

2. 3 低環境負荷型深掘りエッチング技術開発

(1) 研究の目的

全世界的課題として環境エネルギー問題への対応が各国毎、各産業毎に強く求められており、省資源や高効率、低環境負荷化として温室効果ガス排出量 25%削減などに向けた取組みが重要となる。一方、MEMS の製造技術の中心となる深掘りエッチング加工は一般に数 10 μm のエッチング深さを必要とするため、半導体加工と比べ長時間の加工時間を要し、それにもなってエッチングガスや電力量の消費が大きい。

また、今後のトレンドとしてウェハの大口径化やエッチング開口径の微細化が進んでいくことが必須であるが、エッチング形状を維持しつつスループットの向上ニーズが強いなどエッチング装置への要求は厳しく、プロセス時間短縮のためにエッチングガスの消費量や電力量が今後増大することが予想される。これまで、エッチングガスとしては安価で取扱いに優れる SF6 ガスが一般的に使用されてきたが、SF6 ガスは温暖化係数が高いことから、上記課題に対応するためには温暖化係数の低い代替ガスへの切り替えと、ガスの消費量や電力量を抑えつつエッチング速度を高速化するために、リアルタイムにプロセス状況をモニタリングし、適正なガスの消費量や投入電力などのプロセス条件にフィードバックして最適化を図るエネルギー消費効率の向上が必須となる。

本研究では、低環境負荷の深掘りエッチング技術を確立するために、SF6 ガスの代替ガスの探索と、代替ガスのポテンシャルを最大限発現させるためのエッチングの高効率化、最適化技術として、以下の 3 つの内容に取り組んだ。

i) 低環境負荷代替ガスの選定

-)リアルタイムモニタリングによるエッチングの高効率化
-)フィードバック制御手法を用いたエッチング最適化

i) 低環境負荷代替ガスの選定

1. エッチング装置について

エッチング装置は、高密度プラズマの生成可能な NLD (磁気中性線放電 : Magnetic Neutral Loop Discharge) プラズマを用い、代替ガスエッチングと、エッチレート高速化についても技術指針を得ることを目的とした。図 2.3)-1 は NLD エッチングチェンバーの断面模式図を示す。弱い磁場によって真空中に形成される磁場零のループ付近に濃いプラズマが形成される。このループ径は磁場コイル電流によって制御可能である。このプラズマ源は、1 Pa 以下の低圧域にわたり高密度・低電子温度のプラズマが形成されることが大きな特徴となっており、一般的な ICP 装置と同等以上の高密度プラズマによってエッチレートの高速化が期待されることから、今回適用した。

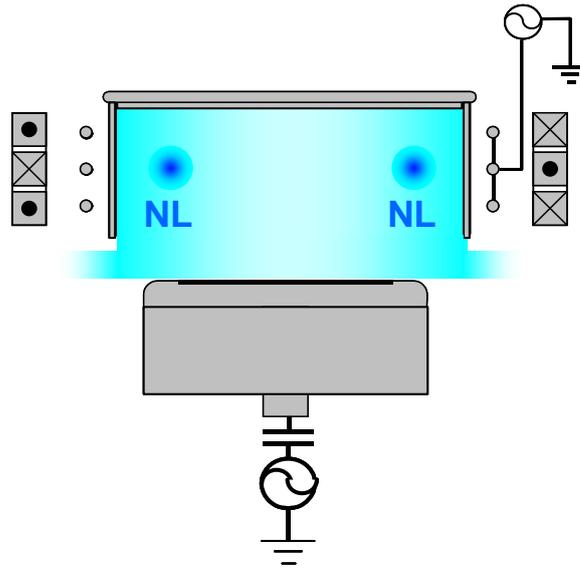


図 V.2.3)-1 磁気中性線放電(NLD)プラズマエッチング装置

2 .

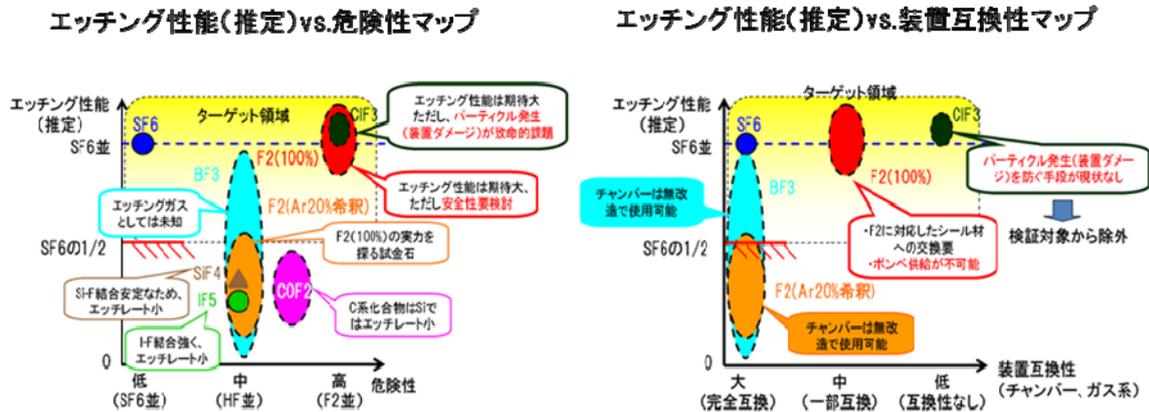
低環境負荷ガス(代替ガス)の検討と選定

2-1. 机上検討によるスクリーニング（1次選定）

シリコンエッチングのフッ素供給ガスとして用いられている SF_6 ガスの大気温暖化係数 (GWP) は 23900 と算出されている。本研究での SF_6 代替ガス選定の基本条件としてまず GWP が零乃至は極めて小さいガスであること。次に、シリコンのエッチャントであるフッ素ラジカルが供給できるガスであること。そして、安全性や取り扱いのしやすさが事前に把握できるという観点から、半導体プロセスあるいは MEMS プロセスで使用実績のあるガスであること。以上を選考条件とし、第 1 次選定時調査の結果、 SiF_4 、 COF_2 、 IF_5 、 ClF_3 、 F_2 、 BF_3 が代替ガスとして検討選出できた(表 1)。 SiF_4 と BF_3 は半導体製造プロセスではごく一般に取り扱われているガスで、入手も比較的容易である。GWP が算出されていないが、ガスそのものは反応性が高いことから、GWP は極めて小さいと判断した。

2-2. 机上検討によるスクリーニング（2次選定）

次に表1を元に、シリコンエッチング装置への導入にあたり、「エッチング性能（推定）vs.危険性」及び、「エッチング性能（推定）vs.装置互換性」の考察観点を持ってマッピングを行った(図V.2.3)-2)。結果、希釈F₂とBF₃の2ガスを代替ガスとして選定した。以下は各ガスの検討考察を示す。



図V.2.3)-2 代替ガス候補選定（2次選定）

1-2-1. SiF₄：シリコンのエッチング生成物として良く議論される分子であるが、エッチングプロセス中においてはフッ素ラジカルを供給するガスというよりも、むしろエッチング異方性を支援する役割であるとの報告事例もあり、代替エッチングとしては適しないと判断した。

1-2-2. COF₂：分子中に炭素が含有している為、経験的にエッチングレート抑制につながると判断した。

1-2-3. IF₅：ヨウ素とフッ素の結合が極めて安定な為、フッ素ラジカルの供給制御マージンが狭いであろうと考えられる。室温では液体の為、配管をヒータ加熱する必要があるだけでなく、SiCl₄のようなボンベ供給システムが確立されておらず、100sccm以上の流量を安定に得るためには複数ラインが必要な点も含め、装置への導入は困難と判断した。

1-2-4. CIF₃：プラズマ放電無くとも反応するガスで、最近ではクリーニングガスとして半導体分野でも取り扱われている。一方、チャンバ内部パーツとの反応によるパーティクル発生懸念、ガスそのものの危険性が非常に高い点等、実用化された装置に代替ガスとして導入するには困難と判断した。

1-2-5. F_2 : 100%高純度 F_2 はその反応性の高さゆえ、現在ボンベでの供給は行われていない。100%高純度 F_2 用いるにはオンサイトで生成する方法があり、そのひとつとして固体ソースから F_2 ガスを得る装置を供給可能なメーカを調査したが、現在は生産中止となっている。一方、TFT 分野において、チャンバクリーニング用途に大量に F_2 ガス供給する設備として実用化されている装置が存在することが判明した。取り扱いメーカは現在世界で 1 社のみとなっている。 HF の電気分解から F_2 ガスを供給する方式であり、設備としては安全面・ガス流量も安定的に大流量が確保できる。

しかしながら、100% F_2 を既存のエッチング装置に導入するには、 ClF_3 同様チャンバ内部パーツの互換性を確認する必要がある、初動研究としては困難と判断した。ただし、フッ素ラジカルを供給可能なガスとしてはシンプルな分子構造であり検討する価値は高いと判断し、現在ボンベで入手可能な Ar 希釈の 20% F_2 ガスを選定した。

1-2-6. BF_3 : 化合物エッチング分野において BCl_3 が高レートエッチングガスとして取り扱われている点を参考とした。B は C と周期律表では隣同士であることから、特性が類似の可能性が高い。しかし結合エネルギーで調査すると、 $Si-B:68.9kcal/mol$ 、 $Si-C:107.9kcal/mol$ と大きく異なる為、プラズマ化し、フッ素ラジカルが供給できた場合、堆積性とエッチング性の両方を持ち合わせたガスとしての可能性に期待し、代替ガス候補として選定した。

3. 低環境負荷ガスを用いたエッチング基礎実験

3-1. F_2/Ar プロセス

F_2 が Ar で希釈されており、Ar ガスの添加の影響を確認するために、比較のため SF_6 も Ar 希釈してエッチレートを評価した。図 V.2.3)-3 に 2 μm Via のエッチングレートに対する 20% F_2 / Ar 及び SF_6 / Ar 混合比依存性結果をそれぞれ示す。結果は、予想に反して 20% F_2 及び 20% SF_6 共に殆どエッチングされなかった。40% SF_6 で 1 $\mu m / min$ 以上のエッチング速度が確認できたが、形状は等形状となる。

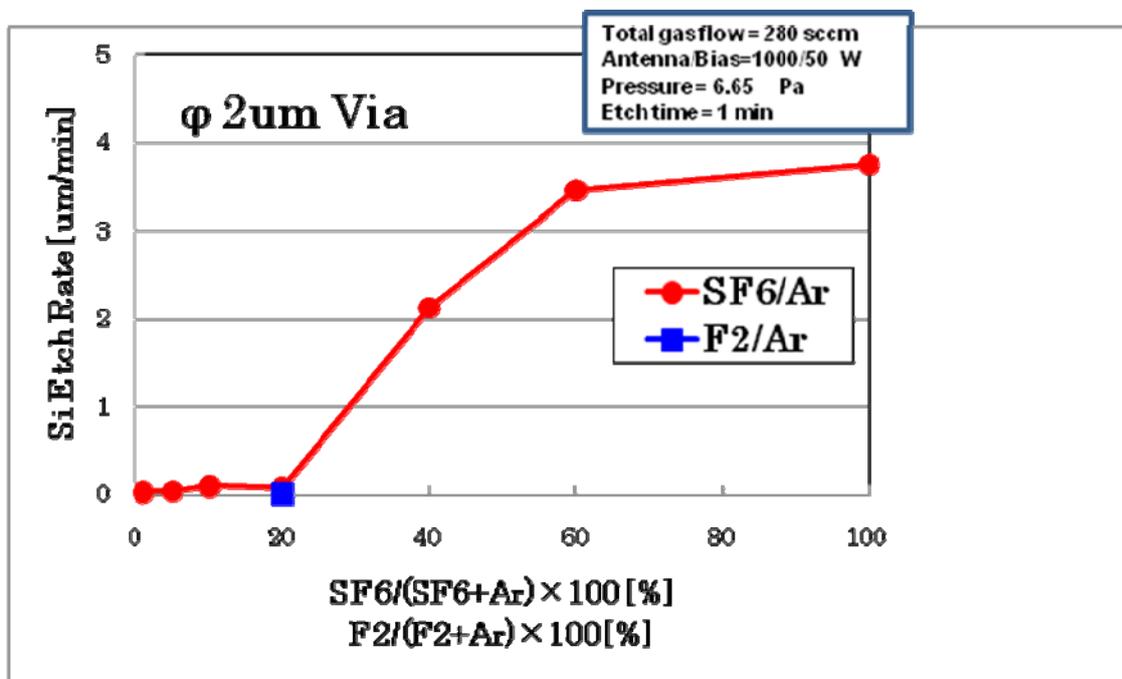
この原因について以下のように考察した。

20% F_2 / Ar 、20% SF_6 / Ar ではガスのうち 80%が Ar であり、その状態でプラズマになっているため、 F_2 、 SF_6 とも十分解離していると考えられる。この状態で Ar のイオン化は 15eV、 F_2 、 SF_6 の F 1 個の解離エネルギーは 2.5~3.5eV であることから、F はラジカル状態にあると思われる。ただし、F の絶対量がエッチレートを決定すると考えると、 SF_6 は 6 個の F、 F_2 は 2 個の F であり、F の数が 3 : 1 と同じ流量で比較すると SF_6 の方が F 量が多いため、有利であるとも考えられる。

また、 SF_6 / Ar の SF_6 濃度を高くすると急激にエッチングが起きることから、プラズマによってチャンバの構成部品から酸素が放出され、Si 表面で酸化とエッチングの競合反応が起きている可能性がある。

したがって、今回の結果は以下のようなになる。

- ・ F の絶対量が少なく、チャンバの構成部品から放出される酸素により、Si 表面で酸化とエッチングの競合反応が起きていると考えられる。
- ・ SF₆/Ar と同様、F₂濃度を高めると、エッチレート向上の可能性はある。



図V.2.3)-3 Si エッチレートの 20% F₂ / Ar 及び SF₆ / Ar 混合比依存性

3-2. BF₃ / Ar プロセス

図V.2.3)-4 は 2um Via における BF₃ 及び SF₆ の Ar 添加率依存の結果である。特徴的なのは、10% BF₃ で予測に反しデポ膜が確認されたことである。グラフではデポレートをマイナスで表記している。BF₃ 堆積速度は混合率によらず、10%~100% 範囲で 0.5um/min 前後のデポレート推移の結果を得た。

現状のボッシュエッチングでは C₄F₈ がデポ工程で使われているが、GWP は 8700 と大きい。C₄F₈ の代わりに BF₃ を使うことで、GWP がゼロのデポ工程が可能となる結果を得た。

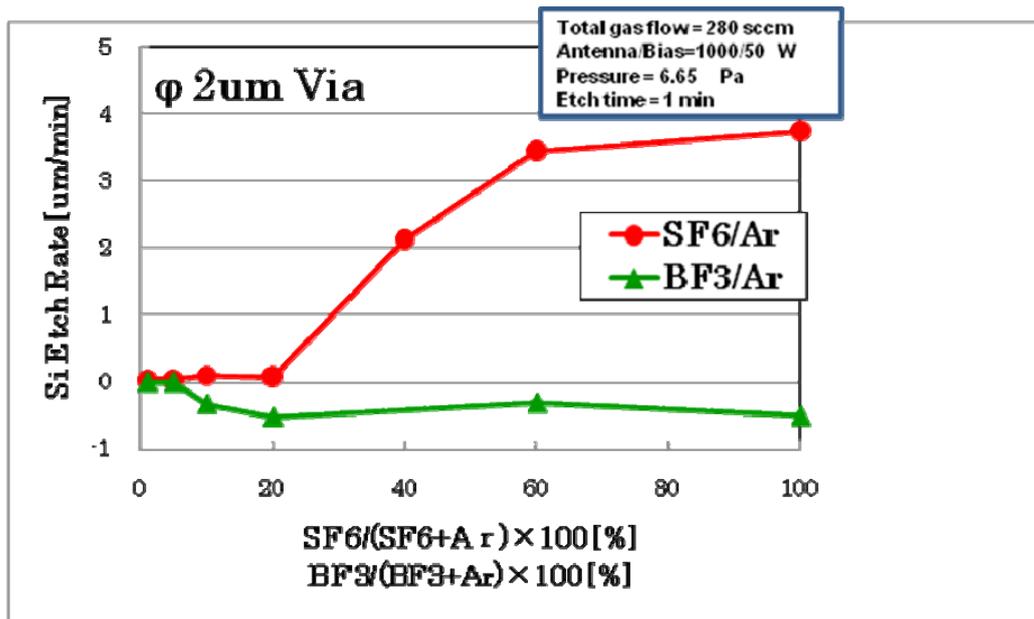


図 V.2.3 (4) ϕ 2um Via の Si エッチングレートの 20% F_2 / Ar 及び SF_6 / Ar 混合比依存性

3-3. BF_3 / O_2 プロセス

BF_3 がフロロカーボンガスの炭素と同じ役割を持つならば、酸素添加によってシリコンエッチレート向上が見られる可能性も考えられたため、 BF_3 / O_2 混合プロセスの実施を試みた。

図 V.2.3 (5) に 2umVia における BF_3 / O_2 混合率依存の結果を示す。しかし、結果はどの混合比においてもデポ膜が形成されることが確認され、60% BF_3 で約 2.5 um / min の高速のデポレートであった。図 V.2.3 (4) の Ar 添加プロセスでの膜とは違い、酸素添加は B-O 系の膜が成膜されているものと思われる。以上の結果から、 BF_3 ガス単体では、デポ性のガスであることが明らかになった。デポレート 2.5 um / min は従来ボッシュエッチングのデポ工程でみると、最速レートではないかと思われる。

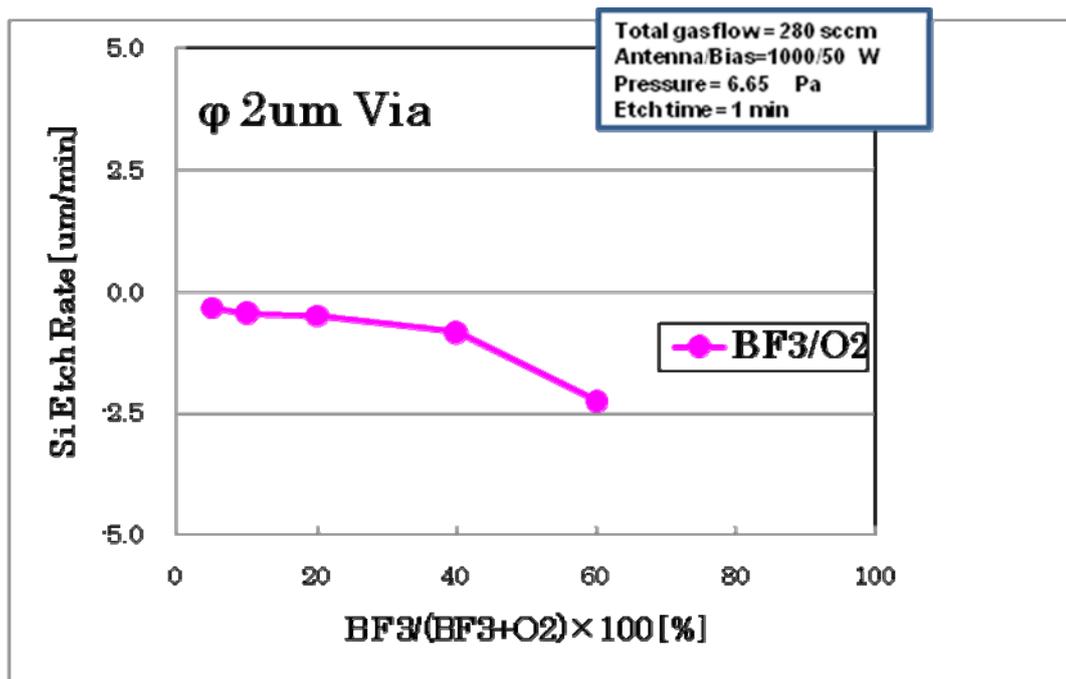


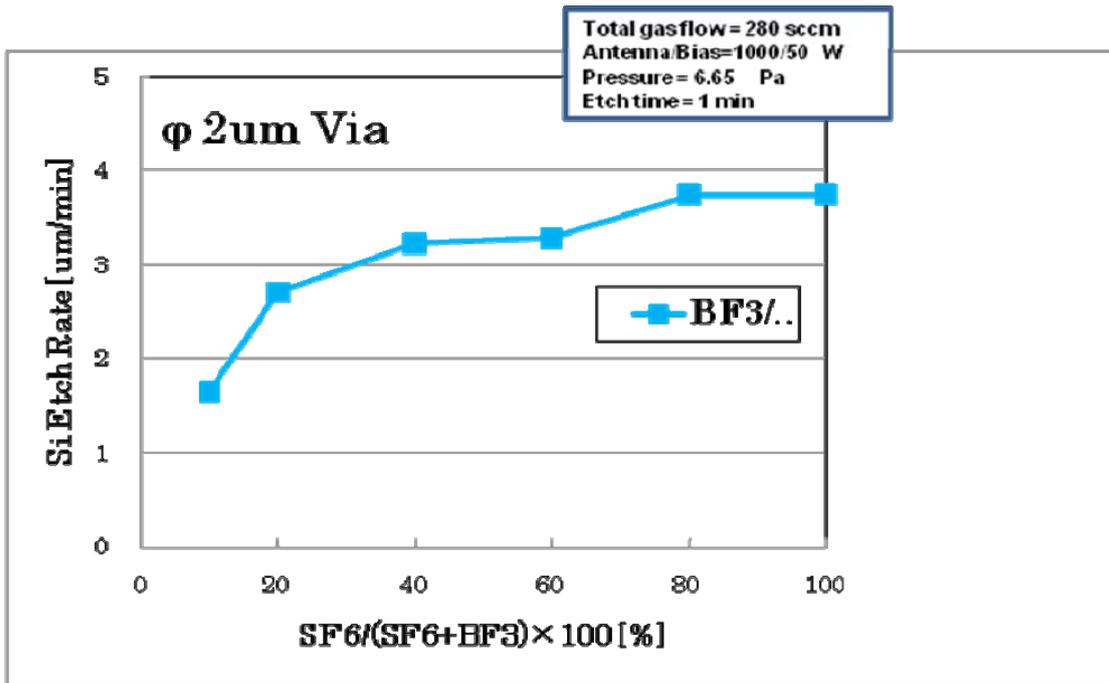
図 V.2.3 (5) Si エッチングレートの BF₃ / O₂ 混合比依存性

3-4. BF₃ / SF₆ プロセス

BF₃ の堆積結果から、等方性である SF₆ エッチングにデポ性である本 BF₃ を混合させ、異方性の現象が見られるか確認した。図 V.2.3 (6) に BF₃ / SF₆ 混合比依存性を示す。BF₃ 添加とともにエッチング速度は低下するが、この条件下では異方性形状に転じる結果は得られなかった。

しかしながら、80%BF₃ / SF₆ となる領域でも、100% SF₆ に対して 3 割程度のエッチレート低下しか見られない。すなわち、この結果は GWP が高い SF₆ に BF₃ を添加すると、QWP を下げつつエッチレート低下が抑えられるため、結果的に低環境負荷の代替ガスとなりうることを意味する。

よって、更なる効率向上を狙い、アンテナパワー、バイアスパワー依存性を次に検討した。



図V.2.3)-6 Si エッチングレートの BF₃ / SF₆ 合比依存性

4. エッチング特性向上検討

4-1. 高パワー条件仕様確認

4-1-1. アンテナパワー依存性

図V.2.3)-7 はエッチング速度 UP を目的にプラズマ密度増加とエッチングレート相関を確認目的とし、実験を行ったが、SF₆(20%) / Ar、F₂(20%) / Ar 共にエッチング速度には変化が見られなかった。BF₃(20%) / Ar はアンテナパワー増加と共にデポレートが増加する傾向を得た。これは高パワー化によって BF₃ の解離が進み、デポ性が増加したものと考察される。BF₃ を用いたプロセスでデポレートをより向上させるには酸素添加と高密度化が有効であると考えられる。

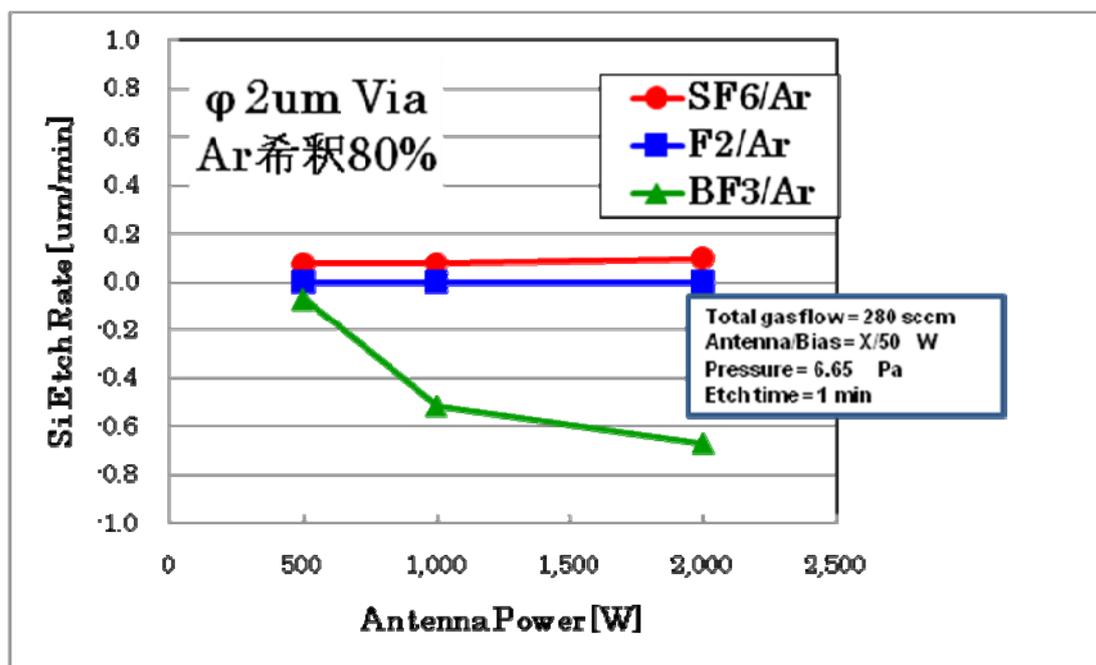


図 V.2.3)-7 Si エッチングレートのアンテナパワー依存性

4-1-2.バイアスパワー依存性

図 V.2.3)-8 にバイアスパワー依存性を示す。図中には Ar 添加プロセスである SF₆(20%) / Ar、F₂(20%) / Ar、BF₃(20%) / Ar、SF₆(20%) / Ar と、これに加えて BF₃(80%) / SF₆、SF₆(20%) / O₂ 混合プロセスをそれぞれ示す。どの混合プロセスも SF₆ あるいはそれに代わるガスの使用量が総流量の 20% となる条件にて比較した。SF₆(20%) / Ar では、バイアスパワー 100W で急激にエッチレートが上昇し、それ以上では緩やかにレートが下降する傾向を得た。エッチレートは速くなるものの、マスクのエッチングも速くなることからスパッタ主体のエッチング機構と考えられる。同様に F₂(20%) / Ar プロセスもバイアスパワー増加に伴い、エッチレートが向上する結果を得た。バイアスパワー 500W で 0.5 um / min のエッチレートが得られた。

F₂(20%) / Ar プロセスは、MEMS 向けの深堀エッチングにはレート面で足りないが、次世代低消費電力 LSI 光インターコネクションデバイスや環境センサなどで応用が検討されている回折格子構造、フォトニック結晶構造等の低レートで精密且つナノ微細加工制御が要求される分野には有用であり、SF₆ を一切使用しない「低環境負荷な微細加工 Si エッチングプロセス」として有効であるといえる。

また、BF₃(80%) / SF₆ プロセスにおいては、バイアスパワー 100W で異方性形状が初めて確認された。対マスク選択比は 15 前後と SF₆(20%) / Ar と比べて約 2 倍と高く、かつ

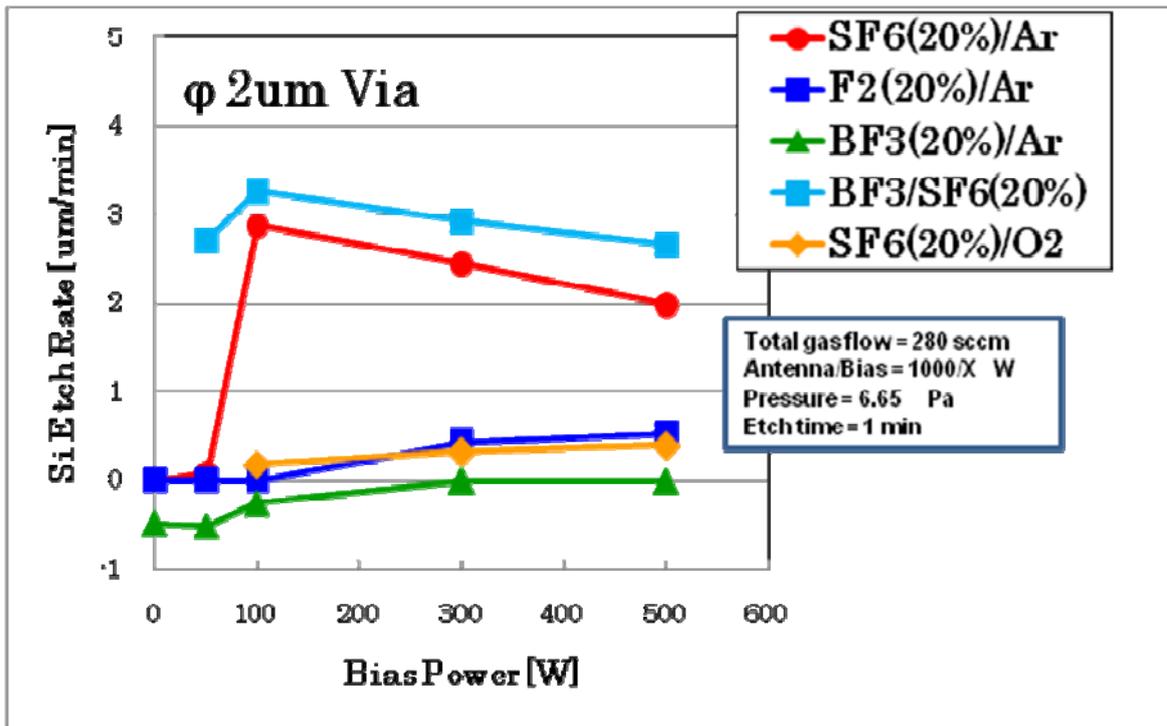


図 V.2.3 (8) Si エッチングレートのバイアスパワー依存性

NLD プラズマを用いた非ボッシュエッチング法を踏襲している為、側壁が平滑なスキヤロップフリーの加工形状となる。図 V.2.3 (9) に図 V.2.3 (8) 中の SF₆(20%) / Ar 及び BF₃(80%) / SF₆ プロセスの SEM 写真を示す。

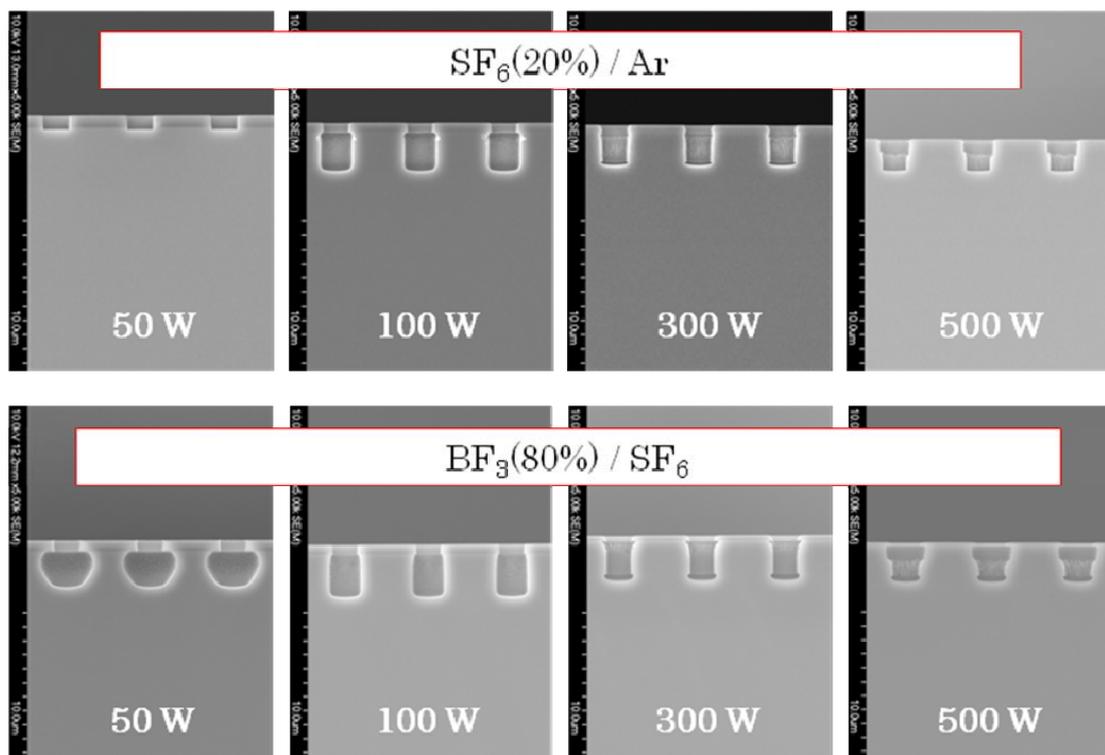


図 V.2.3)-9 Si エッチングレートのバイアスパワー依存性(SEM 写真)

