的・空間的に積算されたうえで電場から電子密度が決定されるものと考えられる。さらに、マイクロ波周期は、数 100 ピコ秒オーダーなので、この時間レンジで電子が自由加速できる距離は高々十数 cm 程度であることを考えると、電離過程が指数関数的に進む前に電場の極性が反転してしまうことはありうるため、電場強度から電子密度分布

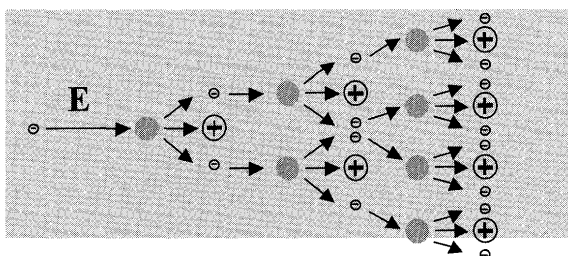


Fig.4 Ionization process of gaseous

を算出する方法についても、Fig.4 のように電子密度は指数関数的に電場に依存することではなく、もっと緩やかな依存性になっていると考え、Fig.5 のような概形のグラフを仮定する。すなわち、基本的には電界強度と電子密度は正の相関関係にあるとしながらも、極端に電場が強くて電離はそれほど進まず、ある程度強い電場に対しては電子密度は飽和するとしうえて、これより弱い電場の値に対する電子密度の依存性はそれにスムーズに接続するような2次式の関係式とした。その上で、上記の解析スキームにより実際にシミュレーションを行うには、未だ、

(a) Fig.5 横軸に使う電場の時間的に平均化する長さ

(b) 同じく、空間的に平均化する距離

(c) Fig.5 の飽和領域の範囲とその電子密度

の具体的な値が未定であり、これらを決定する必要がある。このうち、(a) 電場の時間的平均に関しては、マイクロ波の周期以上に電子密度が急激に変化はしないものとして、1周期ごとに平均化を行うこととした。一方、(b), (c) に関しては、これ以上マクロモデル的な考察から具体的な値を特定する材料はないため、本研究では、最初、(C), (D) を参考にしながら大まかな値を設定し、その後、シミュレーションにより、実験を再現できる適切な値を探し出して決定することとし、これを次節で説明する。

本節最後に、本数値解析コードの計算全体の流れをまとめる。中心的な計算の流れは、(2) のFDTD法によるマイクロ波シミュレーションとし、これと併しよに (4) の電流・分極ベクトルの計算を行う。さらに、その中で電場の計算が終わるごとに、これを時間・空間で平均化し、Fig.5 に従って、その場所でのプラズマ電子密度を更新し電子密度分布を設定しなおす。そして、これらの処理を繰り返しながらマイクロ波とプラズマの時間発展のシミュレーションを定常状態になるまで行う。

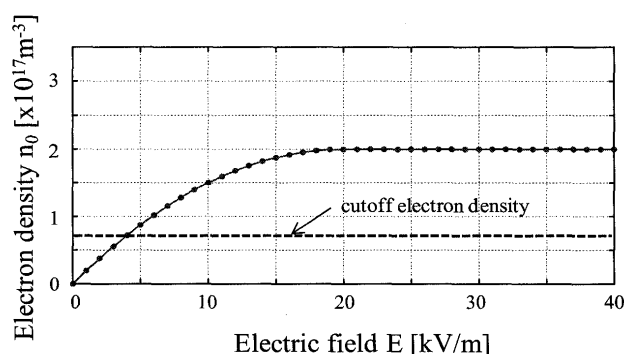


Fig.5 Relation between electric field and electron density

#### 4 数値解析

上述の電子密度の計算方法を実装し改造した数値解析コードを用いて、プラズマのない状態（全領域で電子密度がゼロ）から表面波モードの発生を再現すべく、実験と同様、2.45GHz, 1 kW のマイクロ波入力、スペーサ長 90mm, 誘電体板に比誘電率 9.7, 厚さ 8 mm のアルミナを用いた装置を想定してシミュレーションを行う。具体的には、Fig.3 の数値モデル全体が真空の状態、上部円筒導波管からマイクロ波の入力を開始し、その後、空洞内に蓄えられるマイクロ波のエネルギーが一定値に達したところで定常状態と見なし計算を終了する。この定常状態に達するまでの全タイムステップ数は、空洞サイズやプラズマの発生状態にも依存するが、200 万回行えばすべてのケースで定常状態に達したため、以後すべてこの値とした。また、1 タイムステップの時間刻み  $\Delta t$  は、グリッドサイズ  $\Delta l = 2\text{mm}$  に対するクーラン条件を満たすよう  $\Delta t = 3.32 \times 10^{-12} \text{sec}$  とした。定常状態で表面波プラズマが発生したかどうかの判断には、誘電体板直下で薄く強い電場分布になっているかどうかを見るとともに、表面波プラズマ特有の状況として、マイクロ波エネルギーがほぼすべてプラズマで消費されているかどうか、すなわち空洞からのマイクロ波の反射がほぼゼロとなっているかどうかを調べた。

