

Berg による反応性スパッタモデル

中野武雄

2005 年 1 月 5 日

概要

S. Berg *et al.* による論文 [1] のモデルを実際に計算してみる試み。

1 モデル

手順は [1] の Appendix にある通り。ここでは物理量とそれらの間の関係式とを整理してみる。彼らは Ti をアルゴン - 窒素雰囲気ですパッタしているので、反応性ガスの添字には N を使っている。ここではそのまま使うことにする。

1.1 変数一覧

まずあらかじめ与えておくパラメータは次の通り：

S_M	metal region のスパッタ率
S_N	nitride region のスパッタ率
α_t	反応性ガスの target への付着確率
α_c	反応性ガスの chamber 壁への付着確率
A_t	target の面積
A_c	chamber 壁の面積
J	target での電流密度
S_p	排気速度

動的に変化する量 (モデルにおける未知変数) は次の通り：

F	単位面積あたりへの N_2 分子のフラックス
θ_1	target の窒化割合 (窒化領域の面積比)
θ_2	chamber 壁の窒化割合 (窒化領域の面積比)
q_t	target が吸収する N_2 流量
q_c	chamber 壁が吸収する N_2 流量
q_p	ポンプで排気される N_2 流量

これらの関係を元に、窒素分圧 p_N から窒素流量 q_0 を求めるのが Berg モデルと言える。入力 - 出力が直感と逆なのは、 q_0 は p_N の一価関数となるのに対し、 p_N は q_0 の多価関数となるからである (だからこそ hysteresis が生じるわけだが)。

1.2 関係式

単純に考えて、未知の変数が (q_0 も入れて) 7 個だから、関係式も同じく 7 つあれば解けることになる。なお Berg モデルは基本的に平衡状態のみを考えていることに注意。

まず流量保存の関係：

$$q_0 = q_t + q_c + q_p \quad (1)$$

および排気される窒素の流量を与える式：

$$q_p = p_N S_p \quad (2)$$

がすぐにわかる。また単位面積あたりへの窒素分子のフラックスは $1/4n\bar{v}$ である (例えば [2]) から、

$$F = \frac{1}{4} \frac{p_N}{kT} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2kT}{M}} = \frac{p_N}{\sqrt{2\pi kTM}} \quad (3)$$

となる。ただしここで n は分子数密度、 \bar{v} は平均速度、 k は Boltzmann 定数、 T はガスの絶対温度、 M は窒素分子の質量、である。

続いて target では、metal region が窒化されて増加する分と、nitride region がスパッタされて減少する分がバランスしているので：

$$2\alpha_t F(1 - \theta_1) = (J/e) S_N \theta_1 \quad (4)$$

となる。 (J/e) は単位面積あたりのイオンフラックスを与える (e は素電荷)。左辺に 2 がついてるのは、窒素分子が 2 つの原子に乖離して TiN を形成するからである (このあたりはスパッタ率の定義にも依存しそうだが)。

さらに chamber 壁での窒化領域のバランスは、

- chamber の metal region が F によって窒化される
- chamber の metal region に、target の nitride region からスパッタされた TiN が depo する
- chamber の nitride region に、target の metal region からスパッタされた Ti が depo する

で決まると考えると (ここもいろいろ議論がありそうだが)、

$$2\alpha_c F(1 - \theta_2) + (J/e) S_N \theta_1 \frac{A_t}{A_c} (1 - \theta_2) = (J/e) S_M (1 - \theta_1) \frac{A_t}{A_c} \theta_2 \quad (5)$$

が導ける。

以上からもわかるように、気相の窒素が target および chamber 壁で消費される割合は

$$q_t = \alpha_t F(1 - \theta_1) A_t \quad (6)$$

$$q_c = \alpha_c F(1 - \theta_2) A_c \quad (7)$$

で決まる。

以上で 7 つの式が導けた。これらを図 1.2 のようなフローチャートに従って解いていけば、 p_N より q_0 を決定できることになる。

さらに、

$$R = (J/e) \{ S_N \theta_1 + S_M (1 - \theta_1) \} \quad (8)$$

によって R を定義すると、これはターゲットの平均スパッタ率を与えることになり、成膜速度の指標と考えることができよう。

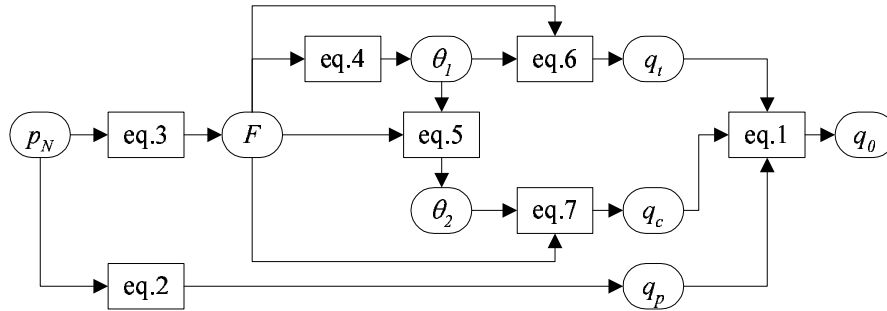


図 1: Berg モデルを解いていく順序

2 計算例

Berg の論文にあるパラメータは以下の通り。

$$S_M = 1.5, S_N = 0.3, \alpha_t = \alpha_c = 1, A_t = 127 \text{ (cm}^2\text{)}, A_c = 10A_t, J = 1.4 \text{ (mA/cm}^2\text{)}, \\ S_p = 85 \text{ (1/s)}$$