以上の結果から、 BF_3/SF_6 混合プロセスにより、Si の異方性エッチングが可能となることが明らかになった。

4-1-3.従来 SF_6 / O_2 非ボッシュ技術との比較

図 V.2.3)-10 は本研究で見出した新規 $\text{BF}_3 / \text{SF}_6$ エッチングプロセスについて、従来プロセスである SF_6 / O_2 混合プロセスとの比較を示す。 SF_6 / O_2 混合プロセスでは SF_6 が 80% で異方性形状を得る。エッチング速度は 4 um / min 。一方で、 $\text{BF}_3(80\%) / \text{SF}_6(20\%)$ は 3.25 um / min 、 $\text{BF}_3(90\%) / (10\%) \text{ SF}_6$ で 2.0 um / min で両方とも異方性形状である。図 V.2.3)-11 は SF_6 / O_2 混合プロセスと $\text{BF}_3 / \text{SF}_6$ 混合プロセス各々エッチング時間を延長した結果を示す。両形状共に異方性形状を維持していることが分かる。以上の結果から、 $\text{BF}_3 / \text{SF}_6$ 混合プロセスは低環境負荷型 Si 深堀エッチング技術として極めて新しい方法を見出したと言える。表 2 は本プロジェクト成果の $\text{BF}_3(80\%) / \text{SF}_6(20\%)$ プロセスを元に、NLD を用いた非 Bosch プロセスの代替ガスのまとめを示す。結果、 $\text{BF}_3(80\%) / \text{SF}_6(20\%)$ プロセスにて、69% の削減見込み(計算値)を得た。

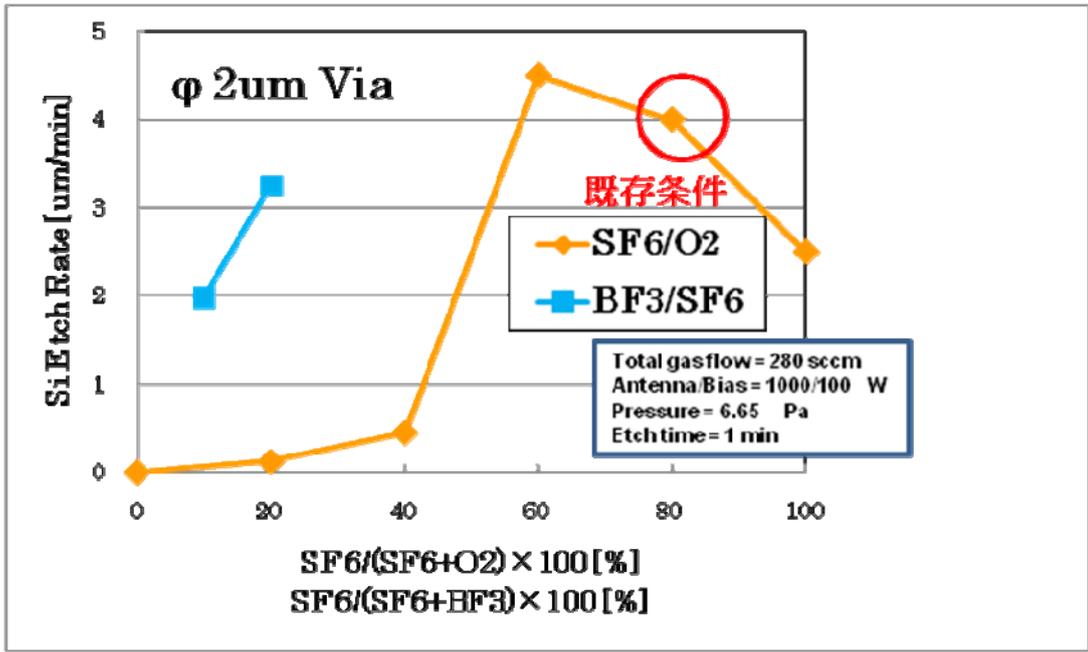


図 V.2.3 (10) Si エッチングレート of SF₆ / O₂ 混合比及び BF₃ / SF₆ 混合比依存性

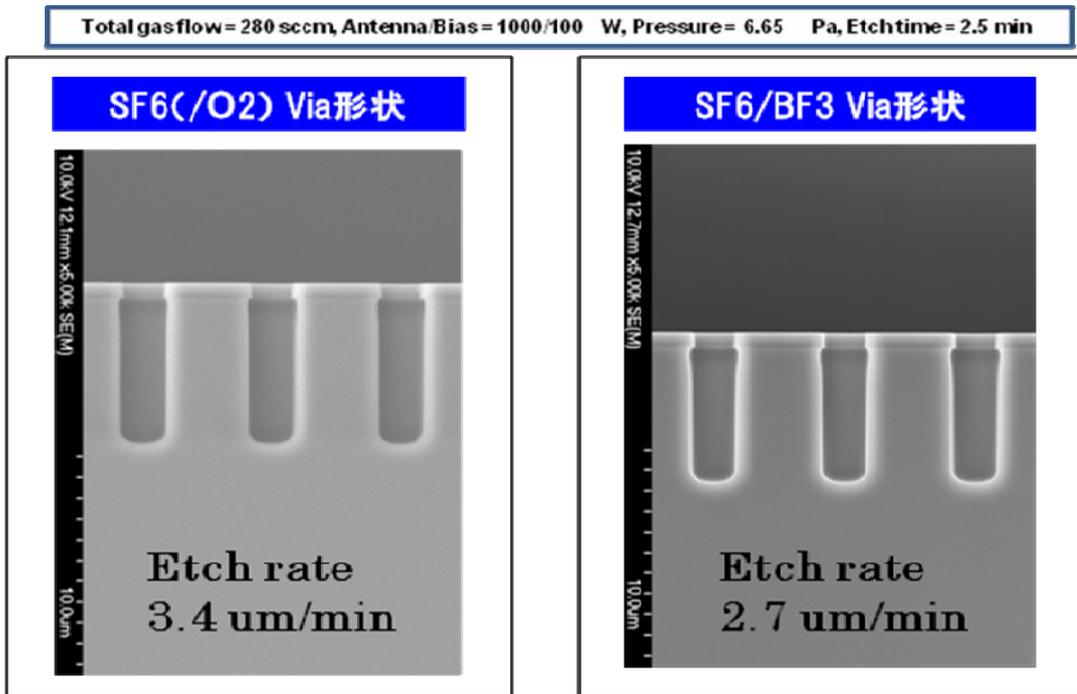


図 V.2.3 (11) SF₆ / O₂ プロセスと BF₃ / SF₆ プロセスにおける Si エッチング形状比較

表 V.2.3)2 代替ガスエッチングまとめ (NLD装置にて)

	Ref. SF6+20%O2	Ar+20%F2 混合ガス	SF6+80%BF3 混合ガス
エッチレート	4.0 μm/min	エッチングせず	3.25 μm/min
形状	————	エッチングせず	SF6/O2と同等
安全性	————	互換性あり	互換性あり
コスト (現在のガス購入代より試算)	1		4.1
温暖化係数	19120 (SF6:23900×80%)	0	4780(混合ガス)
温暖化ガス 削減率 (エッチレート同等として計算)	————	————	69%

4-1-3.代替ガスのコスト見積もり

代替ガスのコストについて、既存の SF₆ / O₂ プロセスと 80% BF₃ / SF₆ を対象に机上検討を行った。

試算 1 : 既存プロセスの TSV エッチング

SF₆ / O₂ = 224 / 56 sccm

- ・ SF₆ 使用量 : 224sccm × 2.5 分/wafer = 560 sccm/wafer
- ・ 原料 COO : 6 円/g × 3.64g/wafer = **21.8 円/wafer**

試算 2 : 代替プロセスの TSV エッチング

BF₃ / SF₆ = 224 / 56 sccm

- ・ BF₃ 使用量 : 224sccm × 2.5 分/wafer = 560 sccm/wafer
 - 原料 COO : 50 円/g × 1.7g/wafer = 85 円/wafer
 - ・ SF₆ 使用量 : 56sccm × 2.5 分/wafer = 140 sccm/wafer
 - 原料 COO : 6 円/g × 0.91g/wafer = 5.5 円/wafer
- 85 + 5.5 = **90.5 円/wafer**

以上の計算より、現時点において BF₃ / SF₆ を用いた代替ガスコストは、既存プロセスの約 4 倍という結果を得た。今後需要の増加等によりコストは低減されていくものと考えられる。

4-2. バイアス周波数との相関把握

上項にて、エッチング速度及び形状の改善はバイアスパワーが最も有効的であったため、本項はバイアスパワーに着目し、より高性能なプロセス指針を得る目的でバイアスの周波数と、そのエッチング相関関係を調査した。シリコンエッチングは、フッ素ラジカルだけでも室温レベルでは自発的に反応する自発反応エッチング機構を持つ。

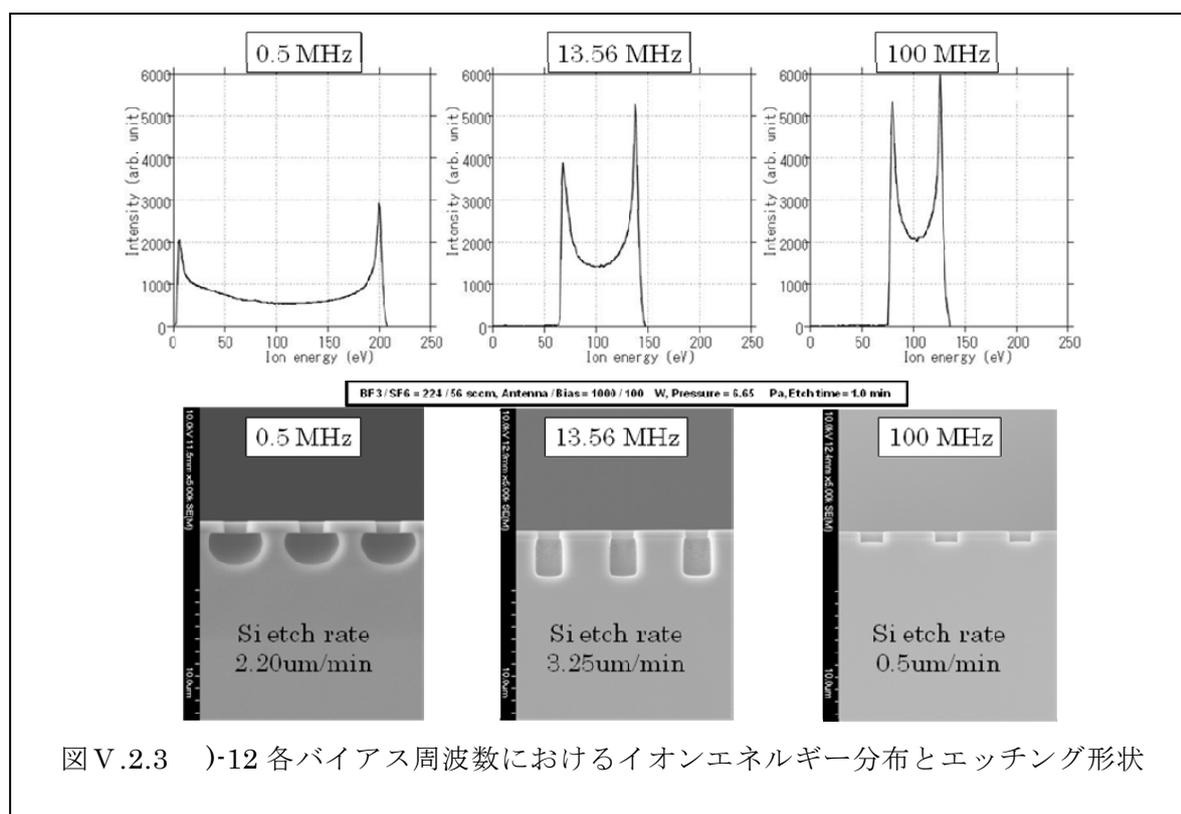


図 V.2.3)-12 各バイアス周波数におけるイオンエネルギー分布とエッチング形状

一方、ラジカル曝露下でイオンエネルギーを与えるとエッチング速度が数倍以上に増加するイオン誘発エッチングの機構も有する為、高密度なフッ素ラジカル生成も重要ではあるが、イオン制御もエッチング性能向上には不可欠な知見と考えられる。本研究では、エッチング性能向上検討のもう一つの検証として、イオン、ラジカルとの相関関係の調査を目的に、イオンの入射エネルギー分布(IED : Ion Energy Distribution)とエッチング性能に着目した。IEDは印加バイアス周波数で制御可能である。図 V.2.3)-12 は各種バイアス周波数における一般的なIEDを示す。バイアス周波数が高い程、入射エネルギーは単色化し、低周波ほど 2 局在化いわゆるバイモダル(bimodal)なピーク波形を得る。エッチング機構としては低周波バイアスでは高エネルギーイオンが寄与し、高周波程バイアスでは低エネルギーイオン主体のエッチング機構がとなることを予測される。実験は 0.5MHz電源及び 100MHz電源を準備し、中心条件のバイアス周波数である 13.56MHzとの比較を行った。実験条件は、13.56MHzで得た条件(BF₃(80%) + SF₆(20%)混合プロセス、圧力 = 6.67 Paにてアンテナ/バイアスパワー = 1000/100W)とした。同図 V.2.3)-12 中

に各バイアス周波数でのエッチング結果SEM写真を示す。中心条件である 13.56MHzでは異方性形状を得ているが、低周波では等方性形状を得た。一方、高周波バイアス(100MHz)ではシリコンはほとんどエッチングされなかった。一方、低周波バイアス場合、等方エッチング形状となった。以上の結果からバイアス周波数は 13.56MHzが良いと結論を得た。また、気相で生成したプラズマから基板に反応種を引き込む過程で、最適なバイアス周波数が存在し、Siエッチングの性能向上にはこれらパラメータ制御も重要であることを示唆する結果を得た。

また、低環境負荷エッチング技術の動向調査と代替ガスおよびエッチング効率化に関する情報収集のため、IMAPS2010, 43rd International Symposium on Microelectronics と AVS 57th International Symposium & Exhibition (AVS2010)に参加した。その結果、我々が検討している代替ガスと同じガスでの研究実績はなく、また TSV のアスペクト比が向上するにしたがってエッチレートが低下しコストアップにつながることから、本プロジェクトで検討した代替ガスは新規であり、代替ガスに求められることとしてエッチレート低下を最小限にする必要があることが確認された。したがって、本研究成果は、環境負荷低減の目的のみならず、ユーザ側のニーズにも合致する成果であると考えられる。

5. まとめ

SF_6 ガスの代替ガスとして、エッチング性能および取り扱いのしやすさを基準に机上検討の結果、 F_2 と BF_3 を選定した。しかし、 F_2 については反応性の高さから 100%純度の F_2 はボンベでの取り扱いはなく、オンサイトでのフッ素生成装置による供給のみとなることから、年間という短期間で検証可能な実験として、ボンベで購入可能な Ar 希釈 20 % F_2 と BF_3 について検証を実施した。

その結果、Ar 希釈 20 % F_2 は、同じ希釈率の Ar 希釈 20 % SF_6 に比べ著しくエッチレートが遅い結果となった。一方、 BF_3 単体ではエッチングは起こらずデポ性のガスとして寄与するが、 SF_6 との混合ではエッチレートの低下は起きるものの、($\text{BF}_3(80\%) + \text{SF}_6(20\%)$)混合において3割の低下にとどまる。

よって、NLD を用いた非 Bosch プロセスにおける温暖化ガス削減率は、69%の削減見込み(計算値)を得た。また、($\text{BF}_3(80\%) + \text{SF}_6(20\%)$)混合ガスのコスト試算では、現在の価格で算出すると SF_6/O_2 プロセスの約4倍という結果を得た。今後、ガスの需要の増加により、コスト低減を図ることは可能と考えられる。

F_2 については、100%純度 F_2 での検討が出来ず、希釈率の大きい条件での結果のため、100%純度 F_2 における検証は今後の課題である。しかしながら、仮に 100%純度 F_2 での性能がよい結果となったとしても、①オンサイトでのフッ素生成装置の設置、②既存チャンバーの耐腐食性対応、③ランニングコストの上昇等がコストアップ要因になることは明らかである。したがって、費用対効果の点からみると、上記③ランニングコストの上昇分のみで対応可能な $\text{BF}_3 + \text{SF}_6$ 混合ガスの方がメリットが高いと考えられる。

)リアルタイムモニタリングによるエッチングの高効率化

1. プロセスモニタリング手法の必要性

温暖化ガスの排出量を削減するにはガス代替のほかに、エッチングプロセスそのもの高効率化、すなわちエッチングの高速化の1つの手段である。単純なエッチレート向上策としては、プロセス設定条件での最適化（ガス圧増加、RFパワー増加等）が従来から知られている。しかし、これら方法ではエッチレートは向上するが、エッチングの異方性（深さ方向エッチレート／幅方向エッチレート）は低下する。例えば圧力を増加させると、エッチング種の密度は増加するものの、同時に平均自由行程は短くなってイオンシース内で入射イオンが散乱される確率が高まることが広く知られている。結果として入射イオンの角度分布が広がり、幅方向へのエッチングが相対的に促進されるためである。これでは今後さらにニーズが高まるエッチングの高精度化に対応することはできない。

そこで本テーマではエッチングの高速化と高精度化を同時に達成するため、プロセス制御の高度化を目指す。具体的にはプロセス時のリアルタイムモニタリング手法を確立し、それを活用してフィードバック制御することを検討する。モニタリング手法としては、プロセスに対する非干渉性と簡便性から発光分光計測（OES）を選択する。

計測対象としては、本テーマではプラズマ源として ICP（誘導結合プラズマ）の他、NLD（磁気中性線放電）を扱い、プロセス方式としてボッシュ法と非ボッシュ法を扱うため表1に示すように4つのケースが考えられる。

(表1)

	ICP	NLD
ボッシュ法	①	②
非ボッシュ法	③	④

このうちプロセス方式の比較では、非ボッシュ法では連続的、静的な放電であり、プロセス進行とプラズマ状態の変動はほとんど関連がない。唯一基板上でエッチング領域の断面アスペクト比（エッチング深さ／開口幅）のみ徐々に大きくなっていくが、この幾何学的な変化がプラズマに影響を与えてOES上で検出できるとは考えにくい。一方、ボッシュ法は元来保護膜堆積とエッチングを交互に繰り返すという点で時々刻々とプロセスが進行し、プラズマ状態の推移をOESを通して検出しやすく、リアルタイムモニタリングとそれを用いたフィードバック制御を活かすことができるプロセスといえる。

一方、プラズマ源の比較ではNLDはICPと同等以上の高密度プラズマ生成が可能と報告[1]されているが、OESを実施する際の観測窓位置についてはICP方式の方が若干自由度が高く、空間的な分布まで観測するにはICP方式の方が有利と考えられる。つまり時間的、空間的分解能の高いOESによるモニタリング手法を確立するために、対象をICP方式のボッシュ法に絞り込んだ。

ただし、ボッシュ法では通常数秒単位で保護膜堆積とエッチングのステップを繰り返

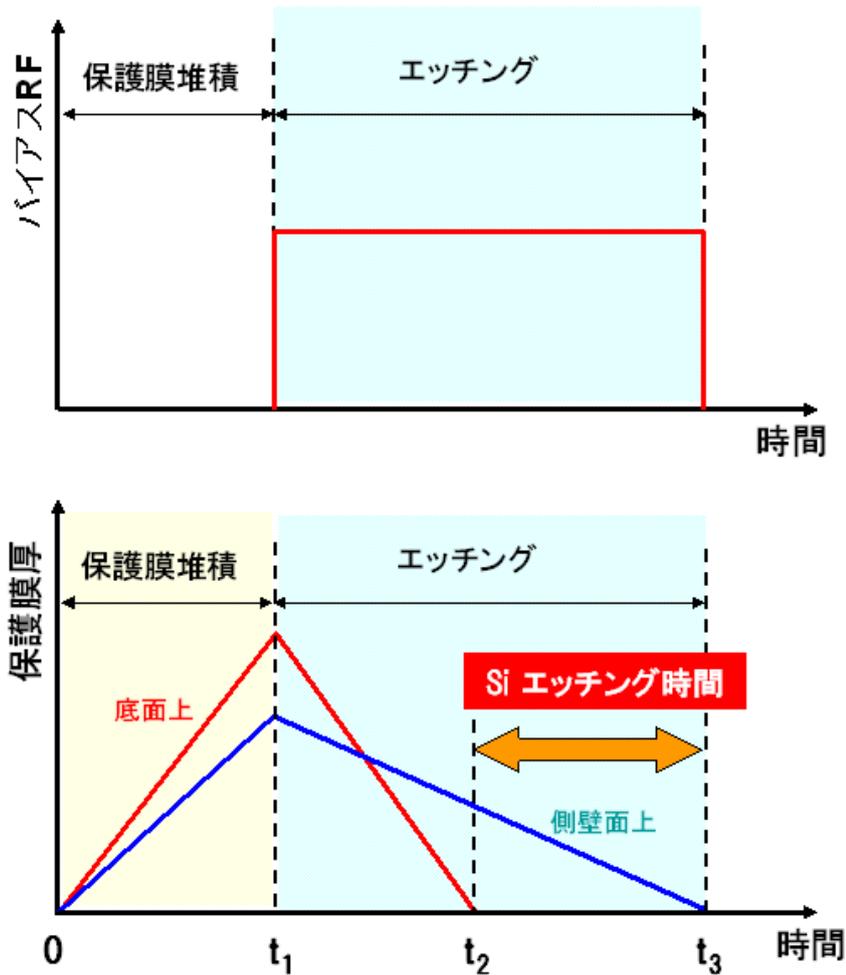
すため、リアルタイムでこの変化を十分捉えることのできるサンプリング周波数が必要である。そこで本テーマでは 10Hz 以上のサンプリング周波数を持つモニタリング手法を確立することとした。

2. モニタリング手法とフィードバック制御によるプロセス高速化

2-1.現状のボッシュ法における課題

まずプロセス高速化に対して、現状のボッシュ法の課題を考える。このプロセスは保護膜堆積とエッチングを数秒単位で交互に切り替えるプロセスとして知られている。図 1 に保護膜厚をパラメータとしたプロセス進行の様子を示す。保護膜堆積ステップ時に保護膜はトレンチ内壁面に堆積する。エッチングステップに切り替わると、初期に底面上の保護膜が除去された後に Si エッチングがスタートする。その後側壁面上の保護膜も入射イオン等の影響を受けて除去されるため、エッチングステップを終了して保護膜堆積ステップに戻ることになる。

ここで直接的な対象である Si をエッチングしている時間割合を概算で見積もる。保護膜堆積ステップとエッチングステップの時間が同等であり、エッチングステップの初期 1/3 程度の時間が底面保護膜の除去に費やされると仮定すると、1 サイクルにおける Si エッチング時間の割合は 1/3 程度ということになる。無論、この割合はプロセス条件の設定によっても前後するが、保護膜堆積とエッチングを同時に進める他のプロセス[2]と比べて効率が低い。つまり、ボッシュ法は精密な形状を実現することと引き換えにエッチングレートは低くならざるを得ないプロセスといえる。

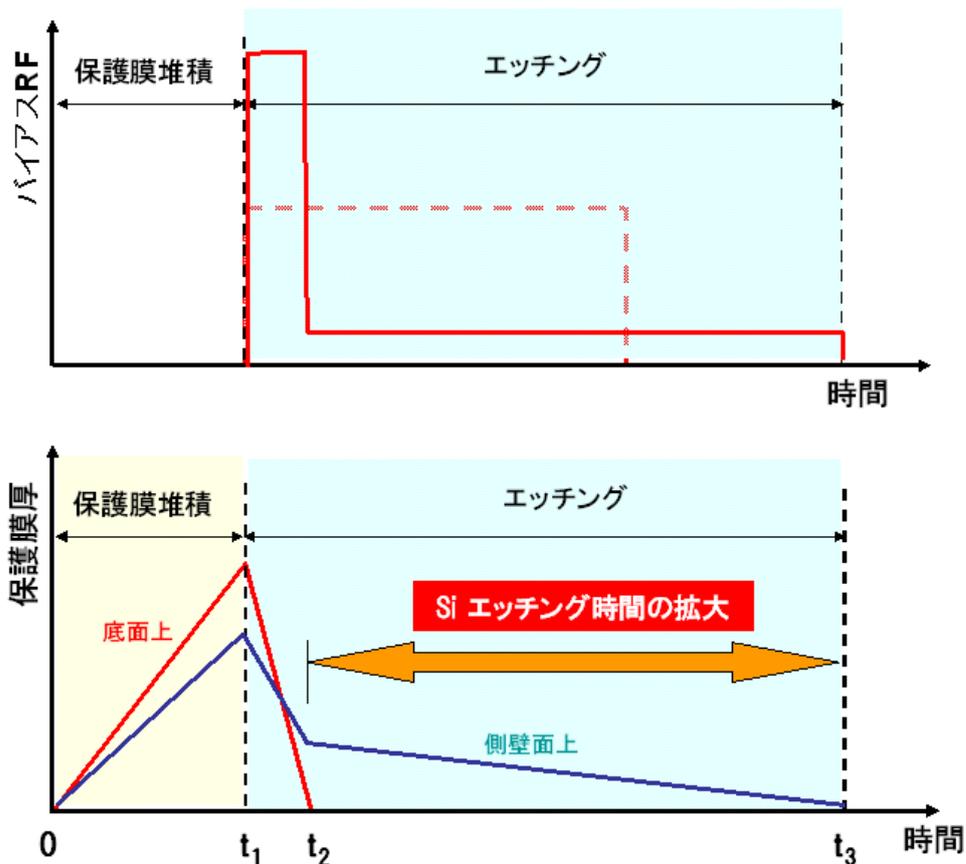


(図1)

2-2.課題解決の切り口と従来技術との相違

本プロジェクトでは、先述したボッシュ法におけるプロセス高速化の課題を解決するべく図2に示す手法を提案する。

プロセス全体に占める Si エッチング時間の割合を増加させるため、バイアス RF 値を2段階に制御する。つまりエッチング初期に底面上に形成された保護膜を除去する段階では高いバイアス RF 値を設定してこれを短時間で除去し、それ以降の Si エッチング時にはバイアス RF 値を低下させる。Si は F と強い反応性を持つことからこの段階では高いバイアス RF 値は必要ではない。他方、バイアス RF 値を下げることで入射イオンのスパッタ効果を抑制できるため側壁面上の保護膜が除去されるまでの時間を延ばすことができる。これは断面形状の変形を抑えながら Si エッチング時間の割合を増やせることを意味する。



(図2)

つまり、エッチングステップ期間内において底面上、側壁面上の保護膜消滅タイミングを基準としてバイアスRF値のHigh値からLow値への切替、エッチングステップから保護膜堆積ステップへの切替を行えば、トレンチ断面形状の劣化（幅の広がり）を抑えながらエッチングレートを向上できると考えられる。

エッチングステップ期間内でバイアスRFをHigh値からLow値に切替える手法はすでに装置メーカーから公開、市販されている。しかしながら、この方法は切替タイミングをプロセス前に予め設定するものであり、実際のプロセス進行とは無関係に決めることになる。このため、例えばHigh値の時間を底面保護膜除去に要する実際の時間よりも長く設定した場合、側壁面上の保護膜は必要以上に長い時間、高いスパッタ作用を受けてより短時間で消滅するため、トレンチ幅の増大等、断面形状の劣化を招く。今回提案する手法はプロセス進行に伴う底面上、側壁面上の保護膜消滅タイミングを正確に検出するリアルタイムモニタリング手法を確立することで、プロセス条件切替タイミングにフィードバックし、断面形状の劣化を抑えたままエッチングレートを向上させることを狙っている。

2-3.モニタリング手法の着想

次に必要とされるリアルタイムモニタリング手法について検討する。本プロジェクト

では先述したようにプロセスに干渉しないという点で OES（発光分光計測）を選択しているが、ここでは OES で保護膜除去タイミングを検出するための方策を考える。

保護膜が除去されると、表面に Si が露出して（1）式に示すように F とのエッチング反応が始まる。

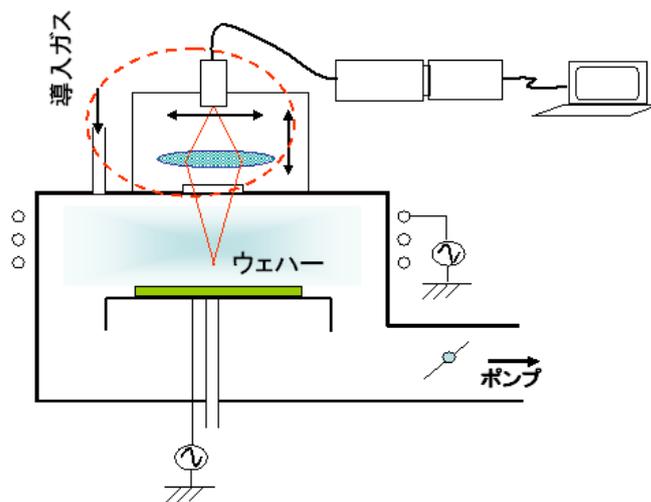


プラズマ中の F ラジカル濃度は生成と消滅・消費のバランスで決定するため、エッチング反応が開始して消費量が増えると濃度が下がる。従って F ラジカルの発光に着目すれば、底面上、側壁面上の保護膜が消滅した後は発光強度が低下するはずである。他方、（1）式に示されるように反応生成物 SiF_4 が発生するが、この一部はプラズマ中で再度解離して SiF_x ($x=1\sim 3$) が生成する。こちらは Si とのエッチング反応が開始した後は発光強度が増加すると考えられる。

つまり、F ラジカル、 SiF_x ラジカルの発光強度変化に着目すれば保護膜消滅タイミングを検出できるはずであり、ボッシュ法におけるプロセス進行を把握できると考えられる。

3. OES によるリアルタイムモニタリング技術の確立

最初に OES を用いたモニタリング実験の装置構成を図 V 示す。使用した計測器は英プリンストンインストルメンツ社製の PI-max3 であり、可視光帯域の光を波長 $< 1\text{nm}$ で計測可能である。また時間分解能においても 10Hz 以上でのサンプリングが可能であり、当初想定していた仕様を満たすことができる（表 2）。



(図3)

計測すべきエッチングチャンバー内のプラズマ発光は、観測窓の外側に設置した集光レンズを通して集められて光ファイバーに導かれ、分光器、そして検出器に導入される。従って、チャンバー内空間の平均したプラズマ発光だけでなく、チャンバー空間内の特定の計測箇所からの発光をレンズを通して集光可能である。この計測箇所は水平、垂直方向に 10cm 程度移動可能である。

(表2)

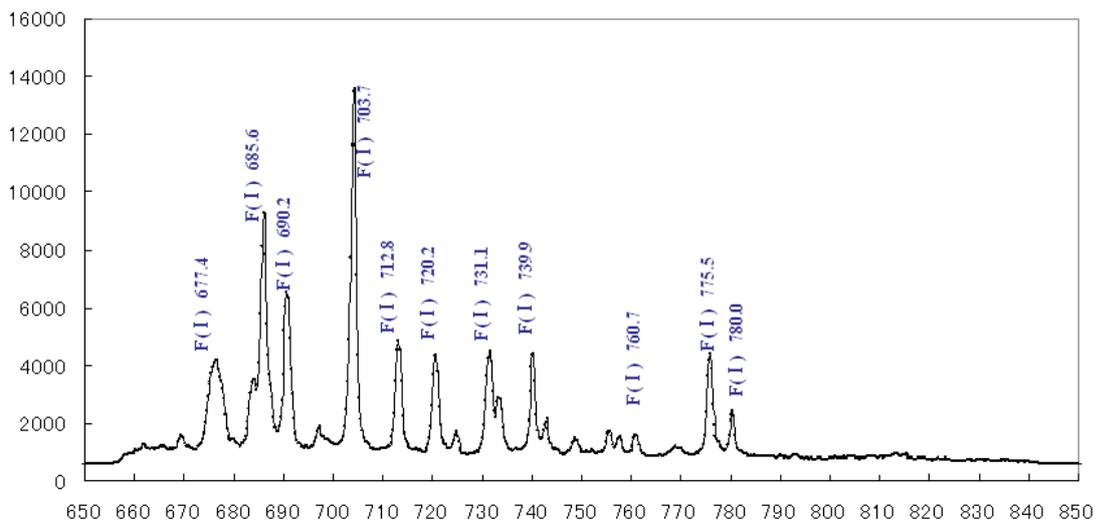
計測波長範囲	200~900nm
同時計測可能波長範囲	180nm
計測波長分解能	1nm<
計測時間分解能	100ms<

検出器を通して計測したデータは、リアルタイムで PC に送られて保存される。モニタリング技術が確立すればこの信号を使ってプロセス中にフィードバック制御が可能である。図4に実際にエッチング装置チャンバー周囲に設置した発光分光計測器の外観写真を示す。



(図4)

次にチャンバー内にベア Si ウェハを設置して、エッチングステップと同じプロセス条件の SF₆ プラズマを生成した。このときの発光スペクトルの計測例を図5に示す。

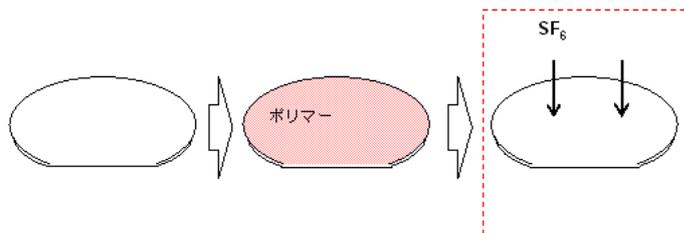


(図5)