##### 4.1 電場-電子密度曲線と空間的平均化距離の特定

前節の (c) Fig.5 の曲線の形を決めるための飽和領域の範囲とそこでの電子密度の値の決定に際しては、同じく前節の (D) で示した数値が唯一参考となり、少なくとも電場強度が 16.5 [kV/m] でプラズマ電子密度が  $1.0 \times 10^{17} [1/\text{m}^3]$  となる点を通るように設定する必要がある。しかしながら、この点を通るような曲線を指定しても、シミュレーションによる定常状態の結果は、すべてのプラズマ領域で電子密度がカットオフとなる値を下回ってしまい、すなわち、表面波モードは発生しなかった。一方、電場強度に対する電子密度の値を大きく設定しすぎると、時間発展の計算は発散し定常状態は得られなかった。このように、さまざまな飽和領域開始位置や電子密度の値に対しシミュレーションを行った結果、実際に表面波モードが発生することが確認されたのが、Fig.5 の電場強度 20.0 [kV/m] で電子密度  $2.0 \times 10^{17} [1/\text{m}^3]$  の点が飽和領域境界になるような曲線であったため、以後、同図の特

性を電場強度-プラズマ電子密度特性として採用した。

さらに、もう一つの未知のパラメータの (b) 空間的な平均化距離の決定方法を説明する。空間的に平均する距離の一つの尺度として、Fig.4 の電離プロセスの空間的な広がりと考えられ、この定量的な目安として、ここでは、次式の電子の平均自由行程  $\lambda_m$  を用いた、

$$\lambda_m = \frac{1}{2} \frac{eE}{m_e} \left( \frac{1}{\gamma} \right)^2 \quad (5)$$

Fig.6 には、本解析コードで空間的な平均化を行わないでシミュレーションした場合に、各周期ごとに (5) から計算される平均自由行程の最大値を記録し、その発生頻度をまとめたものを示す。横軸は平均自由行程をグリッド数に換算したものとなっている。この図から比較的高い確率で発生する平均自由行程は 10 grid から 16 grid となっており、この付近に適切な平均化距離が存在するものとして、それぞれシミュレーションにより調べた。実際、16 grid の場合、反射率 20% 前後となるなどこの近辺では比較的微波エネルギー吸収率のよい表面波の発生が確認されたが<sup>[7]</sup>、その中で最もエネルギー吸収率のよかったサイズが発生率が最大値をとる 12 grid で、反射率も 10% 以下となったため、電場を空間的に平均化する範囲も最終的にこのグリッド数に対応する 24mm とした。

一方、これらのパラメータの特定の過程で、誘電体板下でプラズマが発生する領域を予め設定しないと表面波プラズマの発生が再現できないという新たな問題も発生したが、これについては、明確な解決方法はなかったため、現段階ではやむなくあらかじめこれを設定したうえでシミュレーションを行うこととした。

以上により決定したパラメータの値を用いてシミュレーションを行った場合の電子密度分布を Fig.7 に、装置垂直断面内の電界強度分布を Fig.8 に、また、空洞から反射してもどってくるマイクロ波エネルギーの時間経過の様子を Fig.9 に示す。Fig.7 の電子密度分布では、誘電体板から下に向かい 2cm につき 4.0 x

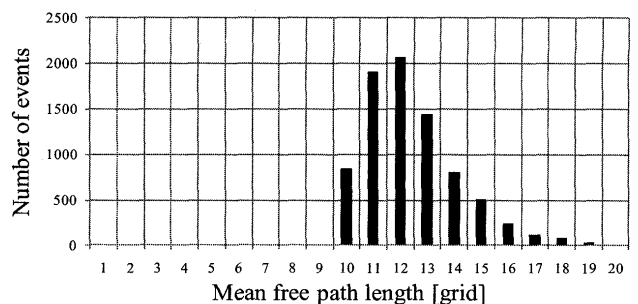


Fig.6 Number of events for mean free path

$10^{-16}$  [ $1/m^3$ ] 程度低下しているという実測値<sup>[2]</sup> の密度勾配が概ね再現できている。さらに、Fig.9 においても供給したマイクロ波電力のほとんどがプラズマ中で消費される事実が、反射が 10% 程度以内に抑えられている様子から再現できていることがわかる。

#### 4.2 スペーサ長—反射エネルギー特性

最後に、重要な装置形状設計パラメータの一つであるスペーサ長の決定を支援すべく、同数値解析コードを用いて、スペーサ長を変化させながら反射エネルギー量を計算したものを Fig.10 に示す。従来の実測値の電子密度分布を用いた計算<sup>[6]</sup> に比べて特性が乱れているものの、90mm 付近がエネルギーをほぼすべて吸収する最適なサイズとなっていることや、そのつぎの谷の位置が 150mm 付近になっているなどの概形は再現できていることがわかる。

### 5 結言

本研究では、マイクロ波励起プラズマ半導体処理装置の設計支援を目的として、これまでに開発した本装置の数値解析コードを、より実験から独立したツールにすべく、プラズマ電子密度の計算もコードの中で設定するための検討を行った。Fig.5 の特性や平均化距離の特定では実験を再現できる値を採用するなど、厳密には実験から独立したコードにはならなかったものの、これらの特性そのものは必ずしも Fig.3 の装置形