この条件で Berg モデルを解く GNU octave の script 例を以下に示す¹。

```
#!/usr/bin/octave -qf
# consts
ec = 1.6e-19;           # (C)
kB = 1.38e-23;         # (J/K)
NA = 6.022e23;
# params
SM = 1.5;
SN = 0.3;
ac = 1.0;
at = 1.0;
At = 127 * 1e-4;       # (m^2)
Ac = 10 * At;
Sp = 85 * 1e-3;        # (m^3/s)
Jt = 1.4e-3 * 1e4;    # (A/m^2)
Tg = 300;              # (K)
Mg = 2 * 14.0067 / NA * 1e-3; # (kg)
pN = [0.00: 0.0001: 0.03]'; # (Pa)

iF = Jt / ec;          # ion flux: (ions/m^2s)
F = pN ./ sqrt(2 * pi * kB * Tg * Mg); # (molecules/m^2s): eq(3)

t1 = 2*at*F ./ (2*at*F + iF*SN); # eq(4)
```

¹このファイルは <http://surf.ap.seikei.ac.jp/nakano/diary/misc/berg.m> として置いておきます。

```

iR = 2*ac*F + iF*SN*t1*At/Ac;          # eq(5)
t2 = iR ./ (iR + iF*SM*(1-t1)*At/Ac);

qt = at * F .* (1-t1) * At;            # (molecules/s): eq(6)
qc = ac * F .* (1-t2) * Ac;            # (molecules/s): eq(7)
qp = pN / (kB * Tg) * Sp;              # (molecules/s): eq(2)
q0 = qt + qc + qp;
q0 = q0 / (NA / 22.4e3 / 60);           # (molecules/s) -> (sccm)

RS = iF * (SN*t1 + SM*(1-t1));         # (a.u.)

# plot
gset term postscript
gset output "berg-qP.eps"
gset xlabel "N2-FLOW (sccm)"
gset ylabel "N2-Pp (Pa)"
plot(q0, pN)
clg
gset term postscript
gset output "berg-qR.eps"
gset xlabel "N2-FLOW (sccm)"
gset ylabel "Sputt. Ratio (a.u.)"
plot(q0, RS)

```

この出力結果は図 2 のようになる。

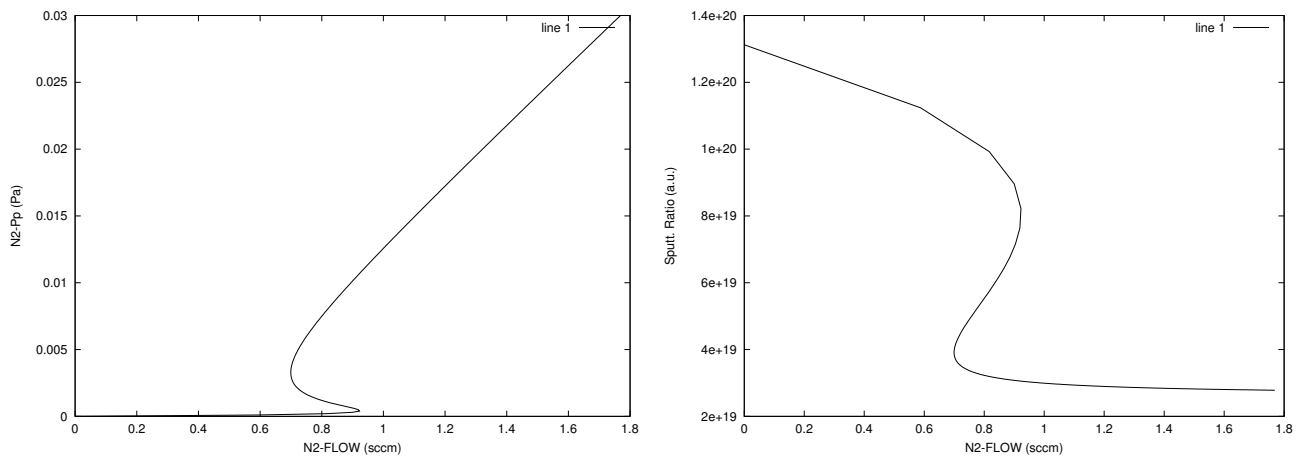


図 2: 左: q-p 曲線、右: q-R 曲線

参考文献

- [1] S. Berg, H-O. Blom, T. Larsson and C. Nender; J. Vac. Soc. Technol. A5 (1987) pp.202–207.
- [2] 堀越源一 『真空技術 [第3版]』東京大学出版会 1994, §2.5 および §2.3.