600~800nm の波長範囲で比較的強い F ラジカルピークが 10 本以上計測できた。これら

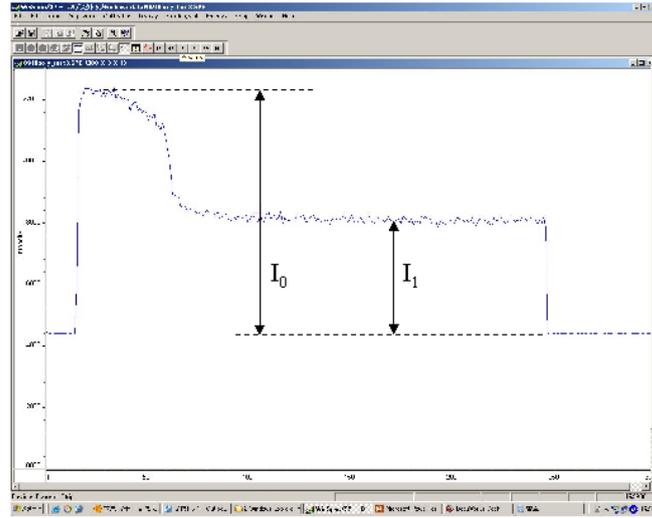
の中からプロセスモニタリングに適したピーク波長を選択することが次の課題となる。
波長選択のための実験を図 6 に示す手順で行った。

- (1) チャンバー内にベアウェハを設置。
- (2) 自然酸化膜を除去後、保護膜堆積ステップを実施してウェハ全面に保護膜を形成。
- (3) エッチングステップを実施することで、保護膜を除去したあと Si エッチングまで行う。この間、各 F ラジカル発光ピークの時間変化を計測する。

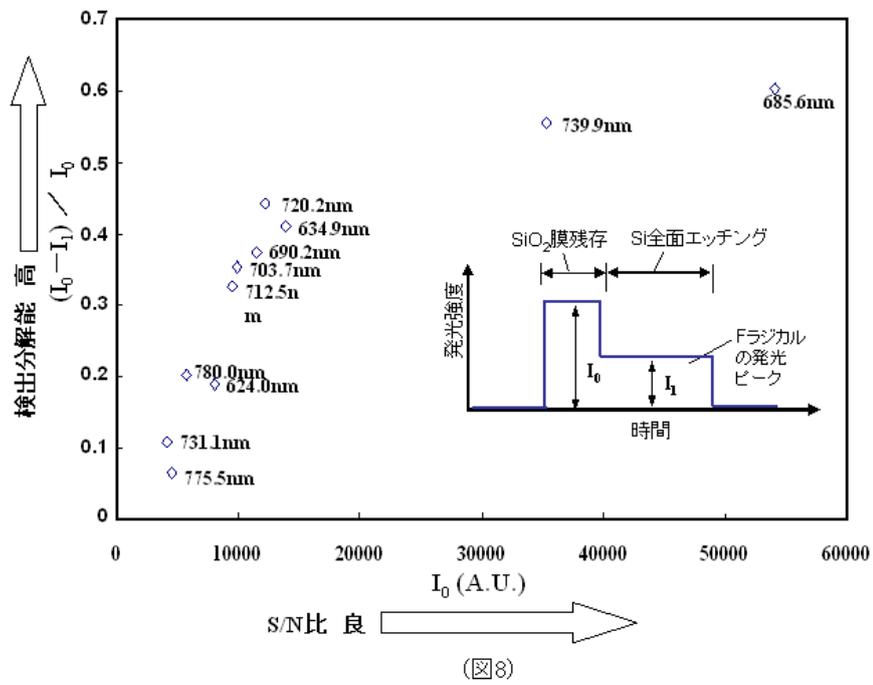


(図6)

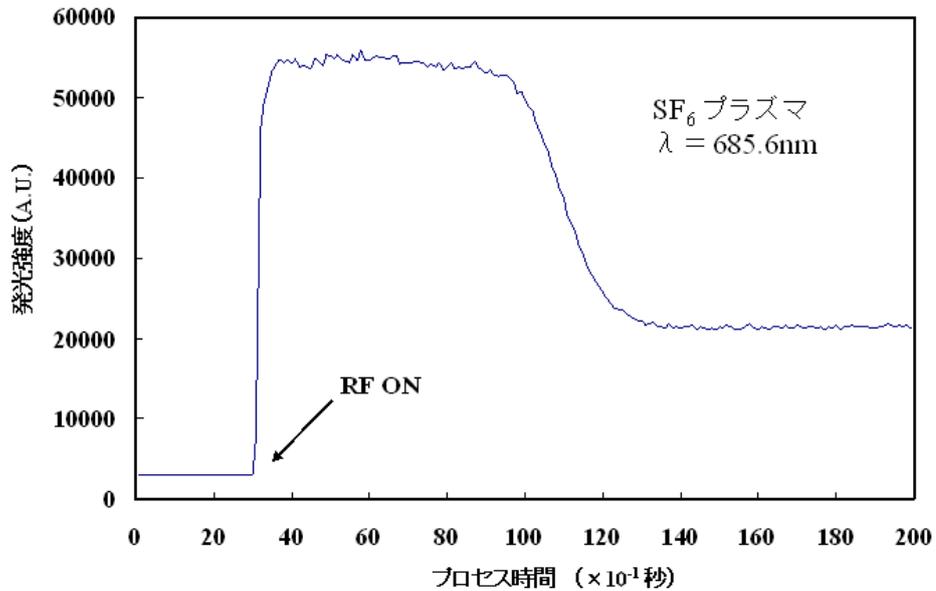
計測結果の一例を図 7 に示す。エッチングステップ開始初期はウェハ全面が保護膜で覆われているため F の消費はなく、発光強度は一定のレベル ($I=I_0$) を示すが、保護膜が除去されて Si 面が露出し、エッチング反応が開始することで $I=I_1$ のレベルまで低下する。これは前節で考察した予想通りである。ただしより高い検出感度を得るためには相対変化率 $I = (I_0 - I_1) / I_0$ がより高い波長の選択が必要になる。また S/N 比の観点から I_0 の絶対値が大きいことも必要である。各波長ピークに対してこれらの指標から計測結果を比較した結果を図 8 に示す。この図において右上ほどモニタリングに適した波長ということになり、この結果から $\lambda = 685.6\text{nm}$ の波長を選択した。この波長は図 5 の元波形で見るとピーク高さでは 2 番目であるが、半値幅も含めて考えると絶対強度、変化率とも最も大きな波長であることが分かった。この波長とその他の波長を比較すると、この波長での計測が S/N 比、感度とも高いものであることが分かる (図 9)。



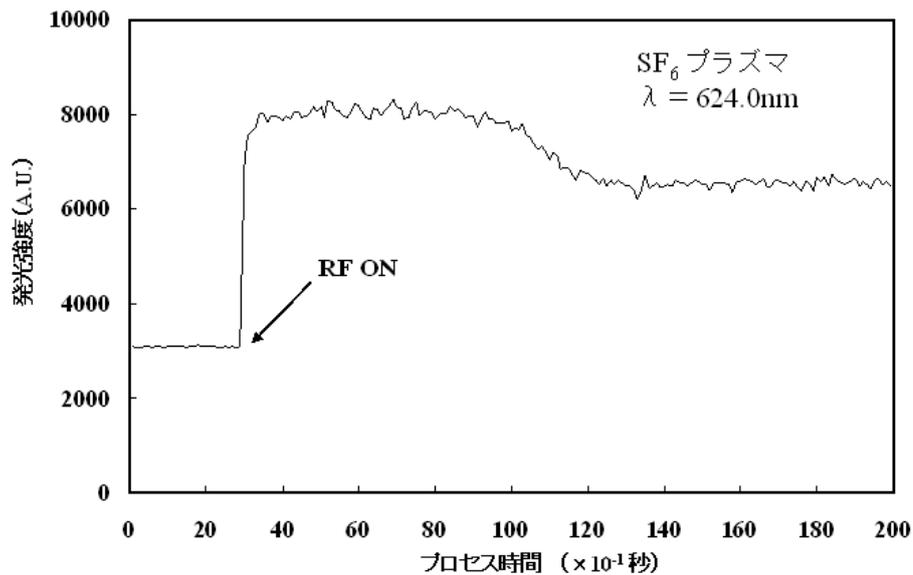
(図7)



(図8)



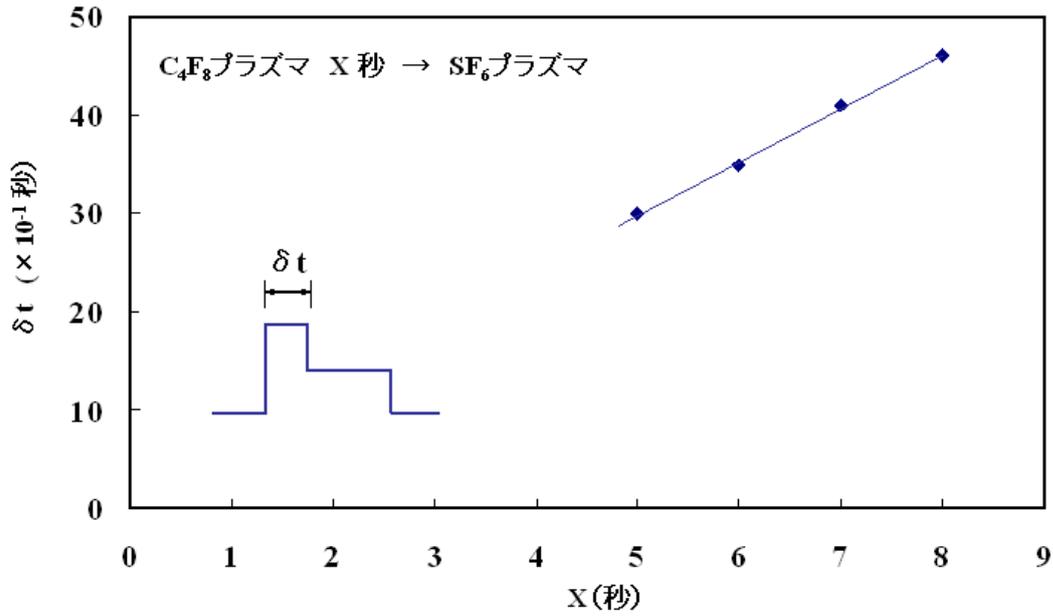
(a)



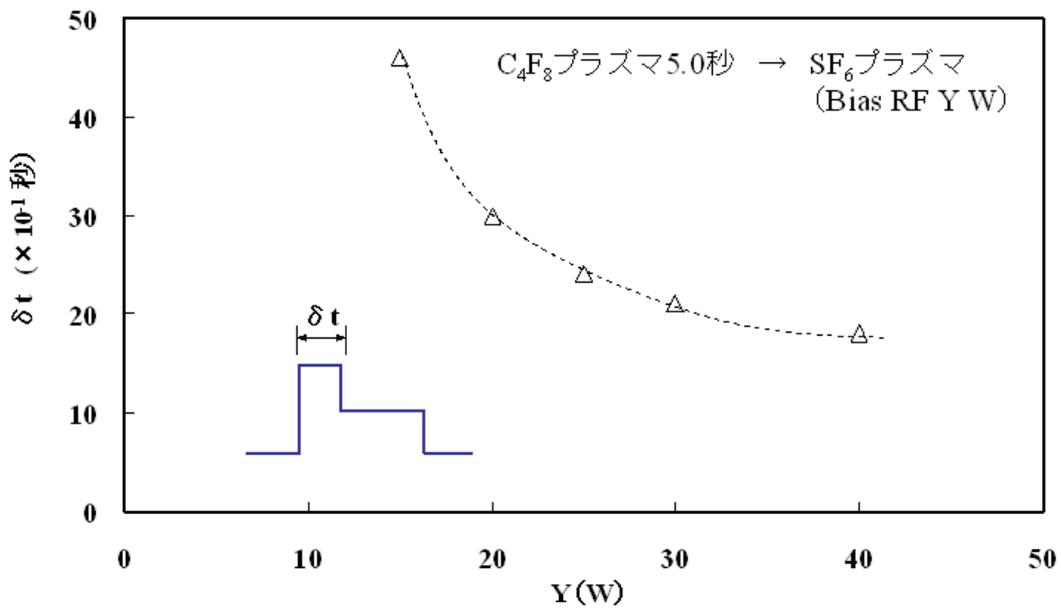
(b)

(図9)

ベアウェハでの計測時、発光強度 I_0 から I_1 に低下するまでの時間 T を (2) の保護膜堆積ステップ時間をパラメータとして計測すると図 10(a)に示す結果を得る。堆積ステップ時間と膜厚が比例するため、 T も比例的な関係になると考えられる。つまり T が保護膜除去までの時間を表すと考えられる。一方、(3) のエッチングステップでのバイアス RF 値をパラメータとして計測すると図 10(b)に示す結果を得る。この結果からバイアス RF 値が高くなるにつれて T は短縮することが分かる。これは入射イオンエネルギーが増して保護膜除去レートが高まったためと考えられる。つまり、底面上の保護膜をより短時間で除去するためには、エッチングの初期のみ高バイアス値を印加することが有効であると裏付けられた。



(a)



(b)

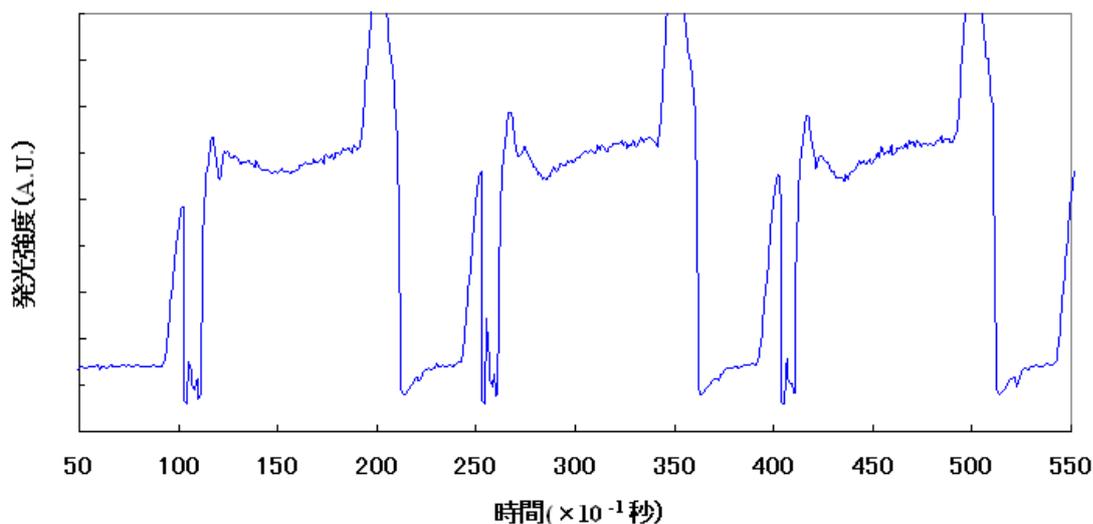
(図10)

次にパターン付ウェハに対して通常のボッシュ法でエッチング処理を行い、同様に $=685.6\text{nm}$ での発光強度変化を計測した。その結果を図 11 に示す。ここではパターン自体が計測結果に及ぼす影響を単純化するために、 $1\mu\text{m}$ 幅の周期的なトレンチパターンのみがパターンニングされた開口率 20% のウェハを用いた。ベアウェハでの計測結果 (図 9) とは次の 2 点で異なっている。

- (1) 波形変化が連続的であり、ステップの切替タイミングの前後でノイズ的な強度変化が重畳している。

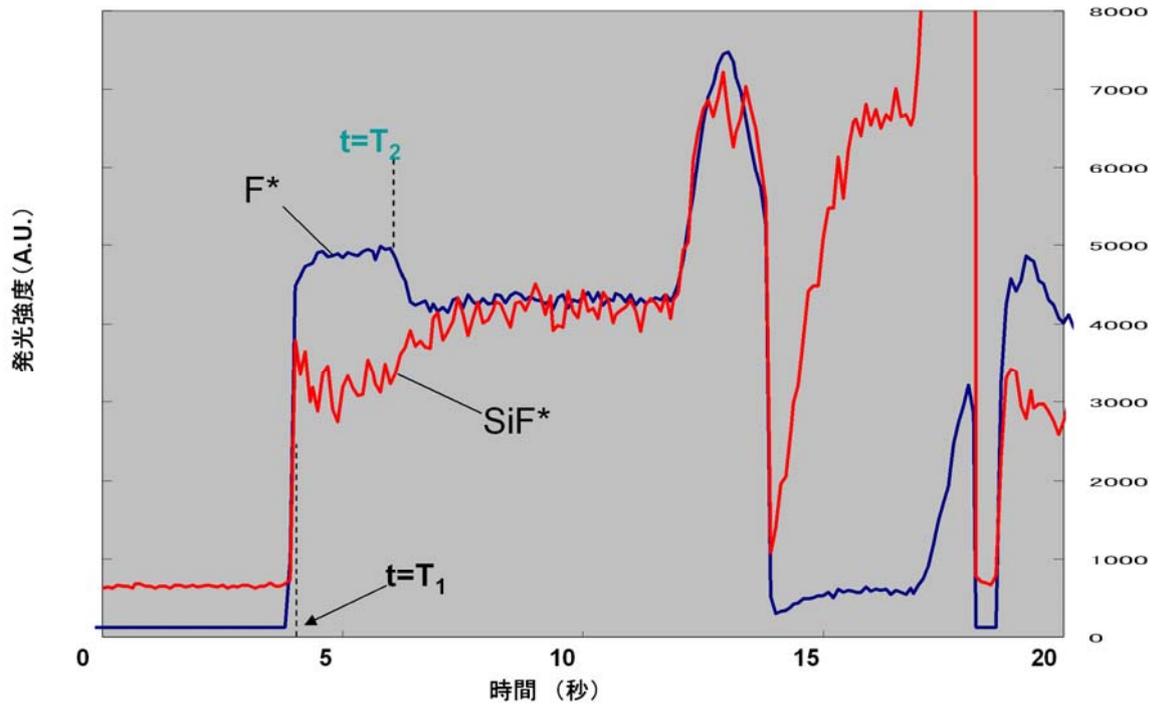
(2) 底面保護膜除去に伴う強度変化 (I) が小さい。

(1) は実際のボッシュ法がステップの切替タイミングの直前から次のプロセスガスがオーバーフローし始め、置換に一定の時間を要することに起因する。つまり切替タイミングの前後で導入ガス、圧力等が変動する過渡状態が存在するため、これに関連してプラズマ発光強度が過渡的に変動することによると考えられる。(2) についてはベアウェハのケースでの開口率変化 (0% 100%) と異なり、パターン付ウェハで底面保護膜が除去されたことによる開口率変化は 0%からパターン開口率 (この場合は 20%) であり、その分 F 消費量の増加幅が小さいことによる。(1) の切替タイミングに伴うノイズについては、過渡状態をなくすためのプロセス面での工夫を加えて再度発光強度変化を計測した。



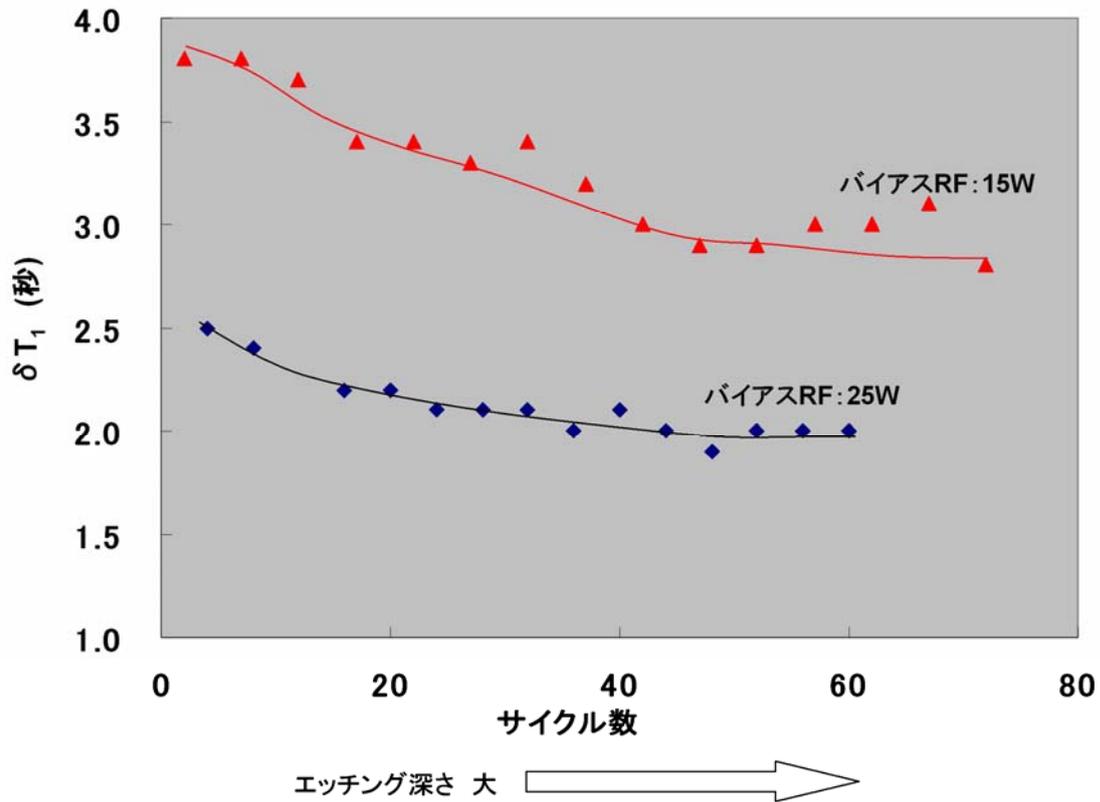
(図11)

その結果を図 12 に示す。図 11 との比較からも分かるように過渡状態に伴うノイズを抑制することができ、Fラジカルピークの発光強度低下を検出できている。また、SiFラジカル ($\lambda = 777.0\text{nm}$) の発光強度増加も同時に検出できている。つまり予想通り (1) 式の反応に伴う発光強度の変化を検出できることが確認できた。これらの結果からこの時点が底面保護膜消滅のタイミング ($T=t_2$) であると考えられる。両者を比較すると SiFラジカルの方がノイズが大きい。一方、エッチングが進行してトレンチが深くなった場合に Fラジカルの強度変化は徐々に小さくなっていくのに対し、SiFラジカルの強度変化はあまり変化がない。こうした特徴を踏まえ、実際にモニタリングに用いる際はどちらかの波形、もしくは両方の波形の差分、比を用いればより明確に検出できると考えられる。



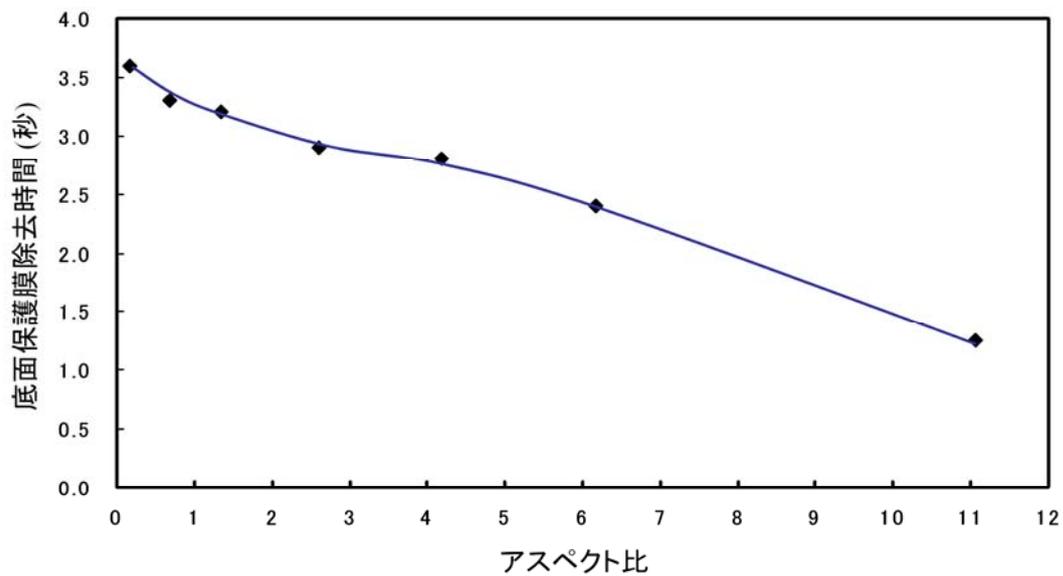
(図12)

エッチングステップ開始から底面保護膜が除去されるまでの時間 $T_1 (= t_2 - t_1)$ をエッチングの進行 (ステップ数) とバイアス RF 値をパラメータとして計測した結果を図 13 に示す。この結果からエッチングの進行と共に保護膜の残存時間: T_1 は短くなっていくことがわかる。これはトレンチが深くなるにつれて底面上に形成される保護膜厚は薄くなるのに対し、底面にほぼ垂直方向から入射するイオン密度には大きな変化はなく除去レートがほぼ一定であるためと考えられる。



(図13)

参考までに実際の各アスペクト比におけるエッチング結果とプロセス時間の関係から、断面アスペクト比とその時点での底面保護膜除去時間との関係を算出したグラフを図14に示す[3]。プロセス条件に若干の相違があるので単純な比較はできないが、この結果からもアスペクト比が増加するにつれて保護膜除去時間が短縮する傾向があり、今回のモニタリング結果の妥当性を示すデータといえる。



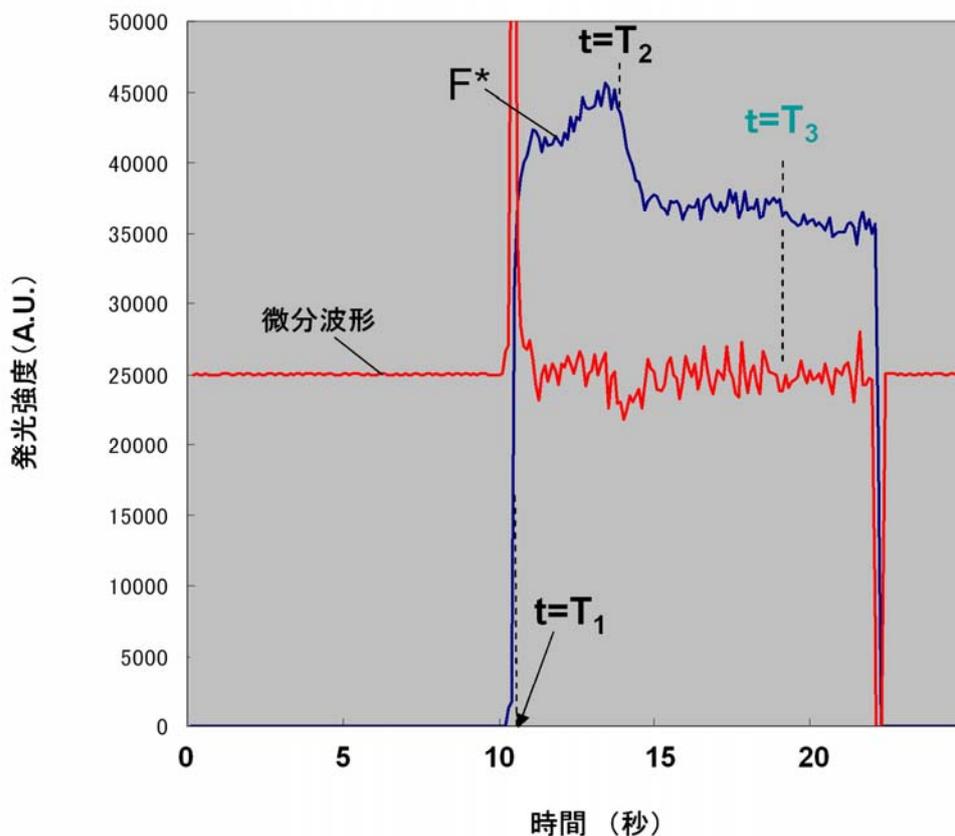
(図14)

一方、側壁保護膜の消滅タイミング ($T=t_3$) は t_2 ほど明瞭には検出できなかった。原理的には側壁保護膜についても消滅の前後で発光強度変化が見られるはずである。プロセス開始から3～4サイクル目までは t_2 と同様、F ラジカルのわずかな強度低下のタイミングが検出できた (図 15)。しかし SiF ラジカルの発光強度変化はノイズが大きく検出できなかった。また4サイクル目以降では F ラジカルの発光強度変化も見られなくなった。これは、

- (1) 入射イオンが多少斜め方向から側壁面に衝突したとしてもスパッタ効果が小さいため、完全除去のタイミングが底面ほど明確でない。
- (2) 特にトレンチが深くなるほど、内部には F ラジカルが滞留気味になり、反応生成物 (SiF_x) との置換に時間を要するようになる。

という2つの理由によると考える。しかしながら検出した $T_2 (=t_3 - t_1)$ はほぼ妥当な値と考えられる。なぜなら1回あたりのエッチングステップ時間をこれよりも長く設定したプロセス条件では、トレンチ幅は徐々に拡大していくためである。

プロセスが進行してトレンチが深くなっていった場合、 T_2 も T_1 と同様に徐々に短縮すると考えられる。しかしながら今回のモニタリング手法ではこの傾向を精度良く検出することができないため、プロセス開始初期に計測した T_2 を代表値としてフィードバック制御に反映することとする。今後、 T_2 検出の高感度化が課題である。

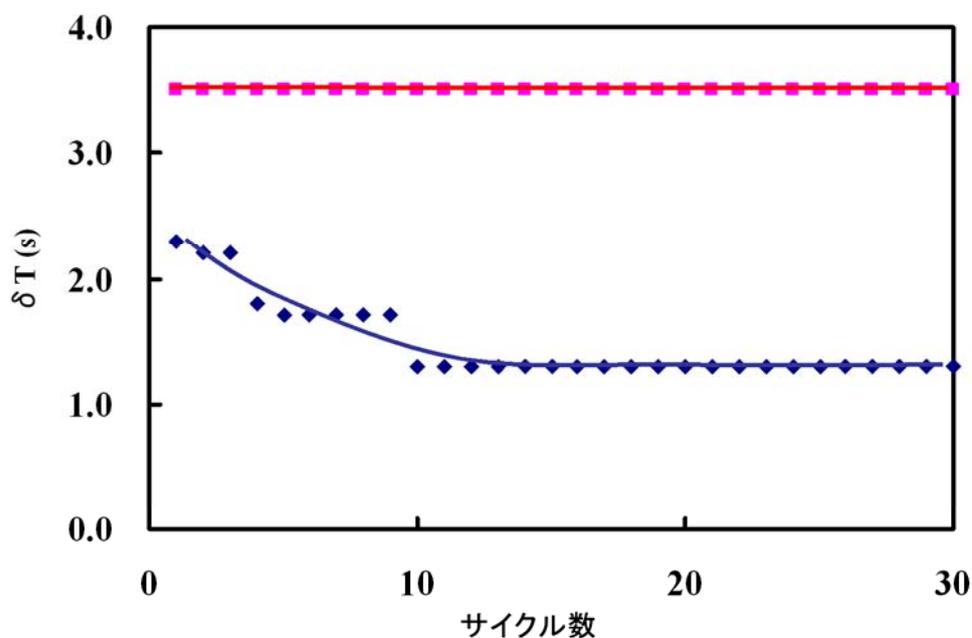


(図15)

4. モニタリング結果を用いた模擬フィードバック制御エッチング

最後に、今回得られたモニタリング結果を用いてプロセス条件にフィードバック制御をかけた場合に、エッチング結果に及ぼす効果を検証した。今回の装置構成では実際にフィードバック制御を行うことはできなかつたため、予めモニタリング結果から求めた t_2 を用いて1サイクル毎にバイアス RF 値の切替タイミングを、 t_3 からエッチングステップ時間を設定して模擬的なフィードバック制御状態を設定してエッチング結果を調べた。参考のために従来からあるバイアス RF の 2 値制御、つまりモニタリング結果を用いずに、バイアス RF 値の切替タイミングとエッチングステップ時間を予め設定した場合(ケース1)と、通常のボッシュ法のプロセス条件(ケース2)で同一時間のエッチングを行い、3つのケースにおいてエッチングレートと断面形状を比較した。

模擬フィードバック制御と、ケース1の場合におけるバイアス切替タイミングの相違を図16に示す。模擬フィードバック制御時にはモニタリング結果に合わせてステップ数と共に徐々に切替タイミングを短縮しているのに対し、ケース1では3.5sに固定している。エッチングステップ時間はどちらのケースでも12.6s/回に統一している。また両ケースともエッチングステップ時のバイアス RF の High 値、Low 値はそれぞれ36W,5Wに統一している。つまり両者の違いはバイアス RF 値の切替タイミングをプロセス進行の実情に合わせて徐々に変化させていくか、予め設定した値で固定するかの違いのみである。なお、ケース2の通常のボッシュ法ではエッチングステップ内でバイアス RF 値は一定である。3つのケースにおけるプロセスパラメータの比較を表にまとめる。



(図16)

(表3)

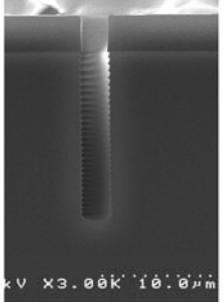
	模擬フィードバック	ケース1	ケース2
保護膜堆積ステップ時間	5.0 秒		
エッチングステップ時間	12.6秒		7.0秒
バイアス切替	Hbias 2.3~1.3秒 Lbias 10.3~11.3秒	Hbias 3.5秒 Lbias 9.1秒	—
SF ₆ 流量	170sccm		
C ₄ F ₈ 流量	120sccm		
プラズマ生成RF	600W		
バイアスRF	Hbias 36W Lbias 5W		23W
サイクル数	30		44
プロセス時間	528秒		