状でしか適用できないものでもないと考えられ、同種の装置への適用など、ある程度広く使用可能であるとも考えている。しかしながら、Fig.10 の特性に乱れがある、また、あらかじめある程度プラズマ領域を設定した計算にとどまっているなどの課題も残っており、今後、これらの問題点を解決していく必要がある。

(2010 年 10 月 1 日受付, 2011 年 4 月 14 日再受付)

#### 参考文献

- [1] M. Furukawa, et.al., Jpn. J. Appl. Phys, Vol.37 Part 2 No.8B, pp.L1005-L1007, 1998.
- [2] K. Shinagawa, et.al., Jpn.J.Appl.Phys, Vol.40 Part 1 No.10, pp.5856-5680, 2001.
- [3] Y. Okamura, Y. Yamamoto, K. Fujita, T. Miyoshi, K. Teramoto, H. Kawaguchi, S. Kagami and M. Furukawa, J. Vacuum Sci. and Technology A, Vol.25, No.4, pp.816-823, 2007.
- [4] 三芦, 川口, 古川, 電子情報通信学会技術研究報告 MW2006-67, Vol. 106, No. 186, pp. 175-180, 2006.
- [5] S. Kagami, T. Miyoshi, M. Furukawa, Y. Okamura, H. Kawaguchi, Digest of 16th Int. Conf. on the Computation of Electromagnetic Fields, PA8-11, 2007.
- [6] 川口, 西川, 鏡, 古, 電気学会電磁界理論研究会資料 EMT-08-103, pp. 117-120, 2008.
- [7] 西川, 畑口, 松岡, 川口, 鏡, 電子情報通信学会技術研究報告 MW2009-50, pp. 111-114, 2009.
- [8] H. Hojo, A. Fukuchi, A. Itakura., Rev. Sci. Inst., Vol.75, No.10, pp.3813-3815, 2004.

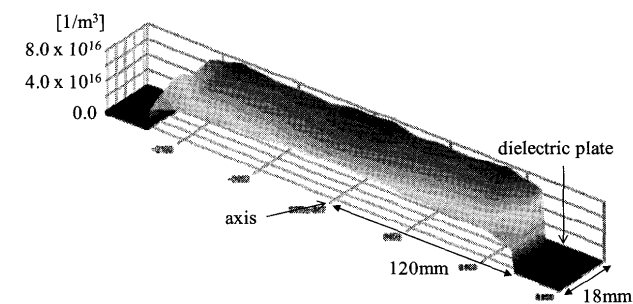


Fig.7 Electron density distribution under dielectric plate

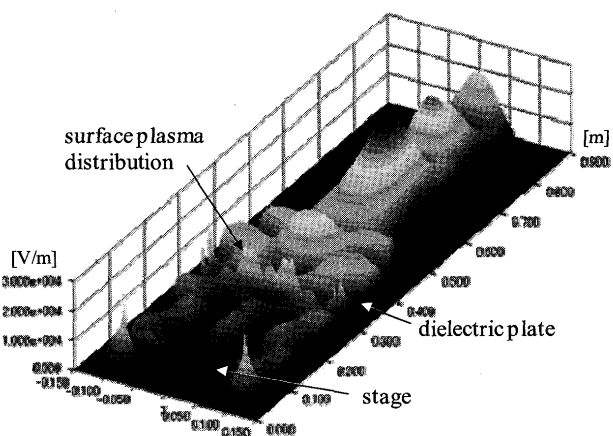


Fig.8 Electric field distribution on vertical cross section

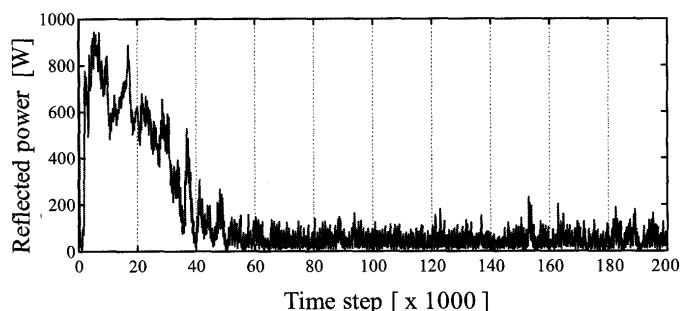


Fig.9 Reflected power behavior in time domain

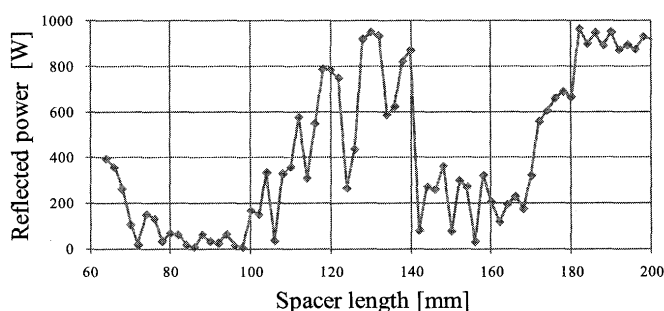


Fig.10 Reflected power for spacer length