エッチング結果の比較を図 17 に示す。模擬フィードバック制御を行った場合は、通常のボッシュ法でのエッチング結果に比べて 1.8 倍程度エッチレートが向上した。切替タイミングを固定した場合（ケース1）に比べてもエッチレートが向上している。さらにエッチングの異方性で比較しても、ケース1では通常のボッシュ法（ケース2）に比べて低下しているのに対し、模擬フィードバック制御時にはこれらよりも向上する結果が得られた。これは模擬フィードバック制御時ではプロセス進行に合わせたバイアスRF値の切替で、エッチングステップ期間中ほぼ側壁面上に保護膜が残存できているのに対し、ケース1ではバイアスRFのHigh値の設定時間が実際よりも長すぎるため、側壁面上の保護膜が消滅が早まり、ステップの終盤で側壁表面にSiが露出してエッチングされるためだと考えられる。

つまり、今回確立したモニタリング手法とそれを用いたフィードバック制御を用いれば、エッチング異方性を維持、もしくは向上させつつエッチレートも向上させることが可能になる。これは従来のエッチレート向上手法では不可能であったことであり、今回開発したプロセスモニタリング手法の意義は大きいといえる。

なおこのプロセス高速化を、温暖化ガスの排出量という観点から換算すると、同一の深さまでエッチングする際の温暖化ガス排出量はプロセス時間短縮によって45%程度低減することになる。

今回の結果は、模擬的なフィードバック制御の効果を見積もったものであり、実際にエッチング装置にフィードバック機構を追加して、モニタリング用の発光分光器からの計測結果をリアルタイムに反映させれば、さらに効果が向上すると考えられる。

	模擬フィードバック制御 (切替タイミング可変)	ケース1 (切替タイミング固定)	ケース2 (通常のボッシュ法)
設定条件	(depo5s/Etch@Hbias2.3 ~1.3s+Lbias10.3~11.3s) ×30cycle	(depo5s/Etch@ Hbias3.5s+Lbias9.1s) ×30cycle	(depo5s/Etch7s) ×44cycle
	Hbias=36W, Lbias=5W		bias=23W
プロセス時間	528秒		
			
エッチレート	2.06 μm/min.	1.77 μm/min.	1.14 μm/min.
上部/底部(μm)	2.30/2.15	2.44/2.59	2.22/2.15
エッチング異方性	60.3	26.4	45.5

(図17)

5. まとめ

本プロジェクトでは、温暖化ガス排出量の削減を目指してSi深堀エッチングプロセスの高速化に取り組んだ。着眼点としてはボッシュ法に対してプロセス進行状況のリアルタイムモニタリング手法を確立し、その信号をプロセスにフィードバック制御することで実質的なSiエッチングの時間割合を増やすというものである。モニタリング手法としては、OESをベースとしてボッシュ法に付随するガス切替等の過渡状態に留意しつつFラジカルの発光強度変化を計測することで、特徴タイミングが検出できることが分かった。このタイミングを用いてバイアスRF値、エッチングステップ時間をフィードバック制御することで、通常のボッシュ法に対してエッチングレートを1.8倍程度に向上させつつエッチング異方性も向上させることができ、当初の狙いを実際に確認することができた。今回のエッチレート向上は、温暖化ガスの削減率に換算すれば約45%であり、代替ガスと併せれば排出量の大幅な削減が期待できる。

6. 参考文献

- [1] Y.Morikawa, T. Koidesawa, T. Hayashi, K. Suu, "A Novel deep etching technology for Si and quartz materials", Thin Solid Films, Vol. 515, pp.4918-4922 (2007)
- [2] S. Aachboun and P. Ranson, "Deep anisotropic etching of silicon", J. Vac. Sci. Technol., A(17), pp.2270-2273 (1999)
- [3] J. Ohara, K. Asami, Y. Takeuchi and K. Sato, "Development of RIE-lag Reduction Technique for Si Deep Etching Using Double Protection Layer Method", IEEJ Transactions on Electrical and Electronic Engineering, Vol.5, pp.125-130 (2010)

)フィードバック制御手法を用いたエッチング最適化

1. 実施内容

技術研究組合 BEANS 研究所殿が提示する「異分野融合型次世代デバイス製造技術開発プロジェクト」に係る低環境負荷型深掘エッチングのためのフィードバック制御に関する以下の作業を実施した。

- ・2つ以上のプラズマ源、および2種類以上のプロセスにおいてリアルタイムモニタリングにより測定される物理量と、プロセスパラメータ（表面反応に関連するパラメータ）との対応関係やプロセスパラメータ算出手法の開発を行い、双方の関連を明らかにした上で整理した。

- ・前記項目で明らかにしたプロセスパラメータを用いて、プラズマエッチングシミュレーションを実施する。あわせて実加工形状に対するエッチングシミュレーション結果の再現性を評価した。

- ・プラズマエッチング装置の変更可なパラメータであるガス流量や出力、バイアス電圧などの装置条件と、リアルタイムモニタリングで得られる物理量との対応を明らかにした上で整理した。

- ・装置条件を用いたプラズマエッチングシミュレーションを実施し、実加工形状の再現性の評価をした。

- ・プラズマエッチングシミュレーション結果から、エッチングプロセスを最適化する条件を検討し、装置条件へとフィードバックするとともに、前述で実施する各種パラメータ・条件の対応関係整理結果とあわせてデータベースとして利用可能な情報として整理した。

- ・エッチングプロセスおよびエッチング加工形状の最適化のためのフィードバック制御技術確立のための設計指針・評価手法を開発した。

上記、実施内容の関連性を図 18に示す。

実施内容は相互に深く関連しており、同時に作業を行ったものもある。次章以降において、作業結果を報告する。

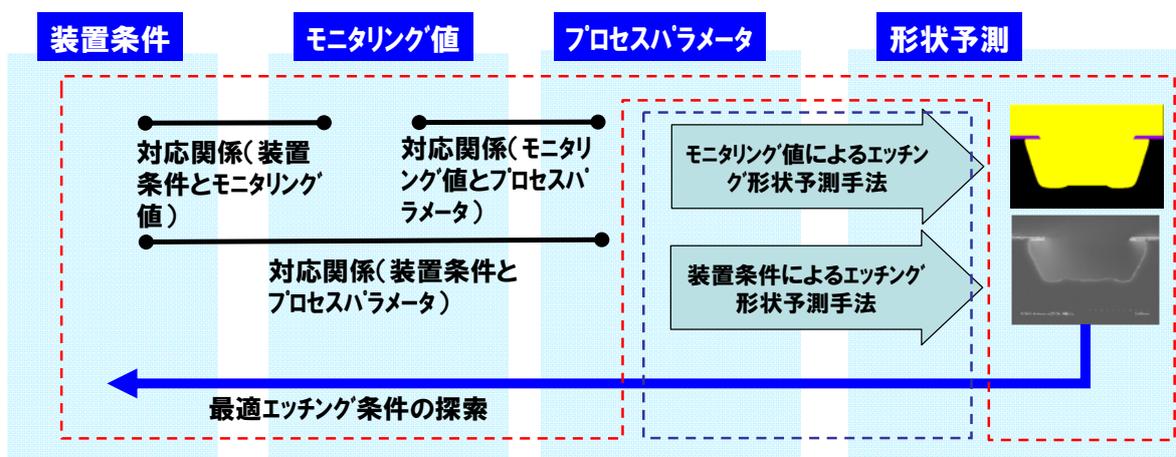


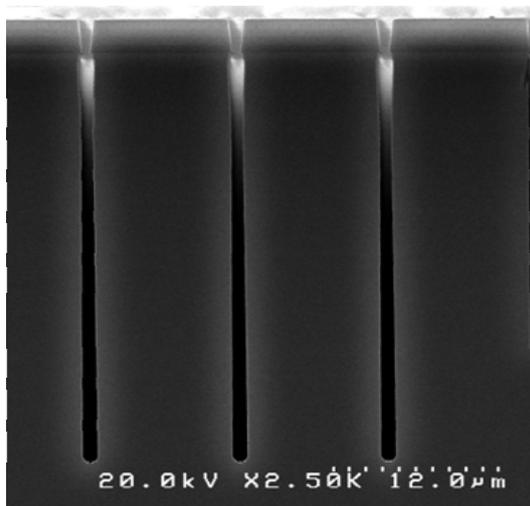
図 18 実施内容の関連性

2. リアルタイムモニタリング値および装置条件をもとにした Bosch プロセスシミュレーション手法の開発

本章では、Bosch プロセスを対象とし、実加工形状を再現可能なシミュレーション手法の開発を行う。

2-1. 対象とした実加工形状

対象としたのは、Bosch プロセスによる深掘エッチングである。Bosch プロセスシミュレーション手法を開発するにあたり、参考とした実加工形状の例を図 19 に示す。Bosch プロセスでは SF6 をプラズマ源としたエッチングプロセス、C4F8 をプラズマ源としたデポジションプロセスを交互に繰り返すことにより深掘エッチングを実現している。この例では、1 サイクルあたりのエッチングプロセス時間を 7 秒、デポジションプロセスを 7 秒、としており、トータルのプロセス時間は約 40 分である。なお、エッチング時のバイアスパワーは 36W である。



加工条件

プロセス時間:約40分

エッチングプロセス:7秒

デポジションプロセス:7秒

バイアスパワー:36W

加工結果

深さ:約30um

底面保護膜除去時間:約3秒

図 19 Bosch プロセスによる実加工形状例

この例では 30um の深掘エッチングが実現している。また、発光分光によるリアルタイムモニタリングにより、底面保護膜の除去時間が約 3 秒であることがわかっている。

シミュレーション手法の開発に当たっては、バイアスパワーを 5W、20W とした場合の実加工形状も対象とし、次項に示すパラメータの同定を行った。

2-2. プロセスパラメータの同定

プラズマエッチングシミュレーションによる加工形状予測を行うためには、シミュレーションで必要となる各種パラメータを同定する必要がある。パラメータとして代表的なものは

- ・ 化学反応に関するもの（反応素過程、反応率等）
 - ・ プラズマから照射するフラックスに関するもの（角度分布、エネルギー分布）
- がある。

本節においては、実加工形状、加工条件およびリアルタイムモニタリング結果（底面保護膜除去時間）をもとに、各種パラメータを同定する。

2-2-1. パラメータ同定のための情報

パラメータの同定に利用できる情報は以下の通りである。

- ・ 実加工形状（寸法、形状）
- ・ 加工条件（バイアス値、エッチング／デポジション時間）
- ・ リアルタイムモニタリング結果（底面保護膜除去時間）

加工条件については、ガス流量やプラズマ圧力等の変更により加工形状が変化するため重要な情報となるが、今回の実験においてはバイアス値およびエッチング／デポジション時間のみをパラメータとしていたため、これらの情報のみを利用することとした。

2-2-2. 反応素過程および反応パラメータの同定

前述の通り Bosch プロセスは SF₆ をプラズマ源としたエッチングプロセス、C₄F₈ をプラズマ源としたデポジションプロセス（保護膜形成）を交互に繰り返すことにより深掘エッチングを実現しているプロセスである。そのため、反応素過程としては、エッチングプロセスにおける反応、デポジションプロセスにおける反応、のそれぞれを定義する必要がある。本研究においては、対象とする加工形状を再現するため、表 V.2.3 iii) 1 に示す 11 の反応を定義した。

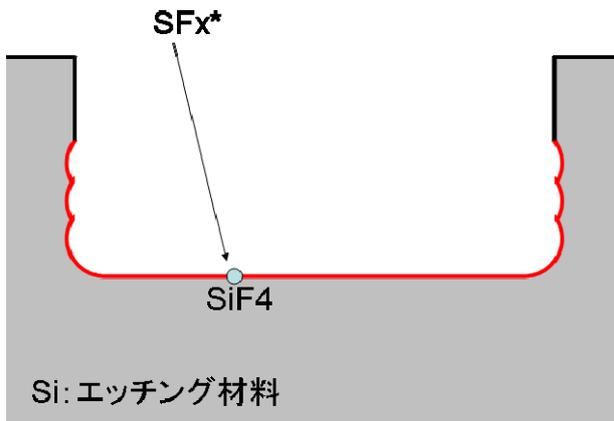
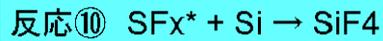
エッチングプロセスでは、イオンアシスト反応、中性粒子の吸着反応、熱励起反応の 3 つを、デポジションプロセスでは、中性粒子の吸着反応を考慮した。同表には、加工形状を再現するためにあわせこみを行った反応パラメータ（吸着率、エッチング収率、反応係数、活性化エネルギー）もあわせて示す。

なお、ここで示した反応素過程および反応パラメータは加工条件であるバイアス値やエッチング／デポジション時間には依存しないものとした。また、今回対象としている加工条件ではイオンやラジカルの照射エネルギーは大きく変化しないため、各反応パラメータはエネルギーにも依存しないものとした。

表 V.2.3 iii) 1 Bosch プロセスシミュレーションにおいて設定した反応素過程および反応パラメータ

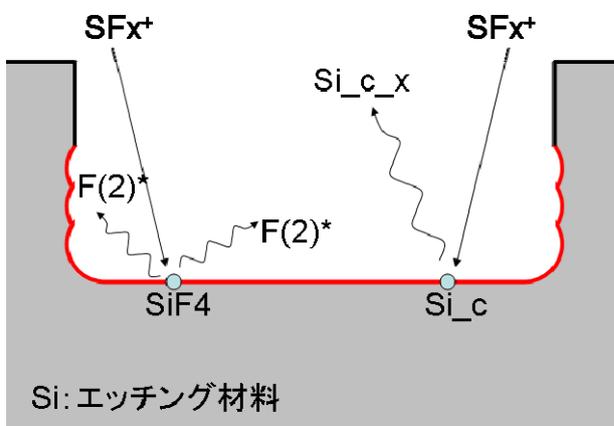
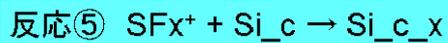
NO.	反応式	エッチング/デポ	表面反応モデル	モデルパラメータ	固定値	単位	備考
1	$CxFy^* + Si \rightarrow Si_c$	デポジションプロセスにおける反応	中性粒子の吸着過程	吸着率	0.048	[-]	・ Si 上に付着し保護膜 Si_c を形成
2	$CxFy^* + Si(2) \rightarrow Si_c$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.048	[-]	・ 同上
3	$CxFy^* + Si_c \rightarrow Si_c$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.0099	[-]	・ 同上
4	$CxFy^* + SiF4 \rightarrow Si_c$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.06	[-]	・ 同上
5	$SFx^* + Si_c \rightarrow Si_c_x$	エッチングプロセスにおける反応	イオン・エッチング過程	エッチング収率	1.78	[-]	・ 保護膜 Si_c のエッチング
6	$SFx^{*+} + SiF4 \rightarrow F(2)^*$		イオン・エッチング過程	エッチング収率	3.7	[-]	・ 蒸発物 SiF4 のエッチング ・ 反応生成物として F(2)*フラックスを定義
7	$F(2)^* + Si \rightarrow Si(2)$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.25	[-]	・ Si 上に蒸発物 Si(2)を形成
8	$F(2)^* + SiF4 \rightarrow Si(2)$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.25	[-]	・ 同上
9	$Si(2) \rightarrow Si(2)$		熱励起エッチング過程	反応係数 活性化エネルギー	0.5E16 0.0477	[1/ 秒] [eV]	・ 蒸発物 Si(2)の蒸発 (離脱)
10	$SFx^* + Si \rightarrow SiF4$		中性粒子の吸着過程	吸着率	0.25	[-]	・ Si 上に蒸発物 SiF4 を形成
11	$SiF4 \rightarrow SiF4$		熱励起エッチング過程	反応係数 活性化エネルギー	1.55E16 0.0477	[1/ 秒] [eV]	・ 蒸発物 SiF4 の蒸発 (離脱)

以下に、各反応の概要を示す。



反応⑩ プラズマ側からのラジカル照射により、Si上に蒸発物SiF4を形成

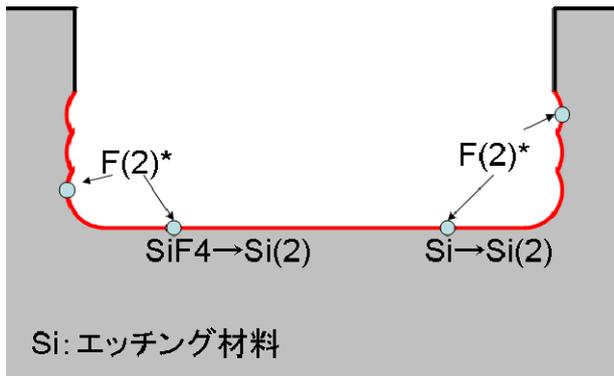
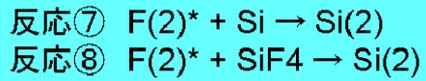
図 V.2.3)-3 エッチングプロセスにおける中性粒子の吸着過程 (プラズマからのラジカル照射)



反応⑤ プラズマ側からのイオン照射により、Si上の保護膜Si_cをエッチング。生成物は系外に除去

反応⑥ プラズマ側からのイオン照射によりSiF4をエッチング。反応生成物F(2)*はフラックスとして2次反応に寄与

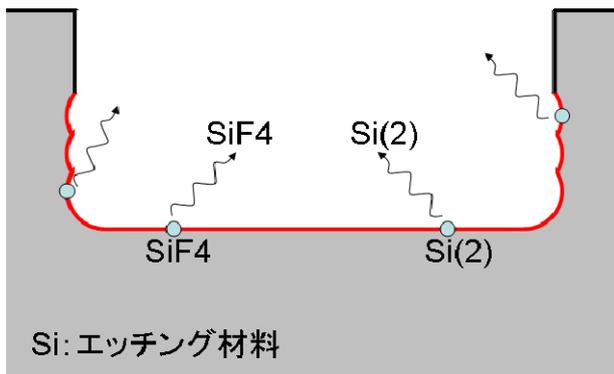
図 V.2.3)-4 エッチングプロセスにおけるイオン・エッチング過程 (プラズマからのイオン照射)



反応⑦ 反応生成物 $F(2)^*$ がSiと反応してSi上に蒸発物Si(2)を形成

反応⑧ 反応生成物 $F(2)^*$ が SiF_4 と反応してSi上に蒸発物Si(2)を形成

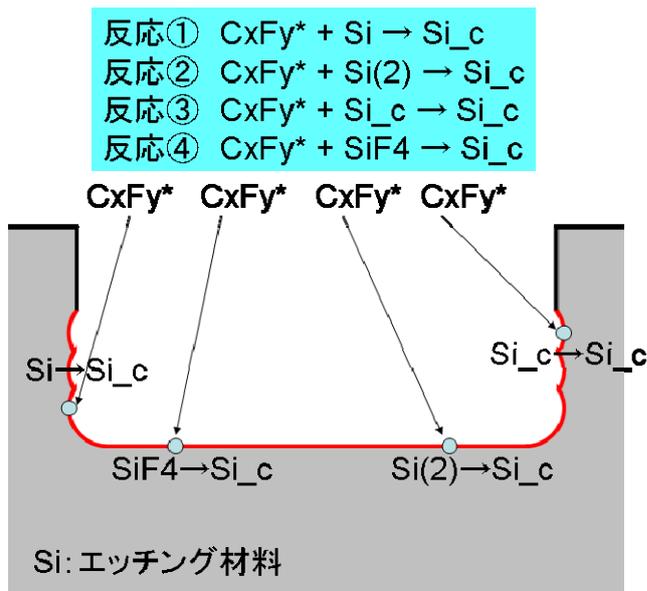
図 V.2.3)- 5 エッチングプロセスにおける中性粒子の吸着過程 (反応生成物照射)



反応⑨ 熱励起反応により蒸発物Si(2)が離脱

反応⑩ 熱励起反応により蒸発物 SiF_4 が離脱

図 V.2.3)- 6 エッチングプロセスにおける熱励起エッチング過程



反応①～④ プラズマ側からのラジカル照射によりSi上に保護膜Si_cを形成

図 V.2.3)-7 デポジションプロセスにおける中性粒子の吸着過程 (プラズマからのラジカル照射)

2-2-3. フラックスの同定

プラズマからはイオンやラジカルが照射されており、それらによる反応を起因として、エッチングやデポジション反応が起きる。また、反応過程において生成された反応生成物が加工面に再照射することによる反応も起きている。これら照射フラックスを決めるのが本節の目的である。

本手法の開発で定義した化学反応および実現象の検討を行い、中性粒子の吸着反応については等方的なフラックスであり、フラックスの総量のみがパラメータとなるものと仮定した。イオン・エッチング反応に関連するフラックスについては急峻な角度分布であるものとし、実加工形状を再現できる分布として、半値半幅 0.5° のガウス分布であるものとした。この場合も総量のみがパラメータとなる。

以下、今回検討したフラックス総量の同定手法について説明する。本研究においては装置条件としてバイアス値がパラメータとなっているが、ガス流量 (flow rate) やコイルパワーに対するあわせこみ手法も検討したので、あわせて示す。

なお、以下のあわせこみにおいて、リアルタイムモニタリング結果 (底面保護膜除去時間) を再現できるようフラックスの総量を決定している。

< 基準エッチング形状の合わせ込み >

- (1) 1 個の基準エッチング形状 (実測値) に対する合わせ込みの場合
デポ過程のラジカルフラックスを設定する。

エッチング過程のイオンフラックスを設定する。
 エッチング過程のラジカルフラックスを設定する。
 計算を実行する。
 結果を評価する。

-1 側壁が壊れた場合、①に飛びデポ過程のラジカルフラックスを、例えば、25%程度増やし、再度計算を実行する。

-2 エッチング深さが実測値の半分以下の場合、②に飛びエッチング過程のイオンフラックスを、例えば 50%程度増やし、再度計算を実行する。

-3 それでも、エッチング深さが変わらないならば、③に飛びエッチング過程のラジカルフラックスを、例えば倍にし、再度計算を実行する。

-4 それでも、エッチング深さが変わらないならば、①に飛びデポ過程のラジカルフラックスを、例えば 50%減らし、再度計算をする。

-5 エッチング深さ L_{cal} が実測値 L_{exp} に近い場合、③に飛びエッチング過程のラジカルフラックスを $L_{\text{exp}}/L_{\text{cal}}$ 倍し、再度計算を実行する。

(2) 数個の基準エッチング形状に対する合わせ込みの場合

この場合も上記 (1) と同じである。

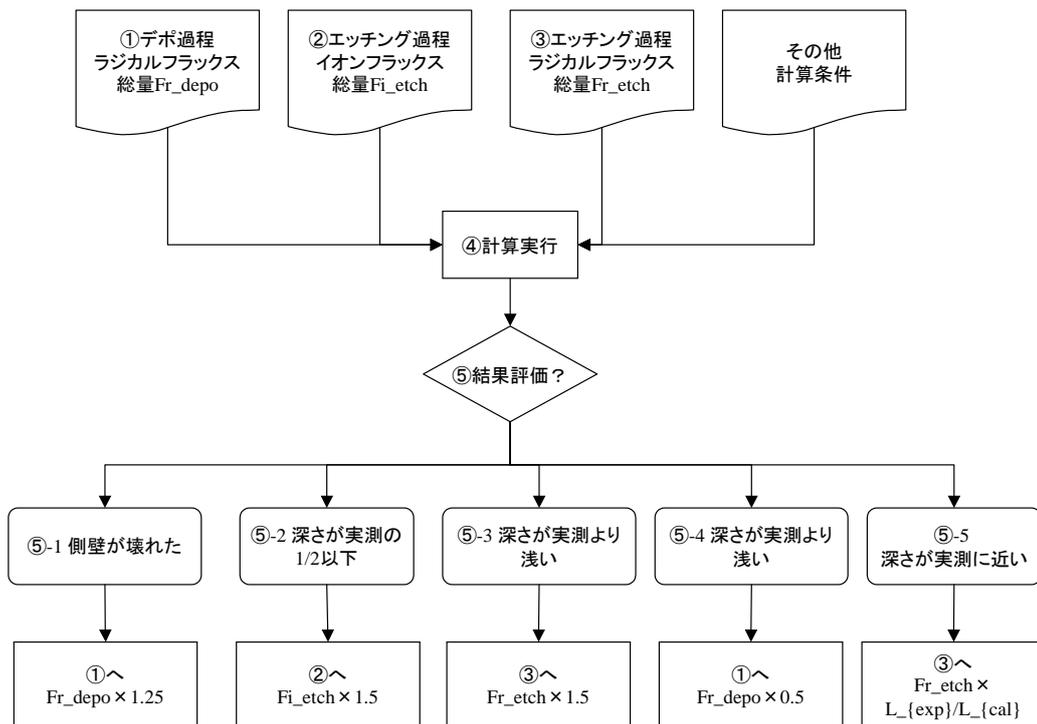


図 V.2.3)- 8 基準エッチング形状に対する合わせ込み手順

<SF6 flow rate に対する合わせ込み>

(1) フィッティングパラメータ

SF6 の **flow rate** が変化した場合、フィッティングパラメータを決めるのに次のことを仮定する。

デポ過程におけるラジカルフラックスは変わらない。

エッチング過程におけるラジカルフラックスの総量が増える。

エッチング過程におけるイオンフラックスの総量は増えるが、角度分布、エネルギー分布は変わらない。

従って、フィッティングパラメータはエッチング過程におけるラジカルフラックスの総量とイオンフラックスの総量となる。

(2) 合わせ込み手続き

ラジカルフラックスの基準値での総量を **flux-rad-sf6**、イオンフラックスの基準値での総量を **flux-ion-sf6** で表す。

総量が **flux-rad-sf6/3.0**、**flux-rad-sf6/2.5**、**flux-rad-sf6/2.0**、**flux-rad-sf6/1.5**、**flux-rad-sf6**、**flux-rad-sf6×1.5**、**flux-rad-sf6×2.0**、**flux-rad-sf6×2.5**、**flux-rad-sf6×3.0** のラジカルフラックスを準備する。

総量が **flux-ion-sf6/3.0**、**flux-ion-sf6/2.5**、**flux-ion-sf6/2.0**、**flux-ion-sf6/1.5**、**flux-ion-sf6**、**flux-ion-sf6×1.5**、**flux-ion-sf6×2.0**、**flux-ion-sf6×2.5**、**flux-ion-sf6×3.0** のイオンフラックスを準備する。

上で作成したラジカルフラックスとイオンフラックスの組み合わせに対して、エッチング形状を計算する。

計算したエッチング形状とある SF6 **flow rate** での測定値との比較から、測定値を再現するラジカルフラックスとイオンフラックスの組を取り出す。

上の手続きで、SF6 **flow rate** の離散的な幾つかの値に対するラジカルフラックスとイオンフラックスの量がきまる。これらの量を再現するように、SF6 **flow rate** の関数としてのラジカルフラックスとイオンフラックスの関数系（例えば、4 次の多項式）を決める。

⑤で決めた多項式を用いれば、任意の SF6 **flow rate** でのラジカルフラックスとイオンフラックスが求まるので、任意の SF6 **flow rate** でのエッチング形状が計算できる。

<C4F8 **flow rate** の合わせ込み>

(1) フィッティングパラメータ

C4F8 の **flow rate** が変化した場合、フィッティングパラメータを決めるのに次のことを仮定する。

エッチング過程におけるラジカルフラックスは変わらない。

エッチング過程におけるイオンフラックスは変わらない。

デポ過程におけるラジカルフラックスの総量のみが増える。

従って、フィッティングパラメータはデポ過程におけるラジカルフラックスの総量となる。

(2) 合わせ込み手続き

ラジカルフラックスの基準値での総量を flux-rad-c4f8 で表す。

総量が flux-rad-c4f8/3.0、flux-rad-c4f8/2.5、flux-rad-c4f8/2.0、flux-rad-c4f8/1.5、flux-rad-c4f8、flux-rad-c4f8 × 1.5、flux-rad-c4f8 × 2.0、flux-rad-c4f8 × 2.5、flux-rad-c4f8 × 3.0 のラジカルフラックスを準備する。

上で作成したラジカルフラックスに対して、エッチング形状を計算する。

計算したエッチング形状とある C4F8 flow rate での測定値との比較から、測定値を再現するラジカルフラックスを取り出す。

上の手続きで、C4F8 flow rate の離散的な幾つかの値に対するラジカルフラックスの量がきまる。これらの量を再現するように、C4F8 flow rate の関数としてラジカルフラックスの関数系（例えば、4 次の多項式）を決める。

④で決めた多項式を用いれば、任意の C4F8 flow rate でのラジカルフラックスが求まるので、任意の C4F8 flow rate でのエッチング形状が計算できる。

<Coil power の合わせ込み>

(1) フィッティングパラメータ

Coil power が変化した場合、フィッティングパラメータを決めるのに次のことを仮定する。デポ過程におけるラジカルフラックスは変わらない。

エッチング過程におけるラジカルフラックスの総量が増える。

エッチング過程におけるイオンフラックスの総量は増えるが、角度分布、エネルギー分布は変わらない。

従って、フィッティングパラメータはエッチング過程におけるラジカルフラックスの総量とイオンフラックスの総量となる。

(2) 合わせ込み手続き

ラジカルフラックスの基準値での総量を flux-rad-coil、イオンフラックスの基準値での総量を flux-ion-coil で表す。

総量が flux-rad-coil/3.0、flux-rad-coil/2.5、flux-rad-coil/2.0、flux-rad-coil/1.5、flux-rad-coil、flux-rad-coil × 1.5、flux-rad-coil × 2.0、flux-rad-coil × 2.5、flux-rad-coil × 3.0 のラジカルフラックスを準備する。

総量が flux-ion-coil/3.0、flux-ion-coil/2.5、flux-ion-coil/2.0、flux-ion-coil/1.5、flux-ion-coil、flux-ion-coil × 1.5、flux-ion-coil × 2.0、flux-ion-coil × 2.5、flux-ion-coil × 3.0 のイオンフラックスを準備する。

上で作成したラジカルフラックスとイオンフラックスの組み合わせに対して、エッチング形状を計算する。

計算したエッチング形状とある coil power での測定値との比較から、測定値を再現するラジカルフラックスとイオンフラックスの組を取り出す。

上の手続きで、coil power の離散的な幾つかの値に対するラジカルフラックスとイオンフラックスの量が決まる。これらの量を再現するように、coil power の関数としてのラジカルフラックスとイオンフラックスの関数系（例えば、4次の多項式）を決める。

⑤で決めた多項式を用いると、任意の coil power でのラジカルフラックスとイオンフラックスが求まるので、任意の coil power でのエッチング形状が計算できる。

<Bias power の合わせ込み>

(1) フィッティングパラメータ

Bias power が変化した場合、フィッティングパラメータを決めるのに次のことを仮定する。

デポ過程におけるラジカルフラックスは変わらない。

エッチング過程におけるラジカルフラックスは変わらない。

エッチング過程におけるイオンフラックスの総量は変化するが、角度分布、エネルギー分布は変わらない。

従って、フィッティングパラメータはエッチング過程におけるイオンフラックスの総量となる。

(2) 合わせ込み手続き

イオンフラックスの基準値での総量を flux-ion-platen で表す。

総量が flux-ion-platen/3.0、flux-ion-platen/2.5、flux-ion-platen/2.0、flux-ion-platen/1.5、flux-ion-platen、flux-ion-platen×1.5、flux-ion-platen×2.0、flux-ion-platen×2.5、flux-ion-platen×3.0 のイオンフラックスを準備する。

上で作成したイオンフラックスに対して、エッチング形状を計算する。

計算したエッチング形状とある platen power での測定値との比較から、測定値を再現するイオンフラックスを取り出す。

上の手続きで、platen power の離散的な幾つかの値に対するイオンフラックスの量がきまる。これらの量を再現するように、platen power の関数としてのイオンフラックスの関数系（例えば、4次の多項式）を決める。

④で決めた多項式を用いれば、任意の platen power でのイオンフラックスが決まるので、任意の platen power でのエッチング形状が計算できる。

以上の手法を用いて同定したフラックス（バイアス依存性）を表V.2.3 iii)、図V.2.3)-8および図V.2.3)-1に示す。

表V.2.3 iii) 2 吸着反応のフラックス（等方的）

項 目	ラジカル・イオン種	フラックス値[個/cm ²]
エッチングプロセスにおける吸着反応	SFx*	6.4 × 10 ¹⁷
エッチングプロセスにおける吸着反応	CxFy*	4.8 × 10 ¹⁷

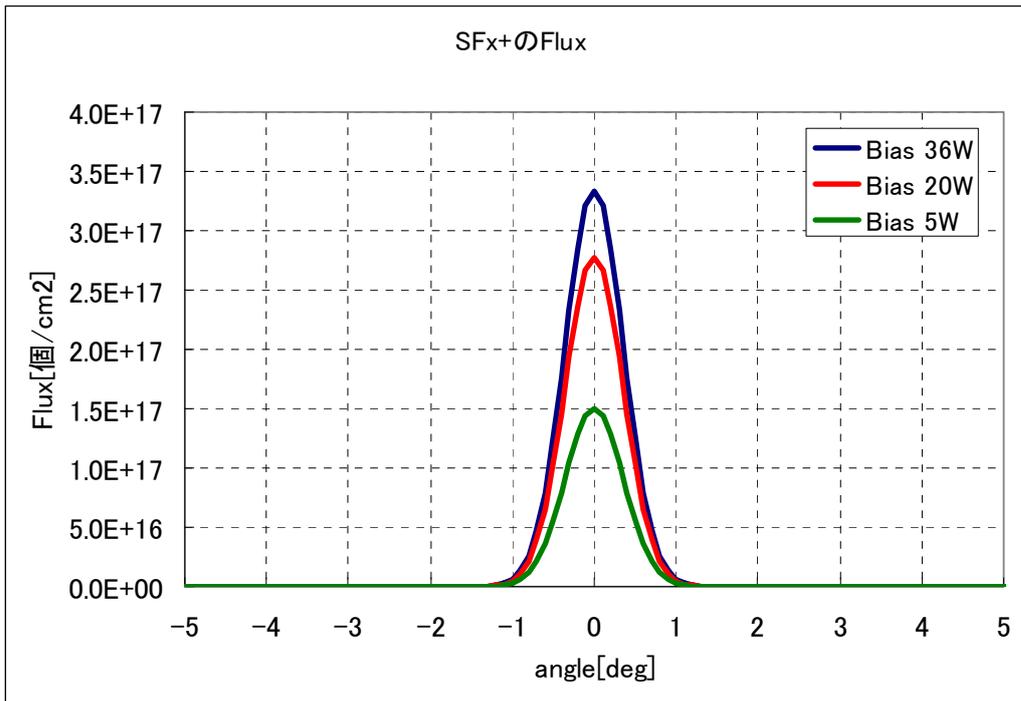


図 V.2.3)- 8 SFx+のフラックス分布 (イオンアシスト反応)

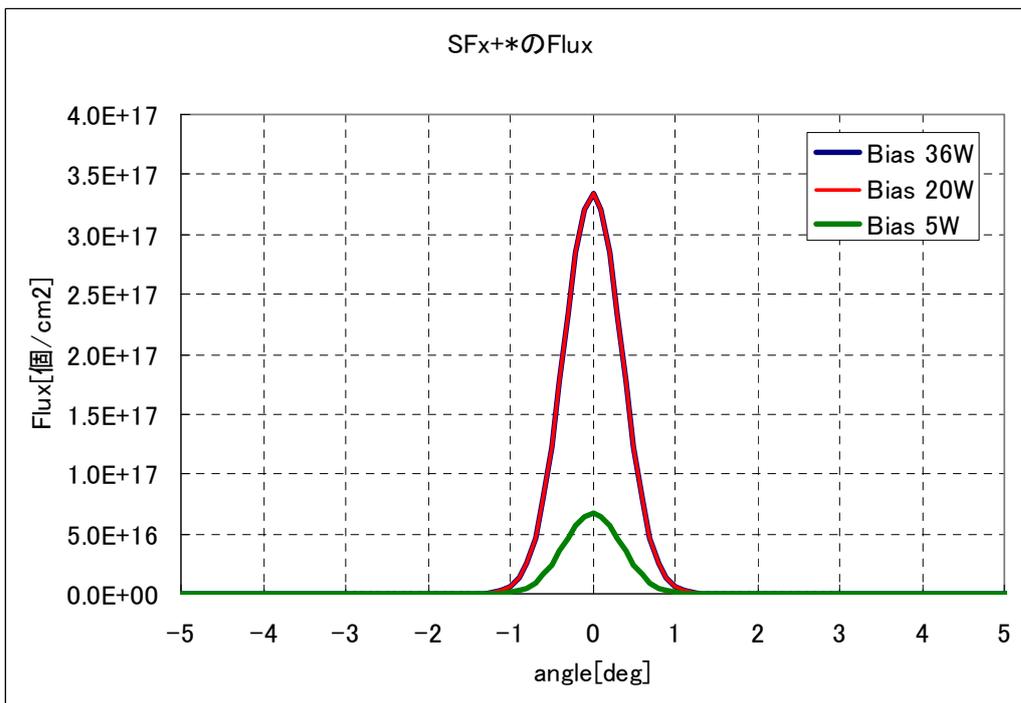


図 V.2.3)- 1 SFx+*のフラックス分布 (イオンアシスト反応)

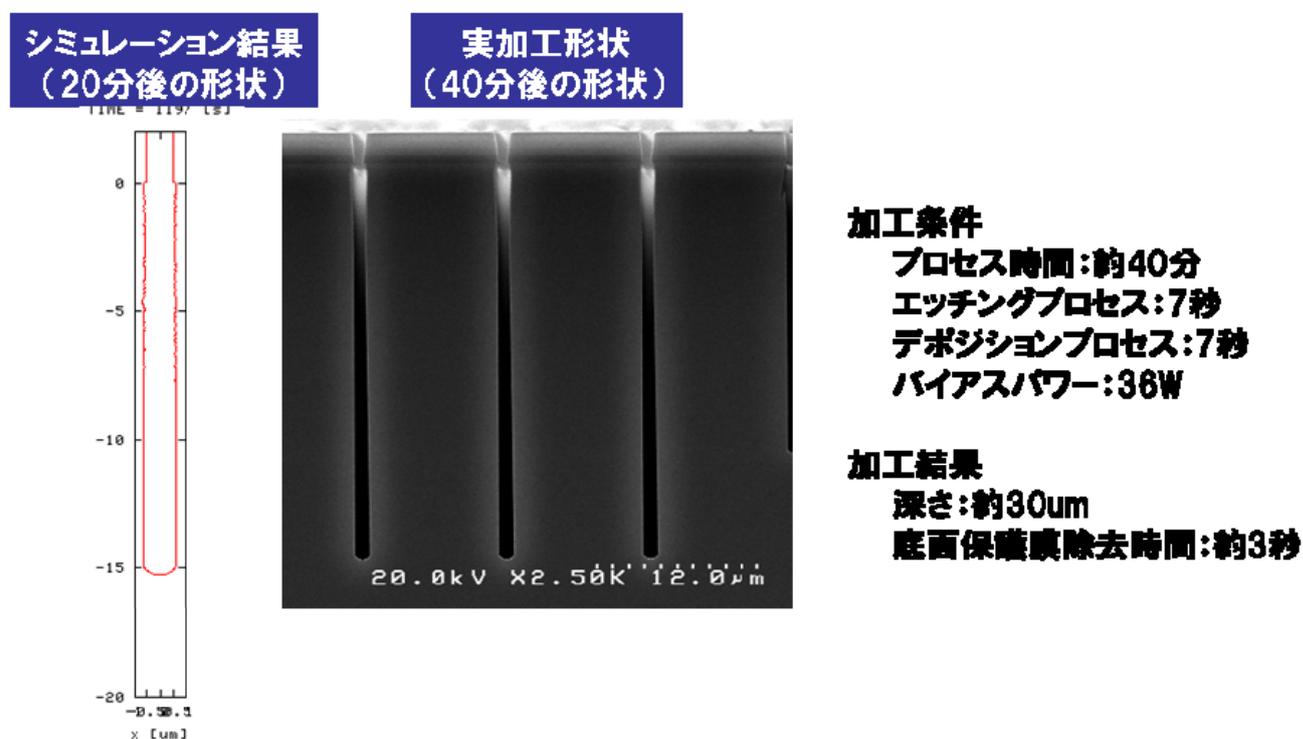
2-3.加工形状再現性の確認

前節までに同定した反応パラメータ、フラックスを用いて、実加工形状（図V.2.3)-2)の再現性確認計算を実施した。

図V.2.3)-2にシミュレーションによる加工形状予測結果と実加工形状の比較結果を、図V.2.3)-3にエッチング深さの時系列を、図V.2.3)-4にエッチングレートとデポジションレートの時系列を示す。

シミュレーションによる加工形状予測結果は実加工形状とよく一致しており、エッチングレートも実加工結果とほぼ一致していることがわかる。

以上より、リアルタイムモニタリング値（底面保護膜除去時間）および装置設定条件をもとにした Bosch プロセスシミュレーション手法が確立できた。



図V.2.3)-2 加工形状の再現性確認結果

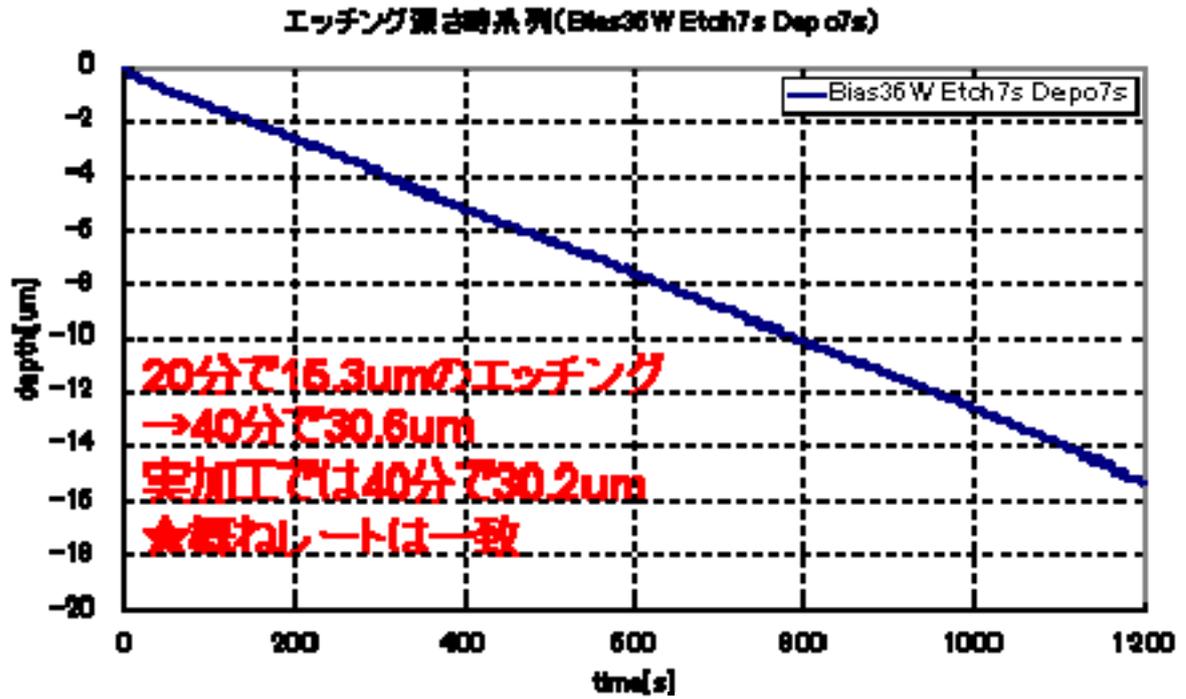


図 V.2.3)- 3 エッチング深さの時系列

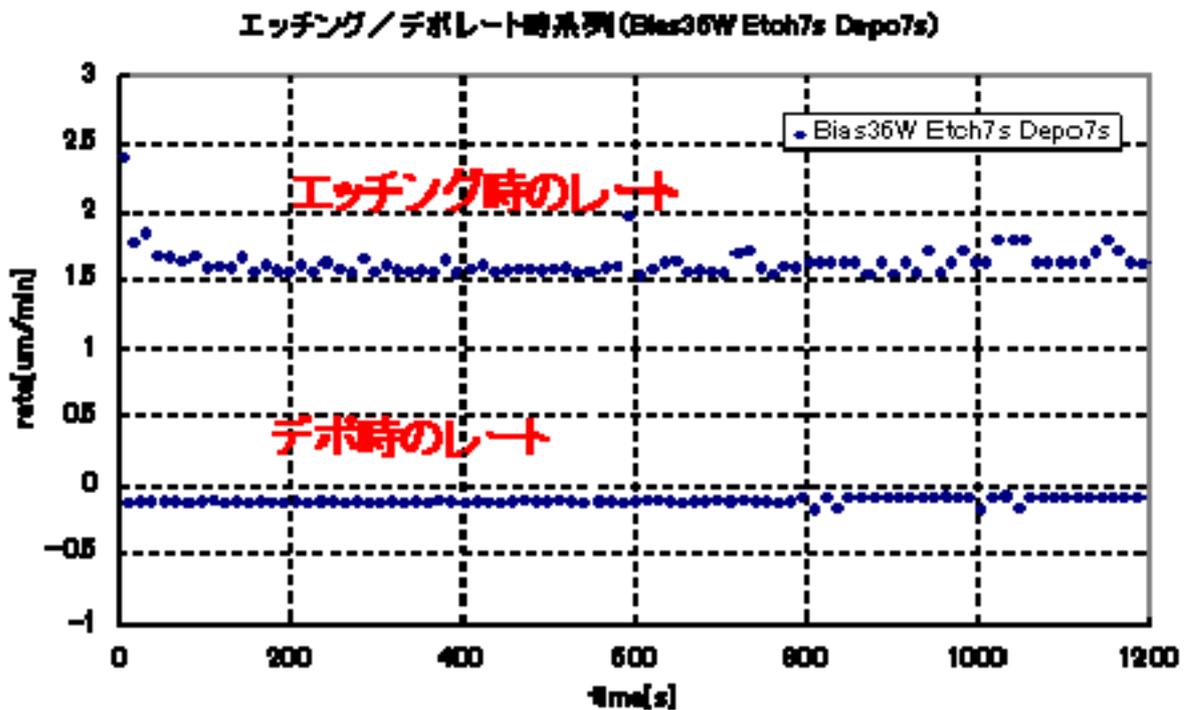


図 V.2.3)- 4 エッチング及びデポジションレートの時系列

3. 保護膜除去タイミングの解析

3-1. 底面保護膜除去タイミングの解析

定義した化学反応に基づきシミュレーションを実施しているため、保護膜の除去タイミングをシミュレーションにより評価することが可能である。

図 V.2.3)-6 に前章で示した Bosch プロセスのシミュレーション例を示す。エッチングプロセスの後にデポジションプロセスが開始され、パターン壁面に保護膜が形成される。その後、エッチングプロセスに入り、まずは底面の保護膜が除去され、その後、底面に現れた Si のエッチングが行われる。この過程は詳細にシミュレーションにより計算されており、図 V.2.3)- に示すように、底面保護膜除去時間を評価することが可能である。

なお、ここで得られている底面保護膜除去時間は、リアルタイムモニタリングで得られている除去時間を再現している。

ここでは、実際に得られているリアルタイムモニタリング値（底面保護膜除去時間）との比較を行ったが、装置条件や加工条件を変更した場合のシミュレーションにより、事前に底面保護膜除去時間を把握することも可能である。

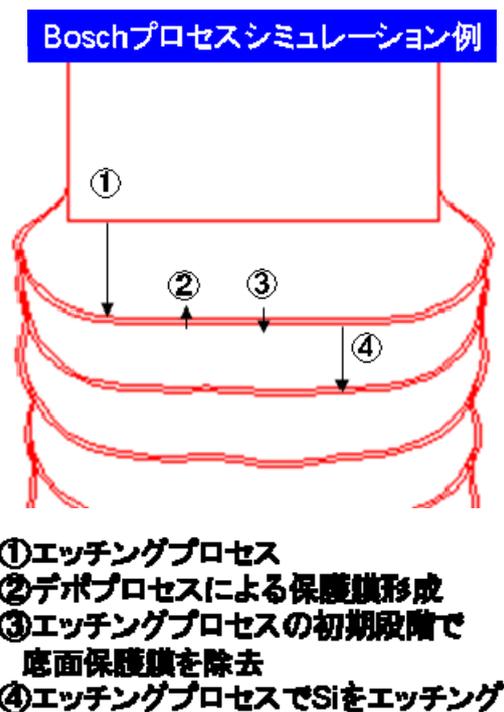


図 V.2.3)- 5 底面保護膜除去の概要

底面保護膜除去時間の推移

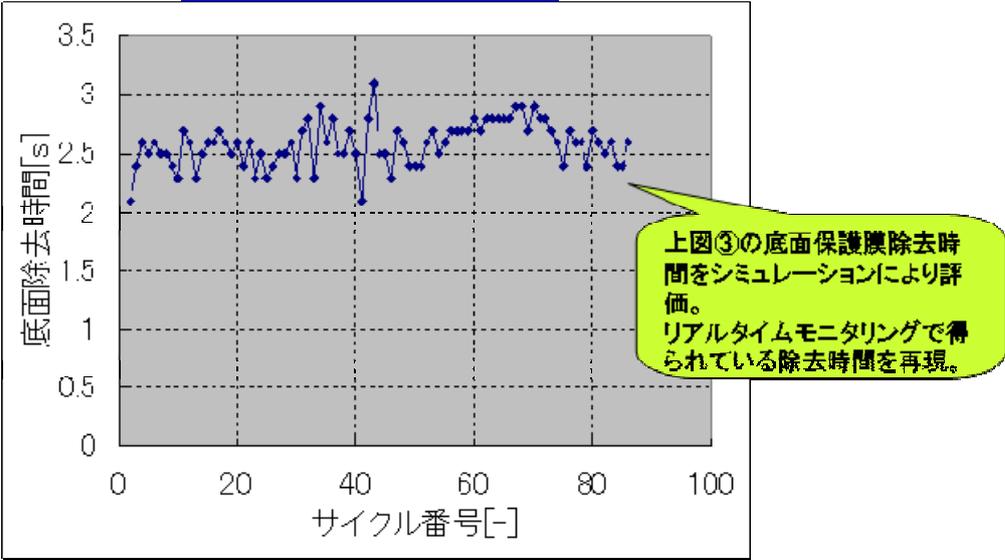


図 V.2.3)- 6 底面保護膜除去時間の推移

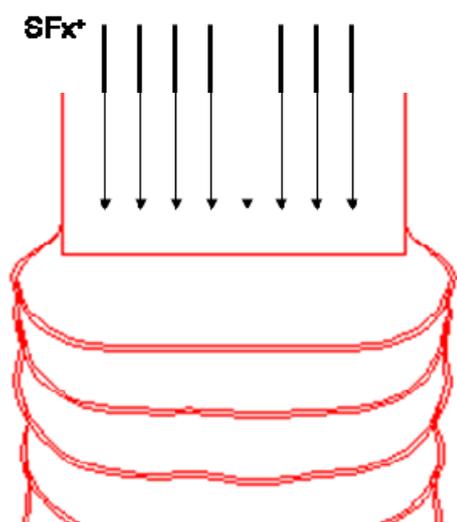
3-2.側壁保護膜除去タイミングの解析

前項で示した通り、底面保護膜の除去タイミングについては、フラックスがほぼ垂直に照射するため、底面の保護膜の除去レートは大きく、形状変化量も大きいため、現状のシミュレーションで評価可能であった。

一方で、側壁保護膜の除去タイミングについては、フラックスがほぼ垂直に照射するため、側壁の保護膜の除去レートは極めて小さい。そのため形状変化量も底面保護膜の場合と比較すると非常に小さいものとなる。この変化をシミュレーションにより評価するためには膨大なメッシュが必要となり、現在の環境では評価が困難であった。

但し、原理的には側壁保護膜除去タイミングを評価することは可能である。

プラズマからのフラックス照射概要



エッチング時にフラックスはほぼ垂直に照射

図 V.2.3)- 15 プラズマからのフラックス照射の概要

4. フィードバック制御によるエッチング最適化

4-1. エッチング形状予測

Bosch プロセスを最適化する方法として、従来のエッチング/デポジションの 2 ステップのサイクルではなく、

デポジションプロセスにより保護膜を形成

保護膜を除去するまでの間は高バイアスによるエッチング

除去後の Si エッチングは低バイアスで行う

という、3 ステップのサイクルを行うことが検討されている。

前章までに確率されたシミュレーション手法により底面保護膜除去時間は予測可能であるので、その結果を装置条件（エッチング時間）にフィードバックすることにより、Bosch プロセスの最適化検討が可能となる。

4-1-1. 3step 制御による Bosch プロセスでの加工形状予測

図 V.2.3)-16 に、3step 制御 Bosch プロセスのバイアス設定条件を示す。リアルタイムモニタリング及びシミュレーションにより底面保護膜除去時間は 3 秒程度とわかっているので、底面保護膜除去のためのエッチング時間は 3.5 秒と設定した。3step 制御の効果を検討するため、比較として従来の 2step 制御の条件も示す。

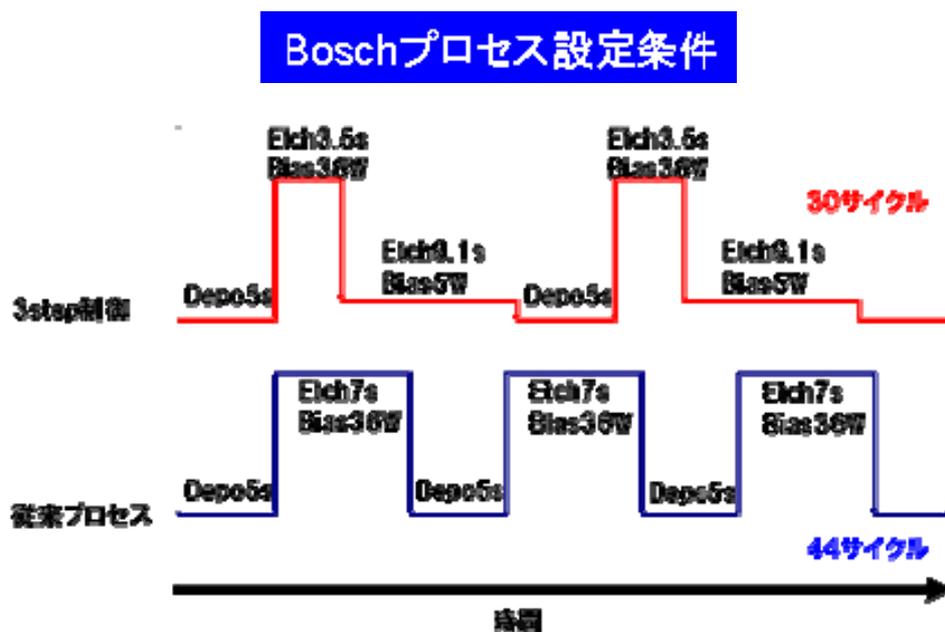


図 V.2.3)-16 3step 制御 Bosch プロセスの設定条件

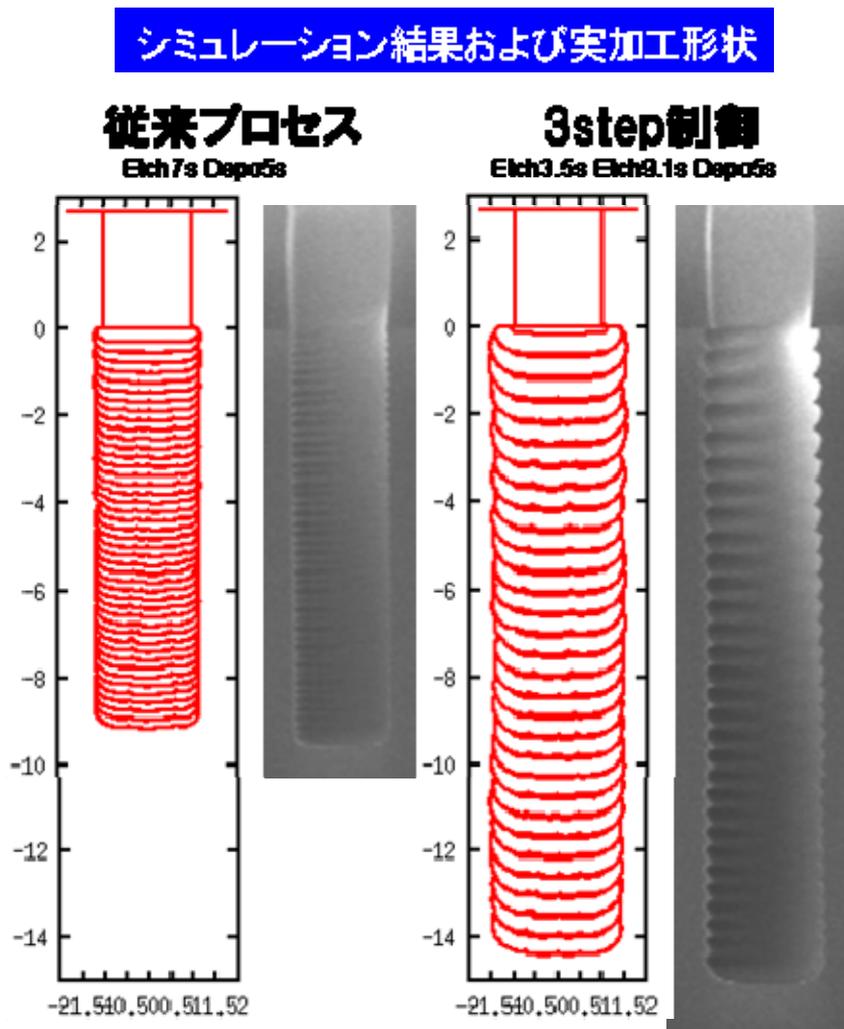
これまでに同定してきた反応パラメータ、フラックスおよび上記設定条件を用いてシミュレーションによる加工形状予測を行った。図 V.2.3)-17 にシミュレーション結果および実加工形状を示す。

従来プロセス、3step 制御プロセスともに、実加工形状をよく再現していることがわかる。3step 制御ではエッチング時間が長くなるためスキャロッピングが顕著に出ているが、

その様子もシミュレーションにより再現されていることがわかる。また、パターン底部で加工形状に若干の広がりが見られるが、その再現もできている。

以上の結果から、本研究において開発した手法を用いることにより、実測と解析の誤差 $\pm 10\%$ 以下の精度でエッチング形状予測が可能であることがわかった。

参考までに、図V.2.3)-18 及び図V.2.3)-19 に、エッチング深さ時系列、エッチングレート/デポジションレート時系列を示す。



図V.2.3)- 17 シミュレーションによる加工形状予測結果と実加工形状

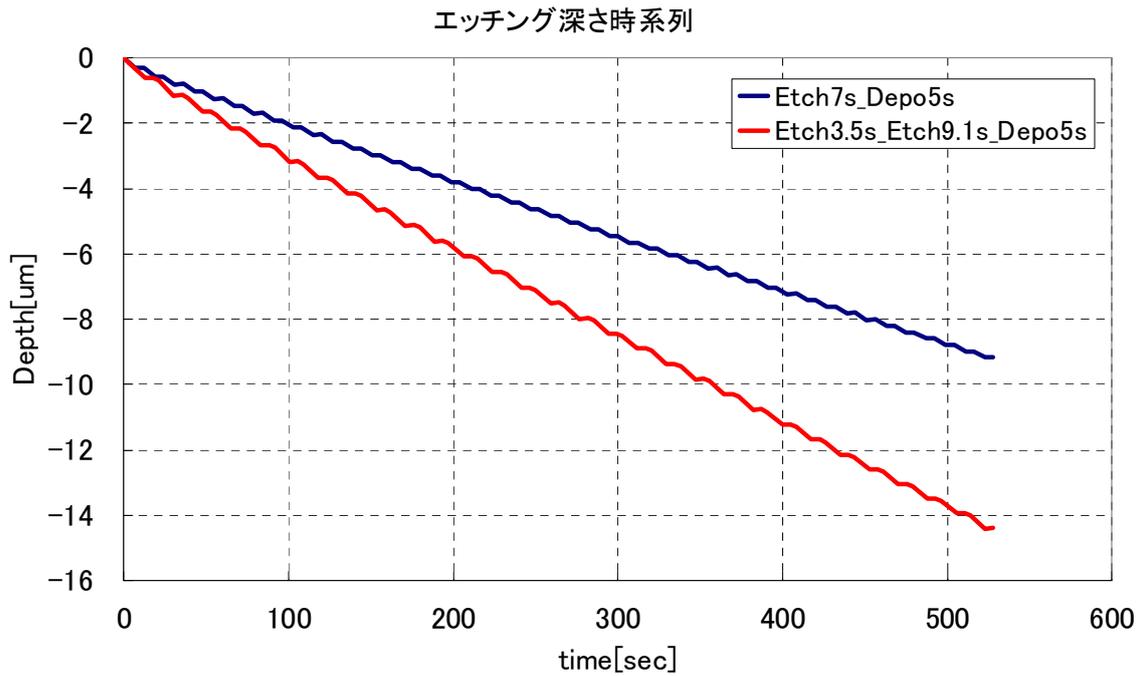


図 V.2.3)- 18 エッチング深さ時系列

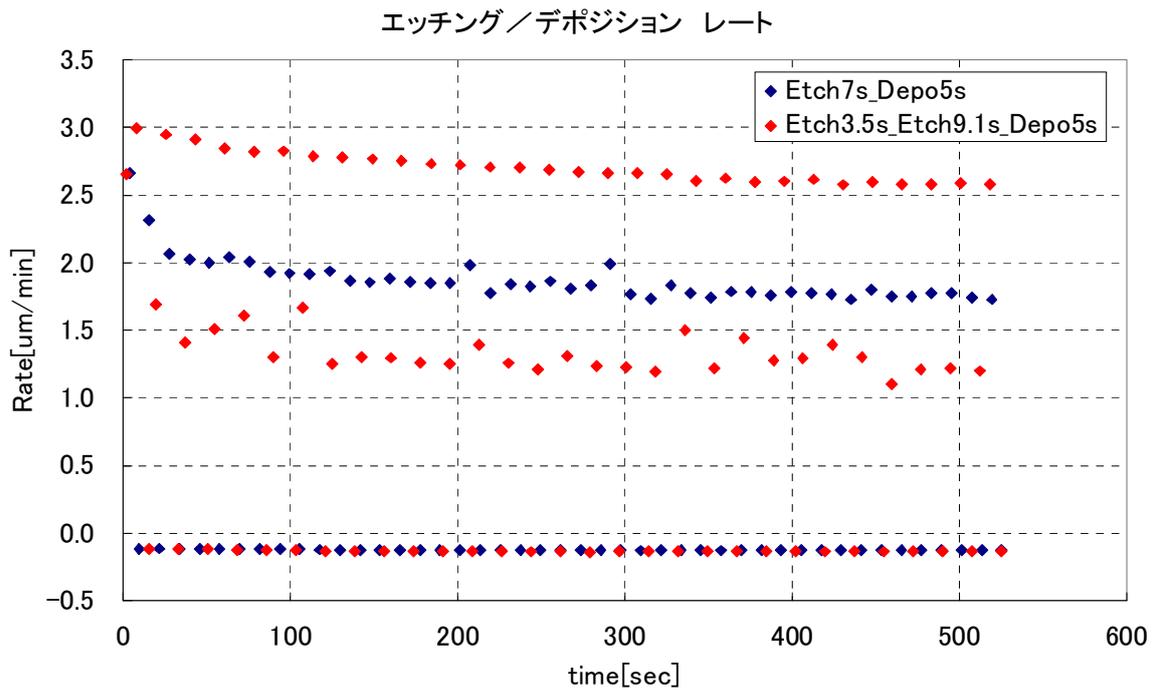
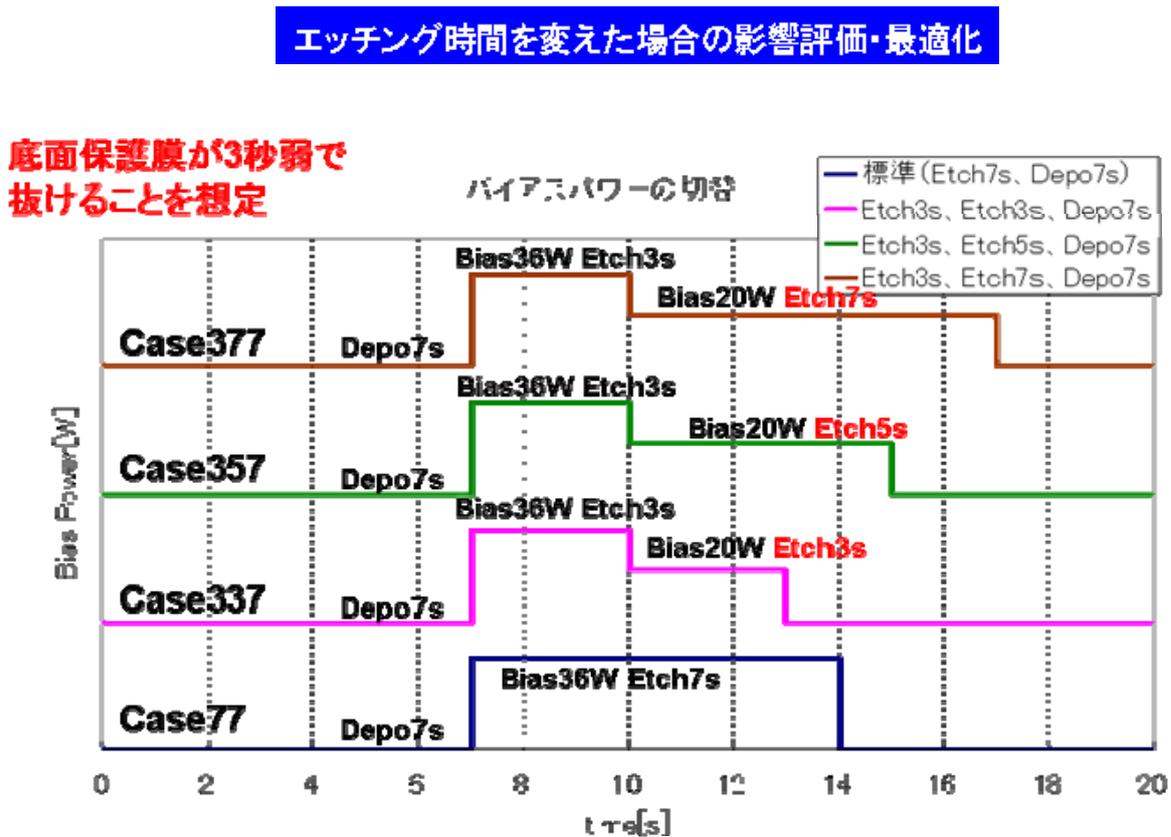


図 V.2.3)- 19 エッチングレートおよびデポジションレートの時系列

4-2.最適エッチング条件の探索

これまででは、底面保護膜除去時間を最適化のためのパラメータとして検討してきた。ここでは、2段階目のエッチング時間についての検討を行い、エッチング深さ（レート）のみならず、加工形状まで含めたエッチング条件の最適化検討を行う。

図V.2.3)-20 に 3step制御Boschプロセスのエッチング時間／バイアス値の設定条件を示す。1段階目のエッチング時間は底面保護膜除去時間にあわせて3秒と設定している。2段階目のエッチング時間は3秒、5秒、7秒と設定した。また、参考のために従来の2step制御Boschプロセスも示している。



図V.2.3)-20 3step制御Boschプロセスの設定条件

図V.2.3)-21 にシミュレーションによる加工形状予測結果を示す。トータルのエッチング時間が長くなる程、エッチング深さが深くなっていることがわかる。一方で、2段階目のエッチング時間を7秒と最も長く設定したケースでは、それまで見られなかったスキヤロッピングが顕著に現れる結果となった。デバイスによってはスキヤロッピングが許容できないものも存在する。そのような場合にはレートをあげるためにエッチング時間を長くするだけの検討ではなく、本手法を用いて形状評価まで行うことにより、事前にエッチング時間の最適化を行うことができるようになる。

以上のことから、本研究で開発した手法を用いることにより、底面保護膜除去時間を考慮

したフィードバック制御のみならず、加工形状まで含めた最適な予測・評価が可能であることがわかった。

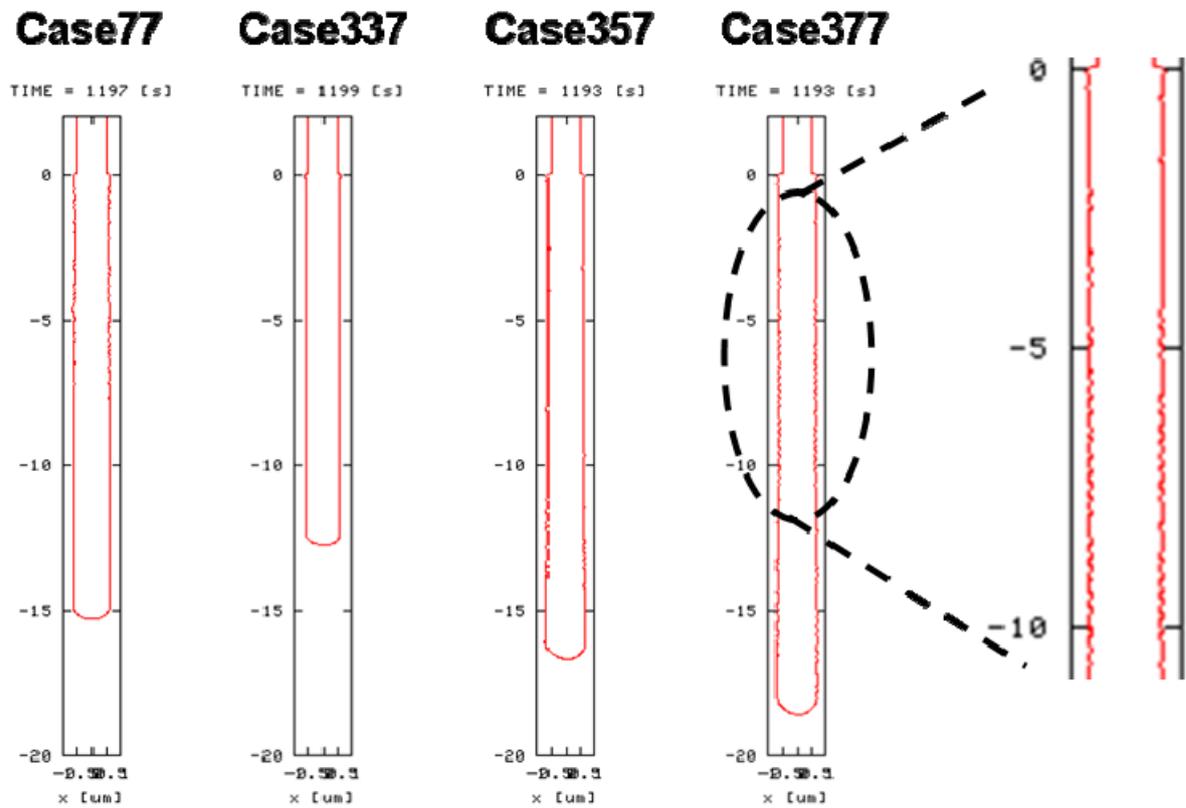


図 V.2.3)- 21 シミュレーションによる加工形状予測結果

5. まとめ

本研究では、**Bosch** プロセスを対象とし、装置条件およびリアルタイムモニタリングにより測定される物理量とを用いたプラズマエッチングシミュレーション手法の開発を行った。

プロセスパラメータ（表面反応に関連するパラメータやフラックス）と装置条件・リアルタイムモニタリング値（底面保護膜除去時間）との対応関係を明らかにするとともに、シミュレーションによる実加工形状の再現性確認を行った。今回対象とする **Bosch** プロセス（及び実加工で利用されている装置）に対しては、±10%の精度で加工形状を予測可能であることが確認できた。

また、エッチングプロセスを最適化するため、本手法により底面保護膜除去時間を評価しそれを装置条件へとフィードバックする手法や、エッチング時間最適化への適用可能性を検討した。その結果、本手法はエッチングプロセスおよびエッチング加工形状の最適化に適用可能であることが確認できた。

以上のことから、エッチングプロセスおよびエッチング加工形状の最適化のためのフィードバック制御技術確立のための設計指針・評価手法ができたものとする。

<課題>

本研究においては、実験においてガス流量やプラズマ圧力を固定していたため、プロセスパラメータのガス流量依存性やプラズマ圧力依存性は検討していない。しかし、実際の加工においてはこれらは代表的な装置パラメータであり、様々な値に設定し、プロセスの最適化を図V.2.3-っている。ガス流量・プラズマ圧力をパラメータとした実加工を実施し、その上でプロセスパラメータを同定し、データベース化していくことが課題である。

底面保護膜除去時間については、長時間にわたる時間変動の検討・実加工との比較ができていない。リアルタイムモニタリングにより長時間にわたる底面保護膜除去時間の推移を測定し、それとシミュレーションによる評価との比較検討を行うことが課題として残っている。

今回は **Bosch** プロセスを対象としたが、他のプラズマ源、プロセスにも本手法は適用可能である。様々なプラズマ・プロセスに本手法を適用し、得られたプロセスパラメータと装置条件・リアルタイムモニタリング値・実加工形状との対応関係をデータベース化し、プラズマエッチングプロセスの最適化を図V.2.3-っていくことも将来的な課題である。

目標に照らした達成状況

本研究では、低環境負荷の深掘りエッチング技術を確立するために、SF6 ガスの代替ガスの探索と、代替ガスのポテンシャルを最大限発現させるためのエッチングの高効率化、最適化技術として、以下の3つの内容に取り組んだ。

i)低環境負荷代替ガスの選定

-)リアルタイムモニタリングによるエッチングの高効率化
-)フィードバック制御手法を用いたエッチング最適化

その結果、BF3+SF6 混合の代替ガスにより、69%の削減率、エッチングの高効率化および最適化により45%の削減率となり、トータル90%の削減率（BOSCH プロセス、計算値）を達成した。

結果まとめ

全体目標		結果	達成度
現状のSF6ガスに対し、温暖化ガス排出量を90%以上削減可能とする最適代替ガスの選定指針を得る。		トータル90%削減見込み <内訳> 代替ガス:69%削減 モニタリング/フィードバック制御:45%削減	◎
開発項目	自主目標		
代替ガスの選定	温暖化ガス排出量を90%以上削減可能とする最適代替ガスの選定指針を得る。	SF6とBF3の混合ガスとすることで、温暖化ガス排出量の削減指針を得た。	○
リアルタイムモニタリングによる高効率化	ラジカル密度を、10Hz以上の周期でリアルタイムモニタリングする手法を確立する。	F,SiFラジカル密度を10Hz以上の周期でモニタリングすることで、エッチレート1.8倍となる高効率化を確立した。	○
フィードバック制御によるエッチング最適化	モニタリング物理量とシミュレーション入力データとの対応関係を整理し、実加工と解析結果の再現性を評価する。	保護膜除去タイミング及びパイアスパワーと入射イオンフラックスとの相関が求まり、フィードバック制御に適用するための形状予測に必要な実加工と解析結果の誤差を±10%以下とした。	○

温暖化ガス削減率まとめ

プロセス	非BOSCH (連続プロセス)		BOSCH	
	Ref.	代替ガス (実測)	Ref.	代替ガス+モニタリング /フィードバック (計算)
使用ガス	SF6+20%O2	SF6+ 80%BF3	SF6/C4F8	(SF6+80%BF3)/BF3
温暖化係数	19120	4780	23900/8700	4780/0
エッチレート比	1	0.81	1	1.33
温暖化ガス 削減率	—	69%	—	90%

研究発表・講演、文献、特許等の状況

(1) 研究発表・講演

・GDMS2011 (2011.2.9)

2-2 文献

なし。

2-3 特許等

・エッチングモニタリング方法 (デンソー、産総研)

・Fラジカル発生ガスとB含有ガスを用いたシリコン深堀エッチング方法 (アルバック)

・解析技術 (みずほ情報総研)

2-4 成果普及活動 (プレス発表等)

なし。

【付録】

プラズマエッチングシミュレーションによる解析方法の概要

表面反応

プラズマ・エッチングプロセスにおける表面反応として次に述べる 4 種類の要素反応を考慮する。

- 1) 飛来吸着した反応性ラジカルによる等方的な熱励起型化学反応
- 2) 高エネルギーを持って飛来した非反応性または反応性イオンによって引き起こされる異方的なスパッタリング反応：前者は物理的スパッタリング反応であり、後者は物理的及び化学的スパッタリング反応である。
- 3) 反応性吸着ラジカルによる化学反応が同時に入射する高エネルギーイオンによって加速される異方的なイオン・アシストエッチング反応
- 4) 非反応性ラジカルが飛来し被エッチング材料膜上に吸着したデポジション

以上の仮定から、このモデルでは反応性ラジカルと非反応性ラジカルのみが表面に吸着する。

表面反応モデル

被エッチング材料表面を微小面積要素に分割する。(2次元解析なので線素を考えれば充分であるが、奥行き方向の自由度を考慮して考える。) この微小面積要素の中から任意の一つを取り出し、その微小面積要素を考える。各吸着ラジカル^{††} m によって占有される表面積の被覆率を Θ_m 、また清浄な被エッチング材料膜が表面に現れている表面積の割合を Θ_0 で表す。更に、位置 r 、時刻 t において

$$\Theta_0(r,t) + \sum_{m=1}^N \Theta_m(r,t) = 1 \quad (1.1)$$

$$\Theta_m(r,t) \geq 0 \quad \text{for } m = 0, 1, \dots, N \quad (1.2)$$

なる規格化条件と拘束条件を課しておく。ここで、 N は解析の対象となる吸着ラジカル種数である。

簡単のため、表面吸着/反応層は表面の 1 原子層だけと仮定し、清浄な表面の全吸着サイトの面密度を σ_s で表す。このとき、付録 A に詳しく説明してあるように、各点各時刻における各微小表面の被覆率の時間変化は

$$\sigma_s \frac{d\Theta_0}{dt}(r,t) = - \sum_{m=1}^N [G_m(r,t) - H_m(r,t)] \quad (1.3)$$

$$\sigma_s \frac{d\Theta_m}{dt}(r,t) = G_m(r,t) - H_m(r,t) \quad \text{for } m = 1, \dots, N \quad (1.4)$$

で与えられる。ここで、 $G_m(r,t)$ はラジカル m の単位時間当たりの全吸着数であり、入射ラジカル m が単位時間当たりに直接表面に吸着した個数と m とは異なる他の入射ラジカルが表面に吸着し被エッチング材料表面上に形成されたラジカルと反応し単位時間当たりにラジカル m を表面上に生成する個数の和とからなる。また、 $H_m(r,t)$ はラジカル m が単位時間当たりに表面から消滅する全個数であり、表面上に吸着しているラジカル m が熱励起によって単位時間当たりに直接表面から離脱する個数、表面に吸着しているラジカル m が入射ラジカルと反応し単位時間当たりに他のラジカルを生成する個数及びイオンアシスト反応によって表面に吸着しているラジカルが単位時間当たりに表面から削り取られる個数の和とからなる。

上で説明したように、 G_m と H_m とは^{‡‡}

$$\begin{aligned} G_m &\equiv G_m^{(1)} + G_m^{(2)} \\ H_m &\equiv H_m^{(1)} + H_m^{(2)} + H_m^{(i)} \end{aligned}$$

と表すことができる。ここで、 $G_m^{(1)}$ は入射ラジカルが単位時間当たりに直接表面に吸着する個数を、 $G_m^{(2)}$ は m と異なる入射ラジカルと被エッチング材料表面上に形成されたラジカルとが反応し単位時間当たりに表面上にラジカル m を生成する個数を表す。また、 $H_m^{(1)}$ は被エッチング材料表面上に吸着しているラジカルが熱励起によって表面から単位時間当たりに直接離脱する個数を、 $H_m^{(2)}$ は表面に吸着しているラジカル m が入射ラジカルと反応し単位時間当たりに m とは異なるラジカルを生成する個数を、 $H_m^{(i)}$ はイオンアシスト反応によってラジカル m が単位時間当たりに表面から削り取られる個数を表す。

更に、各 $G_m^{(j)}$ 、 $H_m^{(j)}$ ($j = 1, 2$) と $H_m^{(i)}$ は

1. $G_m^{(1)}$ について

$G_m^{(1)}$ はラジカル m の吸着率 σ_m とフラックス F_m を用いて、 $G_m^{(1)} = \sigma_m F_m$ と表せる。これを更に詳しく表すと

$$G_m^{(1)} = \left[\sigma_{m0} \Theta_0 + \sum_{k \neq m} \sigma_{mk} \Theta_k \right] F_m \quad (1.5)$$

となる。ここで、 σ_{m0} および σ_{mk} はそれぞれ、ラジカル m と清浄な被エッチング材料膜との間のおよび飛来したラジカル m と被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k の吸着膜層との間の吸着率である。また、 k についての和は被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k がラジカル m で置き換わる全ての k に互る。

2. $G_m^{(2)}$ について

$G_m^{(2)}$ は、表面に飛来する m と異なったラジカル l が被エッチング材料表面上に形成されたラジカルと反応しラジカル m を生成する生成率 $\sigma_l^{(m)}$ とラジカル l のフラックス F_l を用いて、 $G_m^{(2)} = \sum_{l \neq m} \sigma_l^{(m)} F_l$ と表せる。これを更に詳しく表すと

$$G_m^{(2)} = \sum_{l \neq m} \left[\sigma_{l0}^{(m)} \Theta_0 + \sum_{k \neq m} \sigma_{lk}^{(m)} \Theta_k \right] F_l \quad (1.6)$$

となる。ここで、 $\sigma_{l0}^{(m)}$ および $\sigma_{lk}^{(m)}$ はそれぞれ、飛来するラジカル l と清浄な被エッチング材料膜との間の反応でおよび飛来したラジカル l と被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k の吸着膜層との間の反応でラジカル m が生成される生成率である。また、 l についての和は m とは異なる入射ラジカル全体に互る。更に、 k についての和は被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k がラジカル l と反応しラジカル m を生成する全ての k に互る。

3. $H_m^{(1)}$ について

$H_m^{(1)}$ は被エッチング材料表面上に吸着したラジカル m が熱励起によって単位時間当たりに直接表面から離脱するラジカル m の個数であるから

$$H_m^{(1)} = \frac{1}{\tau_m} \sigma_s \Theta_m \quad (1.7)$$

と表せる。ここで、 τ_m はラジカル m が被エッチング材料表面上に吸着している平均時間、 $\sigma_s \Theta_m$ は単位表面上に吸着しているラジカル m の個数である。

4. $H_m^{(2)}$ について

$H_m^{(2)}$ は、表面に飛来する m と違ったラジカル k が被エッチング材料表面上に形成されたラジカル m と反応し m と異なったラジカル l を生成する生成率 σ_{km} とラジカル k のフラックス F_k を用いて、 $H_m^{(2)} = \sum_{k \neq m} \sigma_{km} F_k$ と表せる。これを更に詳しく表すと

$$H_m^{(2)} = \sum_{k \neq m} \sum_{l \neq m} \sigma_{km}^{(l)} \Theta_m F_k \quad (1.8)$$

となる。ここで、 $\sigma_{km}^{(l)}$ は飛来するラジカル k と被エッチング材料膜上に形成されたラジカル m の吸着膜層との間の反応で m とは違ったラジカル l が生成される生成率である。また、 k についての和は m とは異なる入射ラジカル全体に互る。更に、 l についての和は被エッチング材料膜上に形成されたラジカル m がラジカル k と反応し m とは違ったラジカル l になる全ての l に互る。

5. $H_m^{(i)}$ について

$H_m^{(i)}$ は被エッチング材料表面上に吸着したラジカル m が入射イオンによって単位時間当たりに被エッチング材料表面から削り取られるラジカル m の個数であるから、エネルギー ϵ を持った入射イオン k がフラックス $F_k^{(i)}(\epsilon)$ で被エッチング材料表面に入射したときに表面から離脱するラジカル m の個数は

$$H_m^{(i)} = \int_0^{\epsilon_{max}} \left[\sum_l Y_{km}^{(l)}(\epsilon) \right] \Theta_m F_k^{(i)}(\epsilon) d\epsilon$$

と表せる。ここで、 ϵ_{max} は入射イオンの最大エネルギー、 $Y_{km}^{(l)}(\epsilon)$ は表面反応層から離脱する反応生成物 l の収率であり、ラジカル m がラジカル l に分解することも考慮している。従って、表面反応層からのラジカル m の消滅個数は

$$H_m^{(i)} = \sum_{k \neq m} \int_0^{\epsilon_{max}} \left[\sum_l Y_{km}^{(l)}(\epsilon) \right] \Theta_m F_k^{(i)}(\epsilon) d\epsilon \quad (1.9)$$

と表せる。ここで、 k に対する和は全ての入射イオンに関してである。

と表すことができる*。

反応表面層内での粒子の輸送・反応過程

ここでは、各粒子の輸送と反応過程について記述する。今回のモデルで考慮する粒子の種類は

- 1) 反応性高エネルギーイオン
- 2) 非反応性高エネルギーイオン
- 3) 反応性ラジカル
- 4) 非反応ラジカル（反応生成物）

である。以下にこれらの粒子の輸送・反応過程について詳細を述べる。

反応性高エネルギーイオンの輸送・反応過程

反応性高エネルギーイオンによって引き起こされる反応の記述は、反応性高エネルギーイオンの弾性散乱と非弾性散乱を用いて行なう。反応性高エネルギーイオンの追跡は非弾性散乱が起こった段階で打ち止めとする。また、簡単のため、弾性散乱の追跡も1度だけとする。即ち、今回考慮する反応性高エネルギーイオンの反応過程は

- 1) 非弾性散乱
- 2) 弾性散乱 + 非弾性散乱

であり、その他の多重散乱は全て無視する。このような仮定の下で、反応性高エネルギーイオンの輸送を記述する。

反応性高エネルギーイオンは、基盤表面上のシース領域で加速され基盤表面にほぼ垂直に入射する。しかし、プラズマ中での熱運動による速度分布の広がりにはほぼそのまま生き残っている。従って、基盤表面での入射エネルギー ϵ を持った入射イオンに対するフラックスの角度依存性は、 $dF^{(i)}(\epsilon) = F_0^{(i)}(\epsilon)G^{(i)}(\theta)\cos\theta d\theta$ と表すことができる。ここで、 $F_0^{(i)}(\epsilon)$ はプラズマから基盤表面へのイオンの入射フラックスである。*

次に、非弾性散乱が起きる点での反応性高エネルギーイオンのフラックスを計算する。

- 1) 直接反応における反応性イオンのフラックス

シース領域からパターン内の点 P へエネルギー ϵ を持って直接入射するイオンのフラックス $F_i^{(1)}(P, \epsilon)$ は、マスク端と点 P との幾何学的配置で決まる角度により制限され ($\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$)、

$$F_i^{(1)}(P, \epsilon) = F_0^{(i)}(\epsilon) \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_i(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \quad (1.10)$$

と表せる。ここで、 $\phi = \theta - \psi$ は反応表面への入射角度である。この式によって、点 P でのフラックスが計算される。

- 2) 反射を含む反応性イオンのフラックス

反応性イオンの反射過程のモデル化には反応性ラジカルの輸送過程とのアナロジーを参考にする。アナロジーは

- 入射ラジカルの吸着率 σ_r に対応して入射イオンの吸収率 σ_i を導入する。ここで用いた反応性イオンの吸収率はフラックス F_i を持って入射した反応性イオンの内、単位時間に $\sigma_i F_i$ 個の反応性イオンが表面上で反応を起こすことを意味する。
- フラックス F_r を持って入射したラジカルは単位時間に $\sigma_r F_r$ 個が表面に吸着するので、残りの $(1 - \sigma_r)F_r$ 個は表面から再放出される。同様に、フラックス F_i を持って入射した反応性イオンは単位時間に $\sigma_i F_i$ 個が表面に吸収され表面上で反応を起こすが、残りの $(1 - \sigma_i)F_i$ 個は表面に影響を与えずに表面から再放出される。

- 。表面から再放出される過程は、反応性ラジカルでも反応性イオンでも同じであると仮定する。また、再放出過程ではエネルギーの変化はないと仮定する。

に基づいている。このアナロジーを用いると、反射による点 P における反応性イオンのフラックス $F_i^{(2)}(P, \epsilon)$ は

$$F_i^{(2)}(P, \epsilon) = \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} (1 - \sigma_i(Q, \epsilon)) F_i^{(1)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.11)$$

と書き表せる。ここで、反応性イオンの反射は“diffuse re-emission model”で記述できると仮定した。また、 $\sigma_i(Q, \epsilon)$ は点 Q におけるエネルギー ϵ をもった反応性イオンの吸収率、 $F_i^{(i)}(Q, \epsilon)$ は点 Q における入射イオンフラックス、 r は点 P と点 Q を結ぶ直線距離、 $\cos \phi_P$ は点 P における法線と直線 \vec{QP} とのなす角、 $\cos \phi_Q$ は点 Q における法線と直線 \vec{PQ} とのなす角、 ds は Profile に沿った線素である。

以上のことから、点 P における反応性イオンの全フラックス $F_i(P, \epsilon)$ は

$$F_i(P, \epsilon) = F_i^{(1)}(P, \epsilon) + F_i^{(2)}(P, \epsilon) \quad (1.12)$$

で与えられることが判る。ここで、 $F_i^{(1)}(P, \epsilon)$ は (1.10) 式で、そして $F_i^{(2)}(P, \epsilon)$ は (1.11) 式で与えられる。しかし、反応性ラジカルの場合と違って、 $F_i(P, \epsilon)$ を self-consistent に求めることはしない。何故なら、(1.11) 式の右辺のフラックスが $F_i^{(1)}(Q, \epsilon)$ となっているためである。

非反応性高エネルギーイオンの輸送・反応過程

非反応性高エネルギーイオン散乱の数学的な表現形式は反応性高エネルギーイオンのそれと同じ仮定を用いる。即ち、非反応性高エネルギーイオンの散乱は弾性散乱と非弾性散乱を用いて記述される。また、非反応性高エネルギーイオンの追跡は非弾性散乱が起こった段階で打ち止めとする。更に、簡単のため、弾性散乱の追跡も 1 度だけとする。即ち、今回考慮する非反応性高エネルギーイオンの反応過程は

- 1) 非弾性散乱
- 2) 弾性散乱 + 非弾性散乱

であり、その他の多重散乱は全て無視する。このような仮定の下で、非反応性高エネルギーイオンの輸送を記述する。

非反応性高エネルギーイオンは、基盤表面上のシース領域で加速され基盤表面にほぼ垂直に入射する。しかし、プラズマ中での熱運動による速度分布の広がりほぼそのまま生き残っている。従って、基盤表面での入射エネルギー ϵ をもった入射イオンに対するフラックスの角度依存性は、 $dF^{(i)}(\epsilon) = F_0^{(i)}(\epsilon) G^{(i)}(\theta) \cos \theta d\theta$ と表すことができる。ここで、 $F_0^{(i)}(\epsilon)$ はプラズマから基盤表面への入射エネルギー ϵ をもったイオンの入射フラックスである。^{††}

次に、非弾性散乱が起きる点での非反応性高エネルギーイオンのフラックスを計算する。

- 1) 直接反応における非反応性イオンのフラックス

シース領域からパターン内の点 P へ入射エネルギー ϵ を持って直接入射するイオンフラックス $F_i^{(1)}(P, \epsilon)$ は、マスク端と点 P との幾何学的配置で決まる角度により制限され ($\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$)、

$$F_i^{(1)}(P, \epsilon) = F_0^{(i)}(\epsilon) \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_i(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \quad (1.13)$$

と表せる。ここで、 $\phi = \theta - \psi$ は反応表面への入射角度である。この式によって、点 P でのフラックスが計算される。

2) 反射を含む非反応性イオンのフラックス

非反応性イオンの反射過程のモデル化には非反応性ラジカルの輸送過程とのアナロジーを参考にする。アナロジーは

- 入射ラジカルの吸着率 σ_r に対応して入射イオンの吸収率 σ_i を導入する。ここで用いた非反応性イオンの吸収率はフラックス F_i を持って入射した非反応性イオンの内、単位時間に $\sigma_i F_i$ 個の非反応性イオンが表面上に影響を与えることを意味する。
- フラックス F_r を持って入射したラジカルは単位時間に $\sigma_r F_r$ 個が表面に吸着するので、残りの $(1 - \sigma_r) F_r$ 個は表面から再放出される。同様に、フラックス F_i を持って入射した非反応性イオンは単位時間に $\sigma_i F_i$ 個が表面に吸収されるが、残りの $(1 - \sigma_i) F_i$ 個は表面に影響を与えずに表面から再放出される。
- 表面から再放出される過程は、非反応性ラジカルでも非反応性イオンでも同じであると仮定する。また、再放出過程ではエネルギーの変化はないと仮定する。

に基づいている。このアナロジーを用いると、反射による点 P における非反応性イオンのフラックス $F_i^{(2)}(P, \epsilon)$ は

$$F_i^{(2)}(P, \epsilon) = \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} (1 - \sigma_i(Q, \epsilon)) F_i^{(1)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.14)$$

と書き表せる。ここで、非反応性イオンの反射は“diffuse re-emission model”で記述できると仮定した。また、 $\sigma_i(Q, \epsilon)$ は点 Q におけるエネルギー ϵ を持った非反応性イオンの吸収率、 $F_i^{(1)}(Q, \epsilon)$ は点 Q における入射イオンフラックス、 r は点 P と点 Q を結ぶ直線距離、 $\cos \phi_P$ は点 P における法線と直線 \vec{QP} とのなす角、 $\cos \phi_Q$ は点 Q における法線と直線 \vec{PQ} とのなす角、 ds は Profile に沿った線素である。

以上のことから、点 P における非反応性イオンの全フラックス $F_i(P, \epsilon)$ は

$$F_i(P, \epsilon) = F_i^{(1)}(P, \epsilon) + F_i^{(2)}(P, \epsilon) \quad (1.15)$$

で与えられることが判る。ここで、 $F_i^{(1)}(P, \epsilon)$ は (1.13) 式でそして $F_i^{(2)}(P, \epsilon)$ は (1.14) 式で与えられる。しかし、非反応性ラジカルの場合と違って、 $F_i(P, \epsilon)$ を self-consistent に求めることはしない。何故なら、(1.14) 式の右辺のフラックスが $F_i^{(1)}(Q, \epsilon)$ となっているためである。

反応性ラジカルの輸送・反応過程

反応性ラジカルが関与する散乱過程には

- 1) 弾性散乱
- 2) 表面への吸着
- 3) 熱励起による表面反応層からの離脱
- 4) イオンアシスト反応に伴う表面反応層からの離脱

がある。これらの過程を全て考慮し、イオン反応の場合に対して仮定したようなことはこの場合しない。即ち、上に述べた散乱過程を忠実に考慮して反応性ラジカルの輸送を記述する。

反応性ラジカルは、基盤表面上のシーす領域で衝突を繰り返した後、基盤表面にはほぼ等方的に入射する。しかし、プラズマ中での熱運動による速度分布の広がりにはほぼそのまま生き残っている。プラズマ中での反応性ラジカルの速度分布は等方的であるが、シーす領域での衝突でその等方的分布が崩れる可能性がある。^{*}そこで、基盤表面での入射ラジカルフラックスの角度依存性を考慮し、 $dF_n = F_n^0 G_n(\theta) \cos \theta d\theta$ と表す。ここで、 F_n^0 はプラズマから基盤表面への反応性ラジカルの入射フラックスである。また、速度分布に対して等方性を仮定すれば、 $G_n(\theta) = 1/2$ となる。

次に、種々の散乱過程によって生じる反応性ラジカルのフラックスの表現を与える。

1) 直接吸着における反応性ラジカルのフラックス

シーす領域からパターン内の点 P へ直接入射する反応性ラジカルのフラックス $F_n^{(1)}(P)$ は、マスク端と点 P との幾何学的配置で決まる角度により制限され ($\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$),

$$F_n^{(1)}(P) = F_n^0 \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_n(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \quad (1.16)$$

と表せる。ここで、 $\phi = \theta - \psi$ は反応表面への入射角度である。この式によって、点 P でのフラックスが計算される。

2) 再放出された反応性ラジカルのフラックス

入射ラジカル n の表面に対する有限の吸着率 σ_n に由来する表面からのラジカルの再放出効果を考える。ラジカル n の入射フラックスを F_n とする。また、このラジカルの吸着率は $\sigma_n = \sum_k \sigma_{nk} \Theta_k$ と一般に表すことができる。ここで、 σ_{nk} は飛来するラジカル n の被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k に対する吸着率である。また、 Θ_k は表面が単位面積当たりラジカル k で覆われている比率である。

このとき、フラックス F_n を持って入射したラジカル n は $\sigma_n F_n$ だけ吸着するから、残りの $(1 - \sigma_n) F_n$ は表面から再放出される。この再放出された反応性ラジカルの点 P におけるフラックス $F_n^{(2)}(P)$ は、“diffuse re-emission model” を用いて

$$F_n^{(2)}(P) = \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} [1 - \sigma_n(Q)] F_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.17)$$

と表せる。ここで、 r は表面上の 2 点 P, Q の間を結ぶ直線距離、 $\cos \phi_P, \cos \phi_Q$ はこの直線と表面上の点 P, Q それぞれの法線とのなす角、 ds は被エッチング表面の断面に沿った線素であり、 σ_n の定義は上に述べてある。また、点 Q から放出されるラジカルの方向依存性は $\cos \phi_Q$ に比例すると仮定している。

3) イオン反応により表面から放出された反応性ラジカルのフラックス

反応性ラジカルの供給源として、被エッチング材料表面に吸着したラジカル n が入射イオンによって削り取られる場合がある。この場合、表面での反応も考慮すると、一般的な (1.9) 式より、入射エネルギー ϵ を持ったイオンによって生成される反応性ラジカルの個数は $\sum_{k \neq m} \sum_m Y_{km}^{(n)}(\epsilon) \Theta_m F_k^{(i)}(\epsilon)$ と表すことができる。ここで、 $Y_{km}^{(n)}(\epsilon)$ は表面反応層から離脱する反応生成物 n の収率、 Θ_m は表面が単位面積当たりラジカル m で覆われている比率、 $F_k^{(i)}(\epsilon)$ はエネルギー ϵ も持ったイオン k のフラックスである。

一度反応性ラジカルができてしまえば、後は上に述べた再放出される反応性ラジカルの吸着と同じになるから、この場合、点 P におけるフラックスを $F_n^{(3)}(P)$ であらわせば

$$F_n^{(3)}(P) = \sum_{k \neq m} \sum_m \int_0^{\epsilon_{max}} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} Y_{km}^{(n)}(\epsilon) \Theta_m(Q) F_k^{(i)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds d\epsilon \quad (1.18)$$

で与えられる。ここでも、“diffuse re-emission model” を使用した。また、 ϵ はイオンのエネルギー、 ϵ_{max} は最大のイオンエネルギーである。

4) 表面反応層からの熱励起離脱に基づく反応性ラジカルのフラックス

他の反応性ラジカルの供給源として、被エッチング材料表面に吸着したラジカル n が熱励起によって直接表面から離脱する場合も考えられる。この場合、反応性ラジカル n が表面から離脱する個数は、一般に (1.7) 式より、 $\sigma_s \Theta_n / \tau_n$ で与えられる。ここで、 σ_s は清浄な表面の全吸着サイトの面密度、 Θ_n は反応性ラジカル n が占有している表面の被覆率、 τ_n は反応性ラジカル n が被エッチング材料表面上に吸着している平均時間である。

あるフラックス F_m と吸着率 σ_m を持って入射したラジカル m は被エッチング材料表面に $\sigma_m F_m$ だけ吸着し、残りの $(1 - \sigma_m) F_m$ は表面から再放出される。この再放出されるラジカルと熱励起により表面から離脱するラジカルとの違いは、単に遅れの時間だけ（即ち、放出までの時間は、前者では瞬間であるが後者ではある有限な時間 τ_m である。）であり他のダイナミクス等は同じであると仮定する。この仮定のもとで熱励起により表面から放出されるラジカルの点 P におけるフラックス $F_n^{(4)}(P)$ は

$$F_n^{(4)}(P) = \frac{\sigma_s}{\tau_n} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} \Theta_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.19)$$

で与えられる。ここでも、再放出されるラジカルの場合同様、表面からのラジカルの離脱に対しても“diffuse re-emission model” を仮定する。

以上のことから、点 P における反応性ラジカルの全フラックス $F_n(P)$ は

$$F_n(P) = F_n^{(1)}(P) + F_n^{(2)}(P) + F_n^{(3)}(P) + F_n^{(4)}(P) \quad (1.20)$$

で与えられることが判る。ここで、 $F_n^{(1)}(P)$ は (1.16) 式で、 $F_n^{(2)}(P)$ は (1.17) 式で、 $F_n^{(3)}(P)$ は (1.18) 式で、そして $F_n^{(4)}(P)$ は (1.19) 式で与えられる。

非反応性ラジカルの輸送・反応過程

非反応性ラジカルが関与する散乱過程には

- 1) 弾性散乱
- 2) 表面への吸着
- 3) 熱励起による表面反応層からの離脱
- 4) イオンアシスト反応に伴う表面反応層からの離脱

がある。これらの過程を全て考慮し、イオン反応の場合に対して仮定したようなことはこの場合もしない。即ち、上に述べた散乱過程を忠実に考慮して非反応性ラジカルの輸送を記述する。

非反応性ラジカルは、基盤表面上のシーズ領域で衝突を繰り返した後、基盤表面にはほぼ等方的に入射する。しかし、プラズマ中での熱運動による速度分布の広がりにはほぼそのまま生き残っている。プラズマ中での非

反応性ラジカルの速度分布は等方的であるが、シース領域での衝突でその等方的分布が崩れる可能性がある。[†]そこで、基盤表面での入射ラジカルフラックスの角度依存性を考慮し、 $dF_n = F_n^0 G_n(\theta) \cos \theta d\theta$ と表す。ここで、 F_n^0 はプラズマから基盤表面への反応性ラジカルの入射フラックスである。また、速度分布に対して等方性を仮定すれば、 $G_n(\theta) = 1/2$ となる。

次に、種々の散乱過程によって生じる非反応性ラジカルのフラックスの表現を与える。

1) 直接吸着における非反応性ラジカルのフラックス

シース領域からパターン内の点 P へ直接入射する非反応性ラジカルのフラックス $F_n^{(1)}(P)$ は、マスク端と点 P との幾何学的配置で決まる角度により制限され ($\theta_1 \leq \theta \leq \theta_2$),

$$F_n^{(1)}(P) = F_n^0 \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_n(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \quad (1.21)$$

と表せる。ここで、 $\phi = \theta - \psi$ は反応表面への入射角度である。この式によって、点 P でのフラックスが計算される。

2) 再放出された非反応性ラジカルのフラックス

入射ラジカル n の表面に対する有限の吸着率 σ_n に由来する表面からのラジカルの再放出効果を考える。ラジカル n の入射フラックスを F_n とする。また、このラジカルの吸着率は $\sigma_n = \sum_k \sigma_{nk} \Theta_k$ と一般に表すことができる。ここで、 σ_{nk} は飛来するラジカル n の被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k に対する吸着率である。また、 Θ_k は表面が単位面積当たりラジカル k で覆われている比率である。

このとき、フラックス F_n を持って入射したラジカル n は $\sigma_n F_n$ だけ吸着し、残りの $(1 - \sigma_n) F_n$ は表面から再放出される。この再放出された非反応性ラジカルの点 P におけるフラックス $F_n^{(2)}(P)$ は “diffuse re-emission model” を用いると

$$F_n^{(2)}(P) = \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} [1 - \sigma_n(Q)] F_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.22)$$

と表せる。ここで、 r は表面上の 2 点 P, Q の間を結ぶ直線距離、 $\cos \phi_P, \cos \phi_Q$ はこの直線と表面上の点 P, Q それぞれの法線とのなす角、 ds は被エッチング表面の断面に沿った線素であり、 σ_n の定義は上に述べてある。また、点 Q から放出されるラジカルの方向依存性は $\cos \phi_Q$ に比例すると仮定している。

3) イオン反応により表面から放出された非反応性ラジカルのフラックス

非反応性ラジカルの供給源として、被エッチング材料表面に吸着したラジカル n が入射イオンによって削り取られる場合がある。この場合、表面での反応も考慮すると、一般的な (1.9) 式より、入射エネルギー ϵ を持ったイオンによって生成される非反応性ラジカルの個数は $\sum_{k \neq m} \sum_m Y_{km}^{(n)}(\epsilon) \Theta_m F_k^{(i)}(\epsilon)$ と表すことができる。ここで、 $Y_{km}^{(n)}(\epsilon)$ は表面反応層から離脱する非反応生成物 n の収率、 Θ_m は表面が単位面積当たりラジカル m で覆われている比率、 $F_k^{(i)}(\epsilon)$ はエネルギー ϵ を持ったイオン k のフラックスである。

一度非反応性ラジカルができてしまえば、後は上に述べた再放出された非反応性ラジカルの吸着と同じになるから、この場合、点 P におけるフラックスを $F_n^{(3)}(P)$ であらわせば

$$F_n^{(3)}(P) = \sum_{k \neq m} \sum_m \int_0^{\epsilon_{max}} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} Y_{km}^{(n)}(\epsilon) \Theta_m(Q) F_k^{(i)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds d\epsilon \quad (1.23)$$

で与えられる。ここでも、同様に、“diffuse re-emission model” を用いた。また、 ϵ はイオンのエネルギー、 ϵ_{max} は最大のイオンエネルギーである。

4) 表面反応層からの熱励起離脱に基づく非反応性ラジカルのフラックス

他の非反応性ラジカルの供給源として、被エッチング材料表面に吸着したラジカル n が熱励起によって直接表面から離脱する場合も考えられる。この場合、非反応性ラジカル n が表面から離脱する個数は、一般に (1.7) 式より、 $\sigma_s \Theta_n / \tau_n$ で与えられる。ここで、 σ_s は清浄な表面の全吸着サイトの面密度、 Θ_n は非反応性ラジカル n が占有している表面の被覆率、 τ_n は非反応性ラジカル n が被エッチング材料表面上に吸着している平均時間である。

あるフラックス F_m と吸着率 σ_m を持って入射したラジカル m は被エッチング材料表面に $\sigma_m F_m$ だけ吸着し、残りの $(1 - \sigma_m) F_m$ は表面から再放出される。この再放出されるラジカルと熱励起により表面から離脱するラジカルとの違いは、単に遅れの時間だけ（即ち、放出までの時間は、前者では瞬間であるが後者ではある有限な時間 τ_m である。）であり他のダイナミクス等は同じであると仮定する。この仮定のもとで熱励起により表面から放出されるラジカルの点 P におけるフラックス $F_n^{(4)}(P)$ は

$$F_n^{(4)}(P) = \frac{\sigma_s}{\tau_n} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} \Theta_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \quad (1.24)$$

で与えられる。ここでも、再放出されるラジカルの場合同様、表面からのラジカルの離脱に対しても“diffuse re-emission model”を仮定する。

以上のことから、点 P における非反応性ラジカルの全フラックス $F_n(P)$ は

$$F_n(P) = F_n^{(1)}(P) + F_n^{(2)}(P) + F_n^{(3)}(P) + F_n^{(4)}(P) \quad (1.25)$$

で与えられることが判る。ここで、 $F_n^{(1)}(P)$ は (1.21) 式で、 $F_n^{(2)}(P)$ は (1.22) 式で、 $F_n^{(3)}(P)$ は (1.23) 式で、そして $F_n^{(4)}(P)$ は (1.24) 式で与えられる。

エッチングレート

エッチングレートは一般に

$$ER_{\text{total}} = ER_{\text{thermal}} + ER_{\text{physical}} + ER_{\text{ion assisted}} \quad (1.26)$$

と分解することができる。ここで、 ER_{thermal} は吸着ラジカルに被覆されている表面における熱励起型化学反応によるエッチングレートを、 ER_{physical} は高エネルギーイオンによる清浄な被エッチング材料表面に対する物理的スパッタリングによるエッチングレートを、そして $ER_{\text{ion assisted}}$ は高エネルギーイオンによる吸着ラジカルに被覆されている表面に対する物理的及び化学的スパッタリング（イオンアシスト反応）によるエッチングレートを表す。

以下に、エッチングレート ER_{thermal} 、 ER_{physical} 及び $ER_{\text{ion assisted}}$ について具体的な形を与える。

熱励起型化学反応によるエッチングレート

点 P における熱励起型化学反応によるエッチングレートは

$$ER_{\text{thermal}}(P) = \frac{1}{\rho} \sum_n k_0^{(n)} \Theta_n(P) \exp\left(-\frac{E_a^{(n)}}{k_B T}\right) \quad (1.27)$$

で与えられると仮定する。ここで、 ρ は基盤の密度、 $k_0^{(n)}$ はラジカル n に関係した定数、 Θ_n はラジカル n の表面占有率、 $E_a^{(n)}$ は活性化エネルギー、 k_B は Boltzmann 定数そして T は基盤の温度である。また、 n についての和は全てのラジカルに亘ってである。

物理的スパッタリングによるエッチングレート

点 P における物理的スパッタリングによるエッチングレートは

$$ER_{\text{physical}}(P) = \frac{1}{\rho} \sum_i \int_0^{\epsilon_{max}} Y_i^{\text{physical}}(\epsilon) F_i(P, \epsilon) \Theta_0(P) d\epsilon \quad (1.28)$$

で与えられる。ここで、 ϵ_{max} は入射イオンの最大エネルギー、 $Y_i^{\text{physical}}(\epsilon)$ はイオン i による物理的スパッタリング収率、 $F_i(P, \epsilon)$ はエネルギー ϵ を持つ点 P における入射イオン i のフラックス ((1.12) または (1.15) で与えられる)、 $\Theta_0(P)$ は点 P における清浄な基盤表面の占有率である。また、 i についての和は反応性イオンと非反応性イオンの両方に亘ってである。

イオンアシスト反応によるエッチングレート

点 P におけるイオンアシスト反応によるエッチングレートは

$$ER_{\text{ion assisted}}(P) = \frac{1}{\rho} \sum_i \sum_j \int_0^{\epsilon_{max}} Y_{ij}^{\text{ion assisted}}(\epsilon) F_i(P, \epsilon) \Theta_j(P) d\epsilon \quad (1.29)$$

で与えられる。ここで、 ϵ_{max} は入射イオンの最大エネルギー、 $Y_{ij}^{\text{physical}}(\epsilon)$ はイオン i によりラジカル j が表面反応層から離脱する収率、 $F_i(P, \epsilon)$ はエネルギー ϵ を持つ点 P における入射イオン i のフラックス ((1.12) または (1.15) で与えられる)、 $\Theta_j(P)$ は点 P におけるラジカル j の表面占有率である。また、 i についての和は反応性イオンと非反応性イオンの両方に亘ってであり、 j についての和は基盤材料を含むようなラジカル j 全体に亘ってである。しかし、基盤材料だけの場合は除く。

デポジションレート

デポジションレート DR_{total} は一般に

$$DR_{\text{total}} = DR^{(1)} + DR^{(2)} - DR^{(3)} \quad (1.30)$$

と分解することができる。ここで、第 1 項は堆積物が降り注ぐ効果による、第 2 項は入射ラジカルと表面反応層のラジカルとが反応し堆積物が生成される効果による、最後の項はイオンアシスト反応によって表面反応層から堆積物が離脱する効果によるデポジションレートを表す。

堆積物が降り注ぐ効果によるデポジションレート

点 P において堆積物が降り注ぐ効果によるデポジションレートは、(1.5) 式を用いて

$$DR^{(1)}(P) = \frac{1}{\rho_d} \sum_m \left[\sigma_{m0} \Theta_0(P) + \sum_k \sigma_{mk} \Theta_k(P) \right] F_m(P) \quad (1.31)$$

で与えられる。ここで、 ρ_d はデポジション層の密度、 σ_{m0} および σ_{mk} はそれぞれ、ラジカル m と清浄な被エッチング材料膜との間のおよび飛来したラジカル m と被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k の吸着膜層との間の吸着率である。また、k についての和は被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k がラジカル m で置き換わる全ての k に互る。更に、m についての和は全ての堆積物に互ってである。

堆積物の生成によるデポジションレート

点 P において入射ラジカルと表面反応層のラジカルとが反応し堆積物が生成される効果によるデポジションレートは、(1.6) 式より

$$DR^{(2)}(P) = \frac{1}{\rho_d} \sum_m \sum_{l \neq m} \left[\sigma_{l0}^{(m)} \Theta_0(P) + \sum_{k \neq m} \sigma_{lk}^{(m)} \Theta_k(P) \right] F_l(P) \quad (1.32)$$

と表せる。ここで、 $\sigma_{l0}^{(m)}$ および $\sigma_{lk}^{(m)}$ はそれぞれ、飛来するラジカル l と清浄な被エッチング材料膜との間の反応でおよび飛来したラジカル l と被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k の吸着膜層との間の反応で堆積物 m が生成される生成率である。また、l についての和は m とは異なる入射ラジカル全体に互る。更に、k についての和は被エッチング材料膜上に形成されたラジカル k がラジカル l と反応し堆積物 m を生成する全ての k に互る。最後に m についての和は堆積物全体に互る。

イオンアシスト反応によるデポジションレート

点 P においてエネルギー ϵ を持ったイオンによるイオンアシスト反応によって表面反応層から堆積物が離脱する効果によるデポジションレートは、(1.9) 式より

$$DR^{(3)}(P) = \frac{1}{\rho_d} \sum_m \sum_{i \neq m} \int_0^{\epsilon_{max}} \left[\sum_l Y_{im}^{(l)}(\epsilon) \right] \Theta_m(P) F_i(P, \epsilon) d\epsilon \quad (1.33)$$

で与えられる。ここで、 $Y_{im}^{(l)}(\epsilon)$ は表面反応層から離脱する反応生成物 l の収率であり、堆積物 m がラジカル l に分解することも考慮している。また、i に対する和は全ての入射イオンに関してであり、m についての和は全ての堆積物に互ってである。

表面移動速度

表面移動速度（基盤内部に向かって正）は $v = ER_{total} - DR_{total}$ で与えられる。 $v > 0$ であればエッチングが進み、 $v < 0$ ならばデポジションが進む。また、v の進行方向は表面の法線方向である。

このように算出された表面移動速度を用いて微小時間 Δt の間に被エッチング材料膜上表面の各点の形状を変化させ新しい表面形状を算出する。次に、この新しい表面形状で新たに表面移動速度を算出する。この繰り返しで最終的な表面形状が得られる。処で、時間の進行に伴った表面形状の変化はストリングモデルで表現する。

計算手法の概略

基礎式

表面反応に関する基礎式

表面反応に関する基礎式は, (1.3), (1.4) 式より, 空間各点 P において

$$\sigma_s \frac{d\Theta_0}{dt}(P, t) = - \sum_{m=1}^N [G_m(P, t) - H_m(P, t)] \quad (2.1)$$

$$\sigma_s \frac{d\Theta_m}{dt}(P, t) = G_m(P, t) - H_m(P, t) \quad \text{for } m = 1, \dots, N \quad (2.2)$$

で与えられる. ここで, σ_m は清浄な表面の全吸着サイトの綿密度, Θ_m は吸着ラジカル m による表面被覆率, Θ_0 清浄な被エッチング材料膜による表面被覆率である. ただし, この Θ_0 と Θ_m とは

$$\begin{aligned} \Theta_0(P, t) + \sum_{m=1}^N \Theta_m(P, t) &= 1 \\ \Theta_m(P, t) &\geq 0 \quad \text{for } m = 0, 1, \dots, N \end{aligned}$$

なる規格化条件と拘束条件を満足する. また, $G_m(t)$ はラジカル m の単位時間当たりの全吸着数, $H_m(t)$ はラジカル m が単位時間当たりに表面から消滅する全個数であり,

$$\begin{aligned} G_m(P, t) &\equiv G_m^{(1)}(P, t) + G_m^{(2)}(P, t) \\ H_m(P, t) &\equiv H_m^{(1)}(P, t) + H_m^{(2)}(P, t) + H_m^{(i)}(P, t) \end{aligned}$$

と書くことができる. (以下では, 時刻 t を省略する.) ただし, $G_m^{(1)}(P)$ は (1.5) 式より

$$G_m^{(1)}(P) = \left[\sigma_{m0} \Theta_0(P) + \sum_{k \neq m} \sigma_{mk} \Theta_k(P) \right] F_m(P) \quad (2.3)$$

で与えられ, $G_m^{(2)}(P)$ は (1.6) 式より

$$G_m^{(2)}(P) = \sum_{l \neq m} \left[\sigma_{l0}^{(m)} \Theta_0(P) + \sum_{k \neq m} \sigma_{lk}^{(m)} \Theta_k(P) \right] F_l(P) \quad (2.4)$$

で与えられ, $H_m^{(1)}$ は (1.7) 式より

$$H_m^{(1)} = \frac{1}{\tau_m} \sigma_s \Theta_m \quad (2.5)$$

で与えられ, $H_m^{(2)}$ は (1.8) 式より

$$H_m^{(2)} = \sum_{k \neq m} \sum_{l \neq m} \sigma_{km}^{(l)} \Theta_m F_k \quad (2.6)$$

で与えられ, $H_m^{(i)}$ は (1.9) 式より

$$H_m^{(i)} = \sum_{k \neq m} \int_0^{\epsilon_{max}} \left[\sum_l Y_{km}^{(l)}(\epsilon) \right] \Theta_m F_k^{(i)}(\epsilon) d\epsilon \quad (2.7)$$

で与えられる. ただし, ϵ はイオンのエネルギー, ϵ_{max} はイオンの最大エネルギーである. 上の式において, F_n ($n = m, l, k$) はラジカル n のフラックスであり, (1.20) または (1.25) 式より, 積分方程式

$$F_n(P) = F_n^{(1)}(P) + F_n^{(2)}(P) + F_n^{(3)}(P) + F_n^{(4)}(P) \quad (2.8)$$

を満足する。ただし、(1.16) ~ (1.19) 式または (1.21) ~ (1.24) 式より、

$$\begin{aligned} F_n^{(1)}(P) &= F_n^0 \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_n(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \\ F_n^{(2)}(P) &= \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} [1 - \sigma_n(Q)] F_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \\ F_n^{(3)}(P) &= \sum_{k \neq m} \sum_m \int_0^{\epsilon_{max}} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} Y_{km}^{(n)}(\epsilon) \Theta_m(Q) F_k^{(i)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds d\epsilon \\ F_n^{(4)}(P) &= \frac{\sigma_s}{\tau_n} \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} \Theta_n(Q) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \end{aligned}$$

である。また、イオンのフラックス $F_k^{(i)}(P, \epsilon)$ は、(1.12) または (1.15) 式より

$$F_k^{(i)}(P, \epsilon) = F_k^{(1)}(P, \epsilon) + F_k^{(2)}(P, \epsilon) \quad (2.9)$$

で与えられる。ただし、(1.10) と (1.11) 式または (1.13) と (1.14) 式より

$$\begin{aligned} F_k^{(1)}(P, \epsilon) &= F_0^{(i)}(\epsilon) \int_{\theta_1}^{\theta_2} G_i(\theta) \cos(\theta - \psi) d\theta \\ F_k^{(2)}(P, \epsilon) &= \int_{\text{Profile}} \frac{1}{2r} (1 - \sigma_k(Q, \epsilon)) F_k^{(1)}(Q, \epsilon) \cos \phi_P \cos \phi_Q ds \end{aligned}$$

エッチングレートに関する基礎式

エッチングレートに関する基礎式は、(1.26) 式より、点 P において

$$ER_{\text{total}}(P) = ER_{\text{thermal}}(P) + ER_{\text{physical}}(P) + ER_{\text{ion assisted}}(P) \quad (2.10)$$

で与えられる。ただし、(1.27), (1.28) 及び (1.29) 式より、 ER_{thermal} 、 ER_{physical} 及び $ER_{\text{ion assisted}}$ は

$$\begin{aligned} ER_{\text{thermal}}(P) &= \frac{1}{\rho} \sum_n k_0^{(n)} \Theta_n(P) \exp\left(-\frac{E_a^{(n)}}{k_B T}\right) \\ ER_{\text{physical}}(P) &= \frac{1}{\rho} \sum_i \int_0^{\epsilon_{max}} Y_i^{\text{physical}}(\epsilon) F_i(P, \epsilon) \Theta_0(P) d\epsilon \\ ER_{\text{ion assisted}}(P) &= \frac{1}{\rho} \sum_i \sum_j \int_0^{\epsilon_{max}} Y_{ij}^{\text{ion assisted}}(\epsilon) F_i(P, \epsilon) \Theta_j(P) d\epsilon \end{aligned}$$

デポジションレートに関する基礎式

デポジションレートに関する基礎式は、(1.30) 式より、点 P において

$$DR_{\text{total}}(P) = DR^{(1)}(P) + DR^{(2)}(P) - DR^{(3)}(P) \quad (2.11)$$

で与えられる。ただし、(1.31), (1.32) 及び (1.33) 式より $DR^{(1)}$ 、 $DR^{(2)}$ 及び $DR^{(3)}$ は

$$\begin{aligned} DR^{(1)}(P) &= \frac{1}{\rho_d} \sum_m \left[\sigma_{m0} \Theta_0(P) + \sum_k \sigma_{mk} \Theta_k(P) \right] F_m(P) \\ DR^{(2)}(P) &= \frac{1}{\rho_d} \sum_m \sum_{l \neq m} \left[\sigma_{l0}^{(m)} \Theta_0(P) + \sum_{k \neq m} \sigma_{lk}^{(m)} \Theta_k(P) \right] F_l(P) \\ DR^{(3)}(P) &= \frac{1}{\rho_d} \sum_m \sum_{i \neq m} \int_0^{\epsilon_{max}} \left[\sum_l Y_{im}^{(l)}(\epsilon) \right] \Theta_m(P) F_i(P, \epsilon) d\epsilon \end{aligned}$$

表面移動速度に関する基礎式

表面移動速度（基盤内部に向かって正）は $v = ER_{\text{total}} - DR_{\text{total}}$ で与えられる。 $v > 0$ であればエッチングが進み、 $v < 0$ ならばデポジションが進む。ただし、 v の進行方向は表面の法線方向である。このように算出された表面移動速度を用いると、微小時間 Δt の間に被エッチング材料膜表面上の各点の移動距離は $v\Delta t$ で与えられる。

． 2. 4 低環境負荷型集積化プロセス基盤技術開発

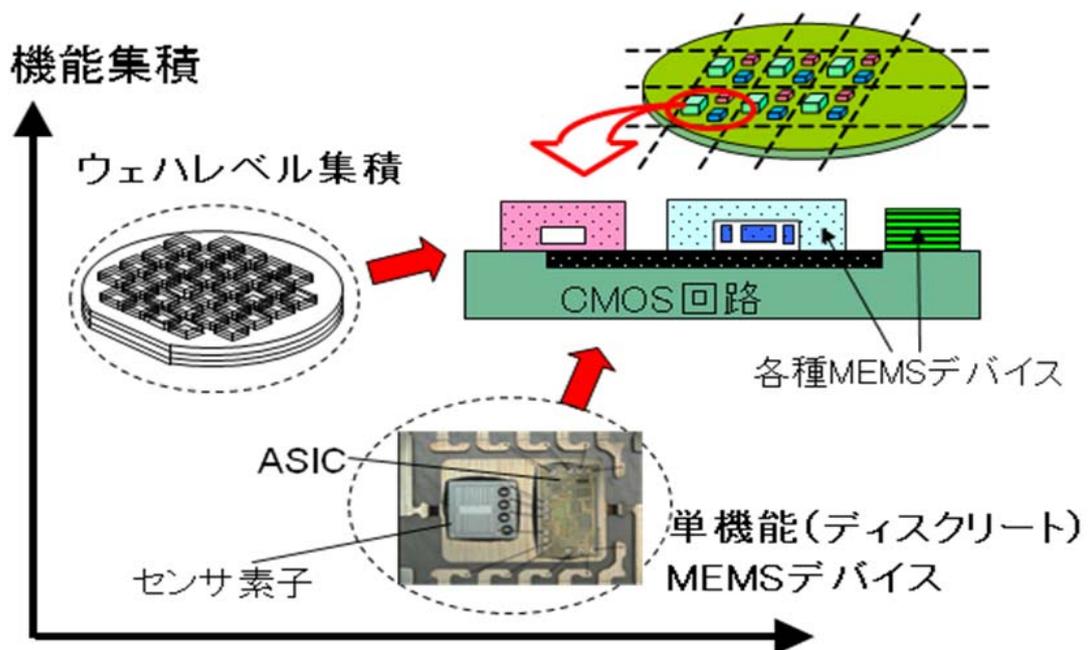
(1) 研究の目的

様々な異種デバイス、電子回路などと複合化した集積化 MEMS を低環境負荷で製造するためには、それぞれのデバイスを最適なウエハサイズ・プロセスで製造することが有効である。そのため、個別に製造された MEMS デバイスや電子回路その他のデバイスを集積化するための、接合技術の開発が必須である。そのための接合法には以下のような特性が要求される。

加速度センサ、ジャイロ、RF スイッチなど様々な MEMS においては、振動型の構造が多く用いられている。そのような振動型の構造では固有振動数と Q 値がデバイス性能に大きく影響する。これらを制御するには、デバイス構造に加え、封止構造内の気体の圧力の調整が必要であり、ジャイロなどでは高い Q 値を得るために真空での封止が、一方、加速度センサなどでは低圧から大気圧程度での封止が必要とされる。このため、MEMS の接合法には、真空から大気圧までの圧力範囲において封止接合が可能であることが求められている。

一方で接合プロセスには、プロセス自体の環境負荷の低減ばかりではなく、デバイスへのダメージ低減の観点から、プロセスの低温化が強く求められている。なかでも近年、上記のような封止された振動型構造の MEMS デバイスにおいて、可動部の固着（スティッキング）によるデバイスの不良が大きな問題となり、歩留まりの低下や信頼性の低下などの原因となっている。そのための対策として各種の単分子膜によるコーティングが用いられているが、このような単分子膜の特性を損なわないプロセス温度の上限は 250°C 程度であることが分かっている¹⁾。このため、接合プロセス温度はそれ以下であることが必要であり、これにより各種の MEMS デバイスの製造プロセスの歩留まりと信頼性が向上し生産性の向上に基づいた観点で環境負荷の低減が可能となる。

以上の理由から本研究開発では、ウエハ・ツー・ウエハとチップ・ツー・ウエハ技術を組み合わせた、ウエハサイズ、チップサイズに制限されることのない、様々な異種デバイスのウエハレベル一括集積化技術を実現するための基盤技術として、250°C 以下で大気圧付近から真空雰囲気まで封止できる接合プロセスについて検討したのでその報告をする。



図V.2.4.1-1 異種デバイスのウェハレベル一括集積化技術

(2) 接合技術

MEMS デバイスの製造に用いられているウェハレベルでの接合技術として、図V.2.4.2-1 に示すような陽極接合が知られている。陽極接合は、1960 年代後半に米国の Mallory 社で開発された接合方法で、最初は Mallory 法と呼ばれていた。シリコンとガラスの研磨面を重ねて 400~500℃に加熱し、ガラス側に 500~1000V 程度のマイナス電圧を印加すると、ガラスに含まれる Na⁺などのアルカリイオンがマイナス電極側に移動し、ガラスの接合面側に空間電荷層が形成される。その結果、ガラスとシリコンとの間で静電引力が働き界面で原子間結合が起きることによって、大きな接合力を得ることが出来る。陽極接合は大きな接合強度を得ることは出来るが、いくつかの問題を含んでいる。接合には 500~1000V の高電圧が必要で、静電引力による曲がり、電子回路、内部素子の破壊が生じる場合がある。また、400℃以上の高温で接合するため、接合後、常温に戻した場合にガラスとシリコンの熱膨張係数の違いにより、基板の反りが発生する。さらには、ガラス中のアルカリイオンの析出などが挙げられる。

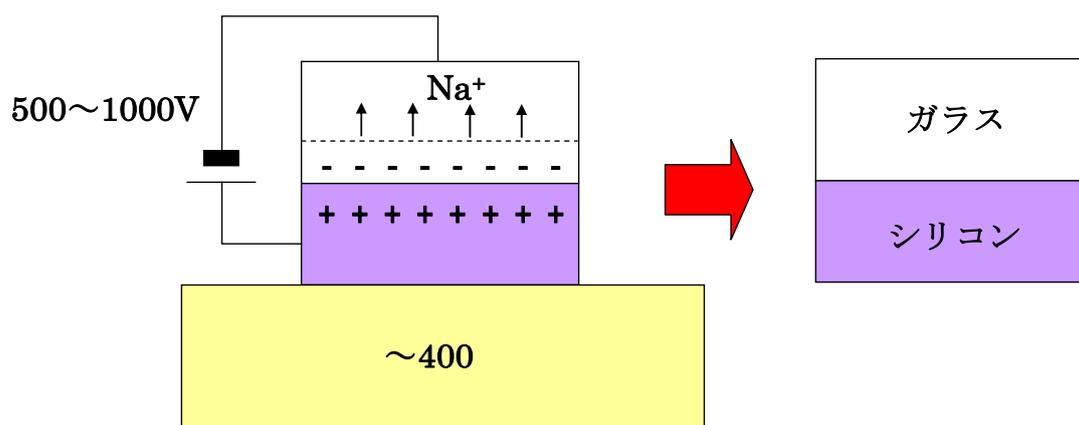
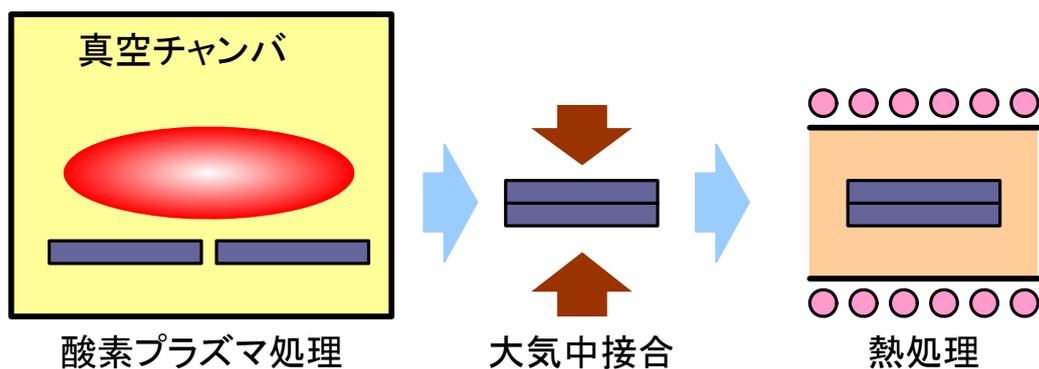


図 V.2.4.2-1 陽極接合の原理図

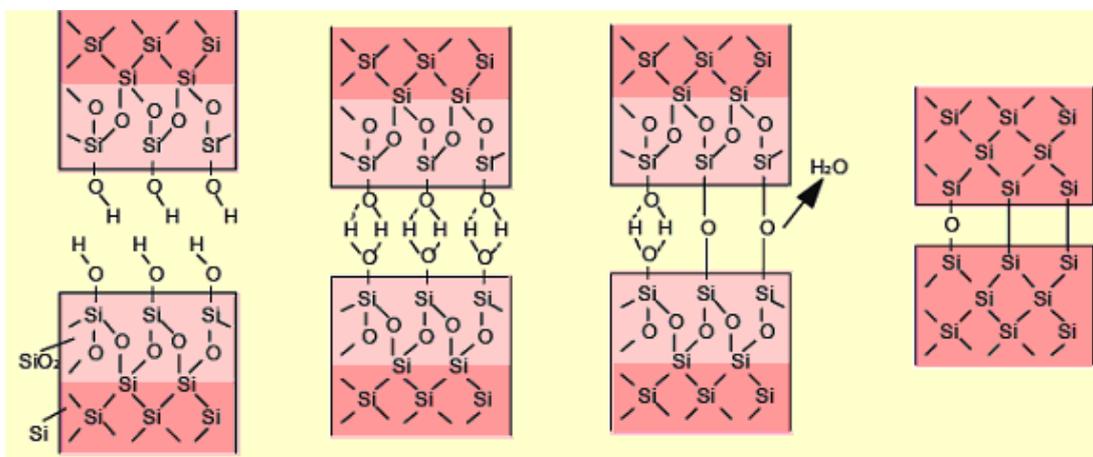
陽極接合に代わる電圧を印加しない接合方法として、ウエハ直接接合が挙げられる。ウエハ直接接合は、CMP などにより研磨加工された、非常に粗さの小さい面同士を貼り合わせ、加熱処理により接合する技術である。ウエハ直接接合では、ウエハの表面を硝酸や、硫酸過酸化水素水混合液などで親水化処理を行なった後、ウエハを貼り合わせ水素結合により弱接合する。この状態で熱処理を行なうと、ほとんど無加圧で接合を得ることが出来る。しかしながら、実用的な強い強度を得るためには、1000°C以上の熱処理が必要である。

ウエハ直接接合の熱処理温度を低減するため、接合界面をプラズマで改質することで接合をおこなう技術が仏 LETI や独 Max Planck 研究所などで研究されている。例えば、図 .2.4.2-2 に示すように、接合表面をプラズマ処理することで OH 基が形成され、OH 基間の水素結合力による仮接合、および低温アニールによる水分子の脱離により接合がおこなわれる。低温アニール工程において水分子等によりガス発生するので、接合界面での気泡発生課題を解決する必要がある²⁾。

本研究では低温で強固な接合が可能なプラズマ表面活性化処理による接合について検討したのでそれを報告する。



接合の原理



図V.2.4.2-2 プラズマ表面処理によるウエハ直接接合の原理図

(3) 集積化プロセス要素技術の評価

(3) -1 技術課題

チップサイズや種類の異なる機能デバイスを同一ウエハ上へ、フレキシブルに集積化するためには、図V.2.4.3-1-1に示すような技術課題がある。

1) フレキシブルに仮接合、剥離を可能とする接合強度の制御

キャリアウエハを用い、一括で集積化接合するためには、各デバイスチップがキャリアウエハに対して、運搬可能な程度に接合され、本接合後、容易に剥離可能となる接合強度の制御が必要である。

2) 機能膜の機能を低下させることのない低温接合（250℃以下）

構造体がスティッキングするのを防止する固着防止膜の機能を劣化させないためには250℃以下での低温接合が必須である。また、異種材料のデバイスの接合など熱膨張係数が異なる材質の接合では、接合後の残留応力の低減などの観点からも低温での接合が望ましい。

3) 大気圧付近から真空雰囲気での気密封止

デバイスには、ジャイロ等、真空雰囲気での封止が必要なものもある。また、特性の安定化のためには封止内部は気密状態が望ましい。

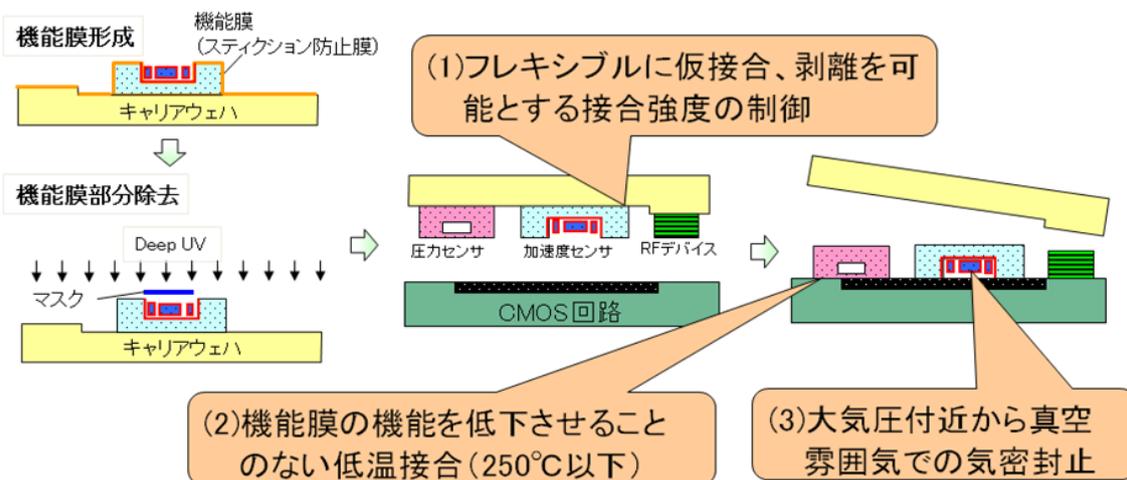


図 V.2.4.3-1-1 一括集積化の技術課題

これらの技術課題を解決するために、本年度は次の開発を実施した。

(i) 接合強度制御技術と気密封止技術

一括集積化のためにキャリアウエハへの仮接合の接合強度を、正規の接合強度の 1/10 以下に安定して制御することを目指す。

具体的には接合表面の(a)長周期粗さ、(b)短周期粗さ、及び(c)表面改質により、接合強度制御、及び気密封止の実現を図る。(a)～(c)の実施検討項目について以下に示す。

(a)長周期粗さ

シリコン深堀エッチング又は異方性ウェットエッチングを用い、凸形状、ライン&スペースなどをシリコン基板に形成して接合強度を制御する。

(b)短周期粗さ

プラズマ強度、照射時間、材料ガス(Ar、O₂ など)などのパラメータ制御により、シリコン基板に微細な凹凸を形成して接合強度を制御する。また、CMP (Chemical Mechanical Polishing)の条件設定により、シリコン基板上に堆積したポリシリコンの短周期粗さ制御も検討する。

(c)表面改質

Ar、O₂ プラズマによる表面活性化処理などで接合表面の状態の改質により接合強度の制御、及び気密封止の実現を図る。

(ii) 機能膜の機能を低下させない低温接合技術

機能膜としては、振動型構造の MEMS デバイスにおいて、可動部の固着(スティッキング)を防止する SAM (Self-Assembled Monolayer)膜を用いる。SAM 膜の特性が劣化しない、250°C以下の低温接合技術実現に向け、接合面に付着した機能膜の影響把握と、機能膜の部分的除去方法確立に向けた課題抽出を行なう。機能膜の部分的除去法については、ステンシルマスクを使用した UV 照射やプラズマ照射などを検討する。

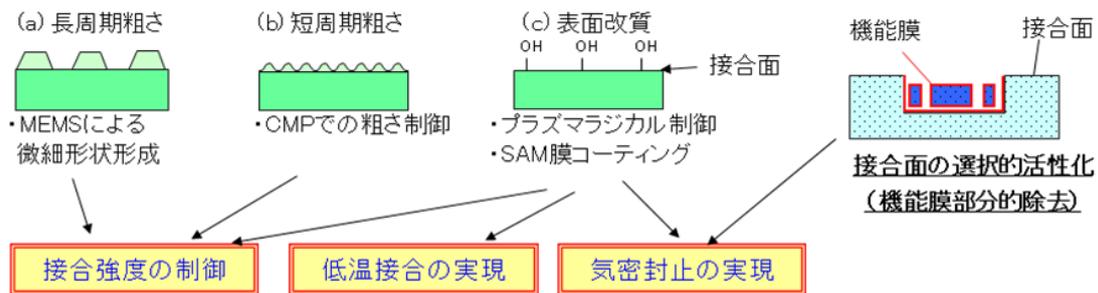


図 V.2.4.3-1-2 接合制御の概略図

(3) -2 接合強度制御技術と気密封止技術

(3) -2-1 長周期粗さ

図 V.2.4.3-2-1-1 に今回接合に使用したパターンを示す。接合ウエハは 8 インチシリコンウエハで、明るい部分が凸形状で接合する部分である。形状は Deep-RIE にて 10 μm エッチングして製作した。

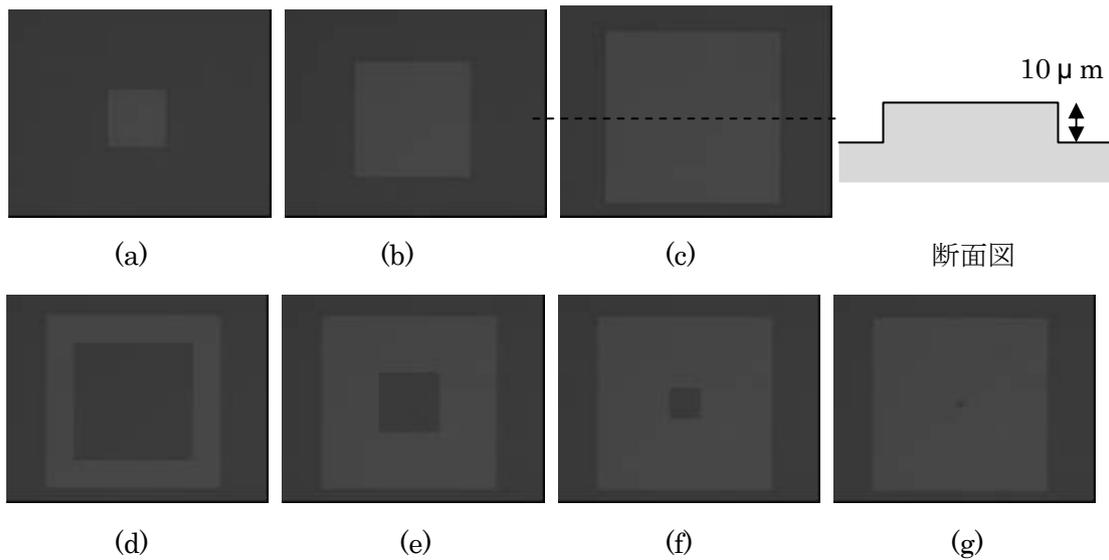


図 V.2.4.3-2-1-1 接合パターン

- (a) 1mm 角
- (b) 2mm 角
- (c) 3mm 角
- (d) 3mm 角に 2mm 角の穴
- (e) 3mm 角に 1mm 角の穴
- (f) 3mm 角に 0.5mm 角の穴
- (g) 3mm 角に 0.1mm 角の穴

接合は本プロジェクトで導入したボンドテック株式会社製プラズマ表面活性化接合装置(WAP-1000M)により接合を行なった。接合条件は次の通りである。

[接合条件]

表面活性化処理

シーケンシャルプラズマ³⁾

O₂ プラズマ : 出力 30W、ガス流量 20ml/min、圧力 60Pa、時間 30sec

N₂ ラジカル : 出力 250W、ガス流量 20ml/min、圧力 60Pa、時間 15sec

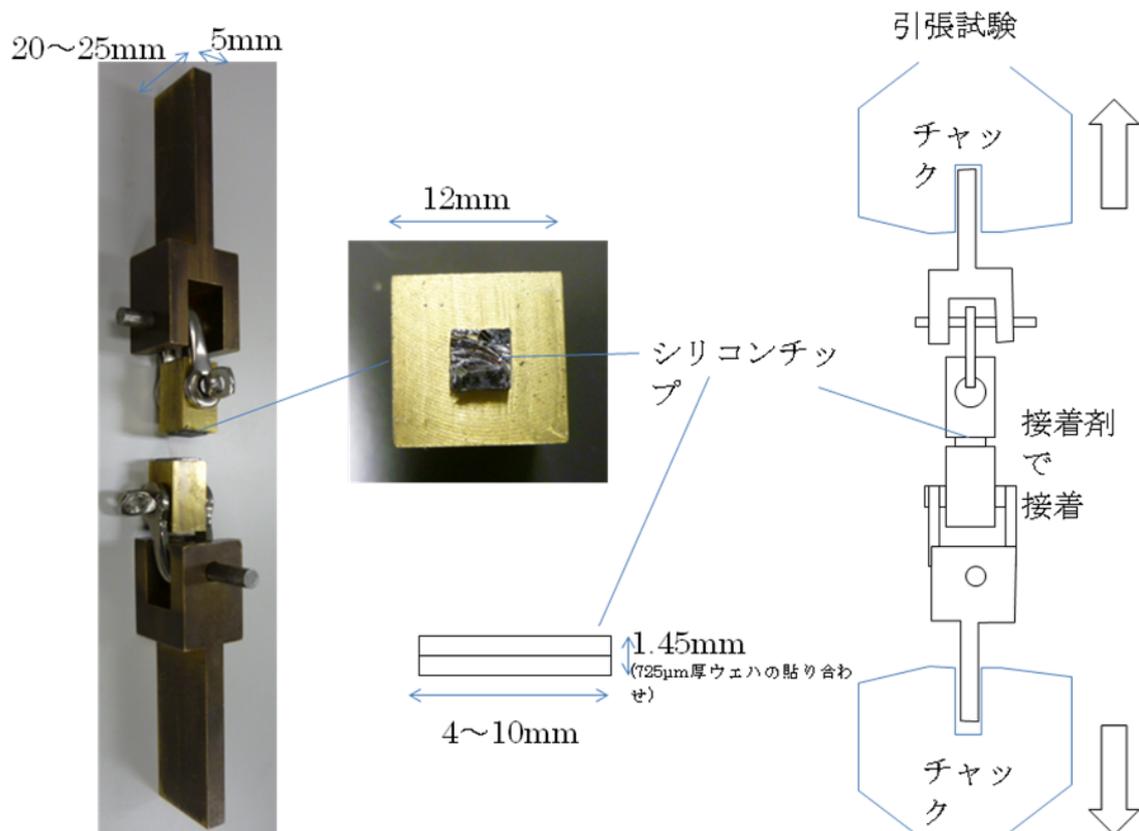
接合前状態

クールプレートによる温度制御で湿度 65%に制御して貼り合わせ

接合

温度 250°C、加圧 1t、時間 1hr

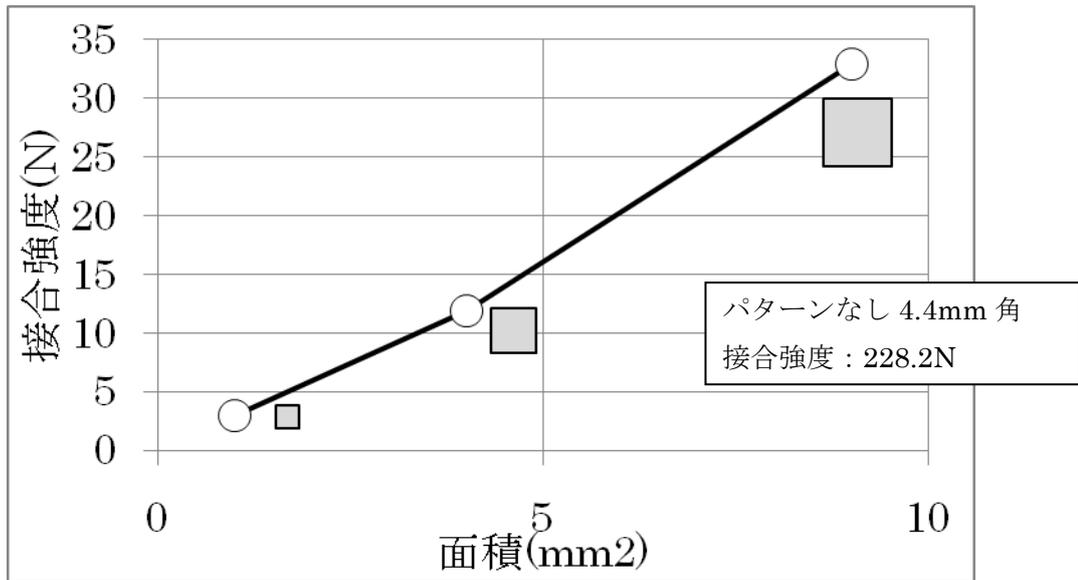
接合後のシリコンウエハをステルスダイシング装置にて 4.4mm 角にダイシングし、図 .2.4.3-2-1-2 に示す治具を使用し引張試験を実施した。シリコンチップを接着剤で真鍮治具中央に接着し、出来るだけ斜め方向へ力が生じないようにしている。引張試験装置は本プロジェクトで導入した広栄商事株式会社製引張試験装置(MX-2000N、500N)を用いた。



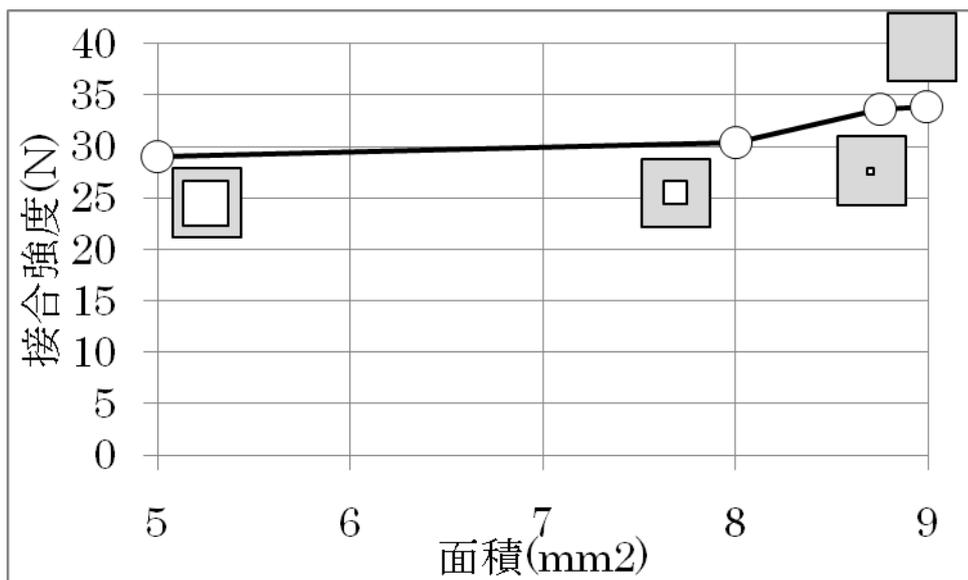
図V.2.4.3-2-1-2 引張試験治具

.3-2-1-3 に引張試験による接合強度評価結果を示す。接合強度はそれぞれ各 10 チップの平均値である。

(1)の正方形パターンでは、ほぼ面積に比例して接合強度が変化することが判る。それに対して、(2)のくり抜きパターンでは接合強度は面積に大きく依存しないことが判る。また、パターン形成なしの 4.4mm 角の正方形パターンの場合は 228.2N と非常に大きな値を示すことから、応力集中の影響が大きいと思われる。図V.2.4.3-2-1-4 に示すように、パターンが存在する場合は、接合部に切り欠きが発生するため、この部分に応力集中が発生すると考えられる。切り欠き形状は各チップでほぼ同一であるため、接合強度は応力集中が発生する外周形状に依存することとなると考えられる。したがって、接合パターンの外周形状を制御することで、パターンなしの正規の接合強度に対して、1/10 の接合強度を制御することが可能となる。今回の例では接合パターンを 2.6mm 角 (面積 6.76mm²) 程度にすることで、正規の接合強度 228.2N に対して、約 1/10 の接合強度とすることが可能となる。

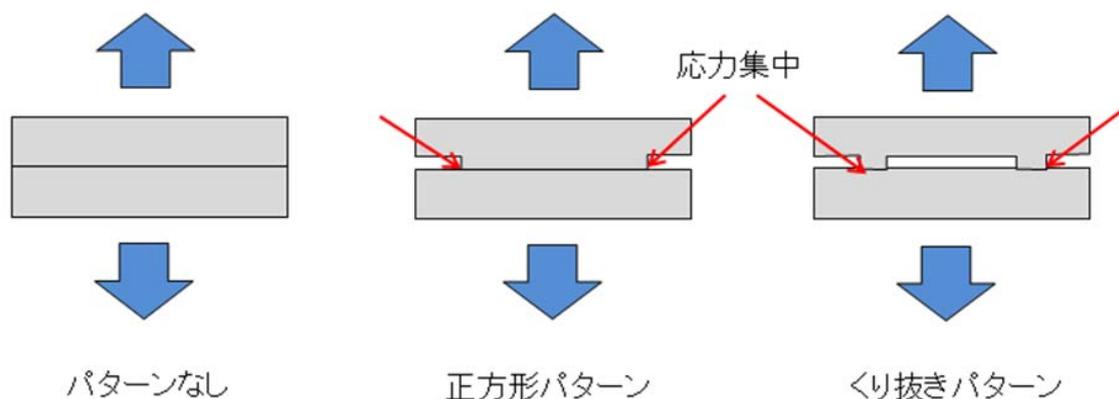


(1) 正方形パターン



(2) くり抜きパターン

図V.2.4.3-2-1-3 接合強度評価結果

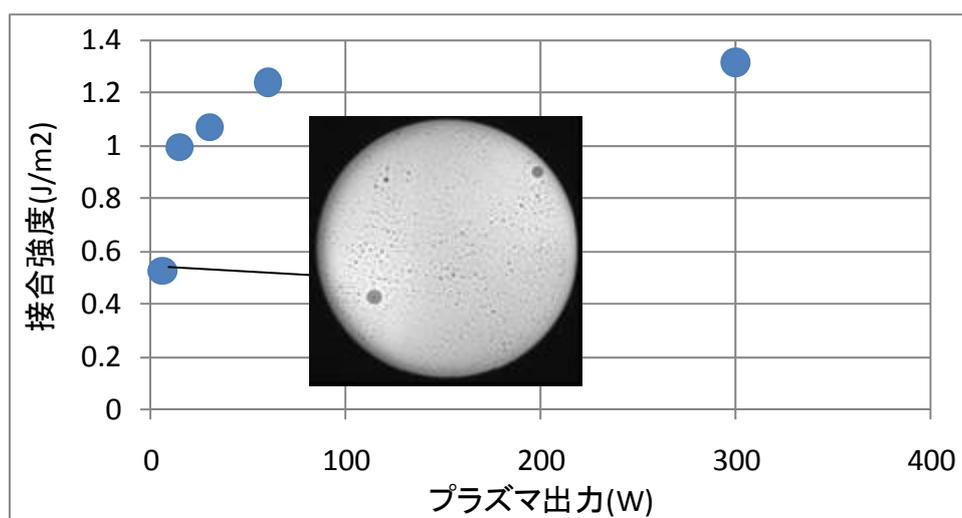


図V.2.4.3-2-1-4 応力集中

(3) -2-2 短周期粗さ

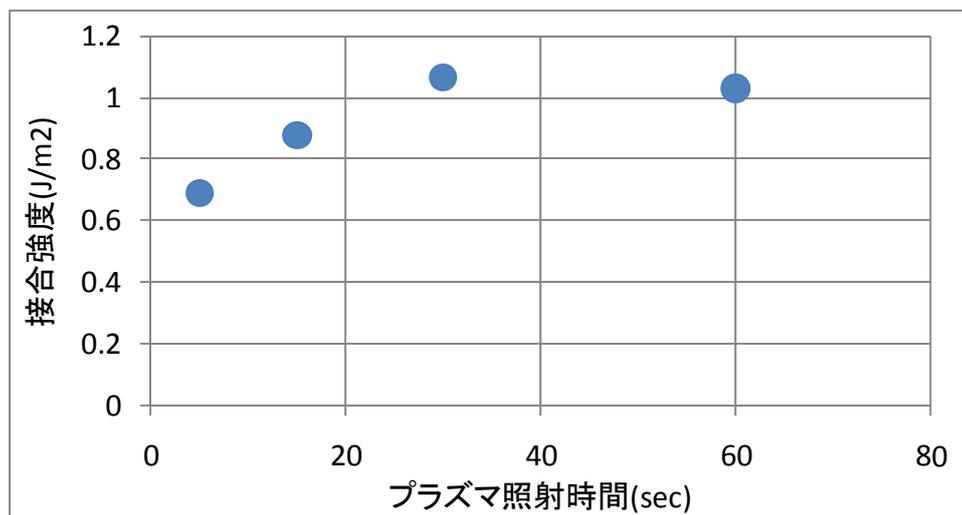
図V.2.4.3-2-2-1 にプラズマ出力と接合強度の関係を示す。今回は O₂ プラズマによる表面活性化接合を実施した。出力以外は前回接合条件と同様である。また、接合強度はカミソリ刃を挿入するブレードテスト⁴⁾にて評価した。観察は本プロジェクトで導入した浜松ホトニクス株式会社製赤外観察装置(C9597-11)と PVA TePla Analytical Systems 社製超音波観察装置(SAM300)を用いた。

プラズマ出力が高くなるほど接合強度が増加する。プラズマ出力が 6W と低い場合、図中に示すように活性化が非常に弱いため未接合部(ボイド)が多く存在することが判る。プラズマ出力を高くした場合、表面が荒れ接合強度が低くなることを推定していたが、本装置の限界出力である 300W まででは接合強度の低下は生じていない。プラズマ処理による表面粗さの影響は小さいものと考えられる。



図V.2.4.3-2-2-1 プラズマ出力と接合強度の関係

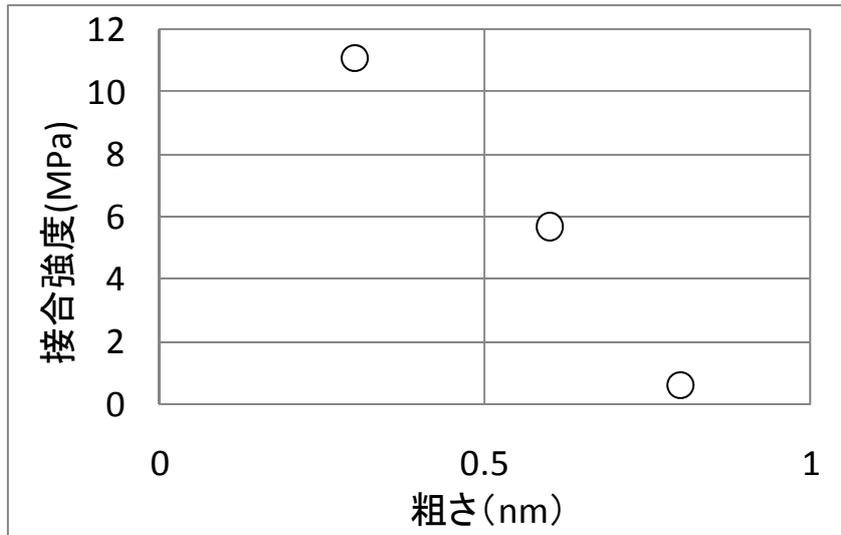
図V.2.4.3-2-2-2に、プラズマの照射時間と接合強度の関係を示す。図V.2.4.3-2-2-2より、照射時間が増加することで増加することが判る。30sec照射で頭打ちになることが判る。また、5sec程度の照射時間でも、ある程度の接合強度を得ることが可能であることを確認した。



図V.2.4.3-2-2-2 プラズマ照射時間と接合強度の関係

図V.2.4.3-2-2-3に、表面粗さと接合強度の関係を示す。接合に使用したウエハはシリコンウエハ上にノンドーパポリシリコン膜を $2\mu\text{m}$ 堆積した後、CMPを実施した。表面粗さは0.3,0.6,0.8nmの3種類用意し、同じ表面粗さを持ったウエハ同士を接合した。接合はシーケンシャルプラズマを使用し、加圧は0.5t、その他の条件は先の条件と同様で実施している。CMPを実施していない場合はポリシリコン膜の表面粗さは約50nmであり、この場合は接合不可であることが判っている。接合強度評価はパターンなしの10mm角のチップの引張試験により評価を行なった。

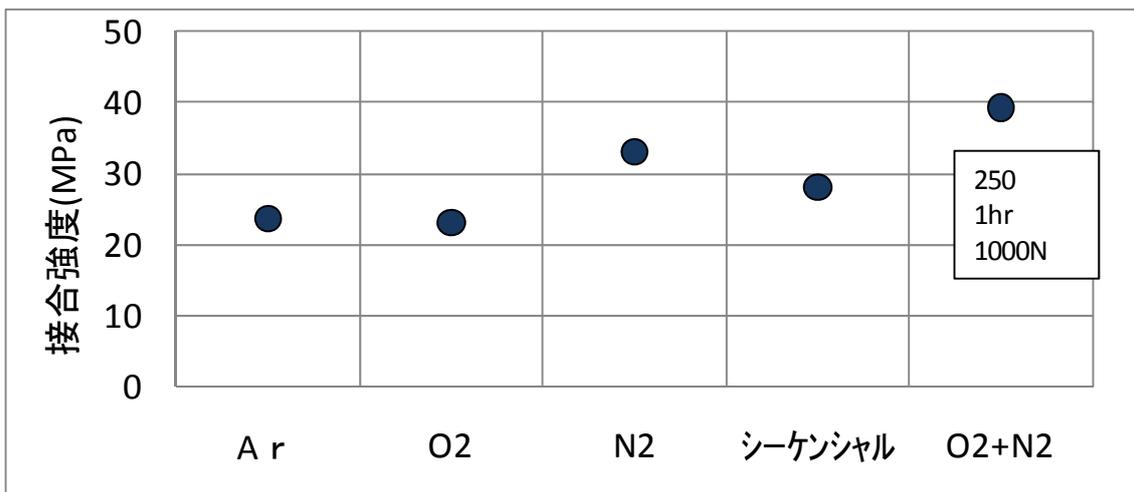
図V.2.4.3-2-2-3より、表面粗さが小さいほど接合強度が大きくなることが判った。ポリシリコン膜のCMPによる最小粗さの限界値は0.3nm程度であるが、接合強度10MPa以上と母材破壊と同等の接合強度を得ることが可能であることを確認した。以上のように、表面粗さを制御することで正規の接合強度に対して、1/10の接合強度を制御することが可能となることを確認した。



図V.2.4.3-2-2-3 表面粗さと接合強度の関係

(3) -2-3 表面改質

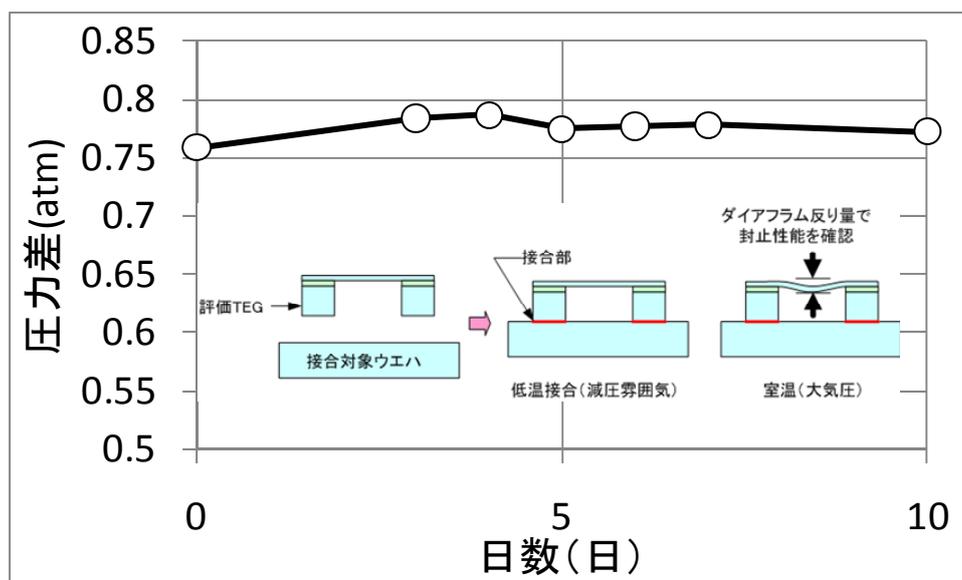
.3-2-3-1 にプラズマガス種の違いによる接合強度を示す。接合条件は加圧 1000N でガス種以外は先の条件と同様である。接合強度評価はパターンなしの 4.4mm 角のチップの引張試験により評価を行なった。図V.2.4.3-2-3-1 より、単純に比較すると O₂+N₂ ガスプラズマによる表面活性化処理が最も接合強度が高いことになるが、全ガス種で母材破壊を確認しているので接合強度に関してはガス種による大きな違いは見られないものと思われる。



図V.2.4.3-2-3-1 ガス種による接合強度の違い

次に気密封止の確認のために、接合後のダイアフラムの反りを測定した。ダイアフラムは SOI ウェハ(5/2/400 μm)で作製し、シーケンシャルプラズマによる表面活性化後、真空

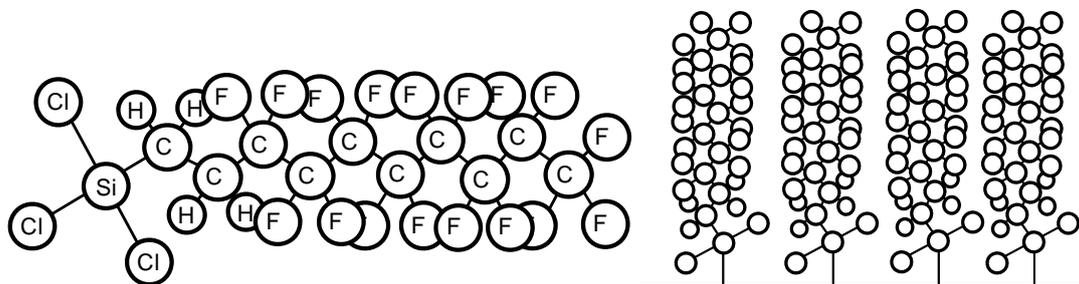
雰囲気中で封止接合(接合条件は先と同様)を実施した。図V.2.4.3-2-3-2 に真空封止後の圧力変動を示す。SOI ウェハで作製したダイアフラムは円形状で、半径 $600\mu\text{m}$ 、シリコン厚さ $5\mu\text{m}$ で形成しており、その反り量から圧力差を計算した。図V.2.4.3-2-3-2 より圧力差の変動はほとんどないことが分かり、気密封止されていることが確認出来た。



図V.2.4.3-2-3-2 真空封止後の圧力変動

(3) -3 機能膜の機能を低下させない低温接合技術

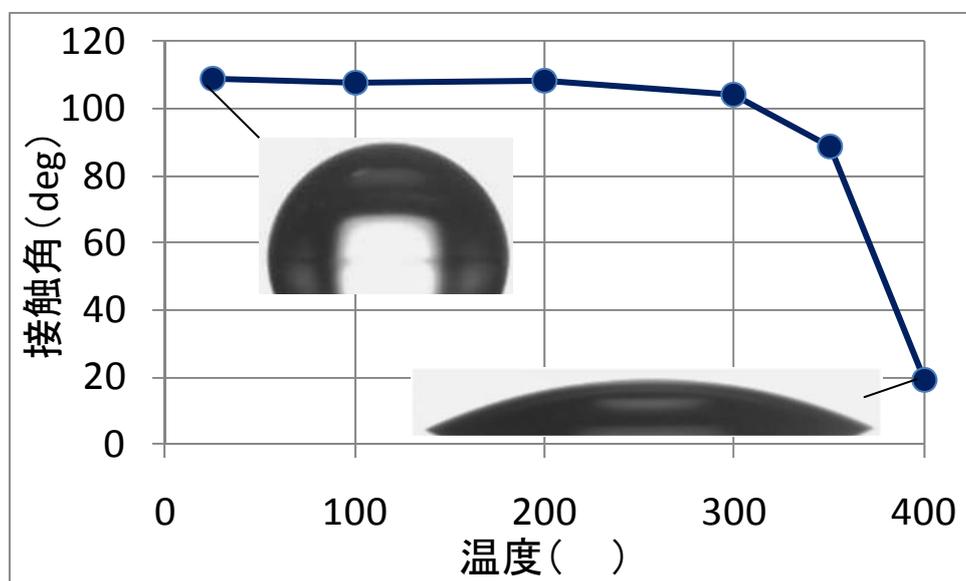
構造体のスティクションを防止する固着防止膜として使用する SAM 膜の評価を行なった。SAM 膜として FDTS(ペルフルオロデシルトリクロロシラン)膜を選択した。図 .2.4.3-3-1 に FDTS 膜の分子構造を示す。FDTS 膜は本プロジェクトで導入した IST 社製表面改質気相成膜装置(RPX-540)を使用してシリコンウェハ上に単分子層として成膜した。



図V.2.4.3-3-1 FDTS 膜

まず、FDTS 膜の温度依存性を確認した。図V.2.4.3-3-2 に FDTS 膜の水接触角温度依存性を示す。実験は大気中ホットプレート上にウェハを 30min 置いた後に接触角の測定を行

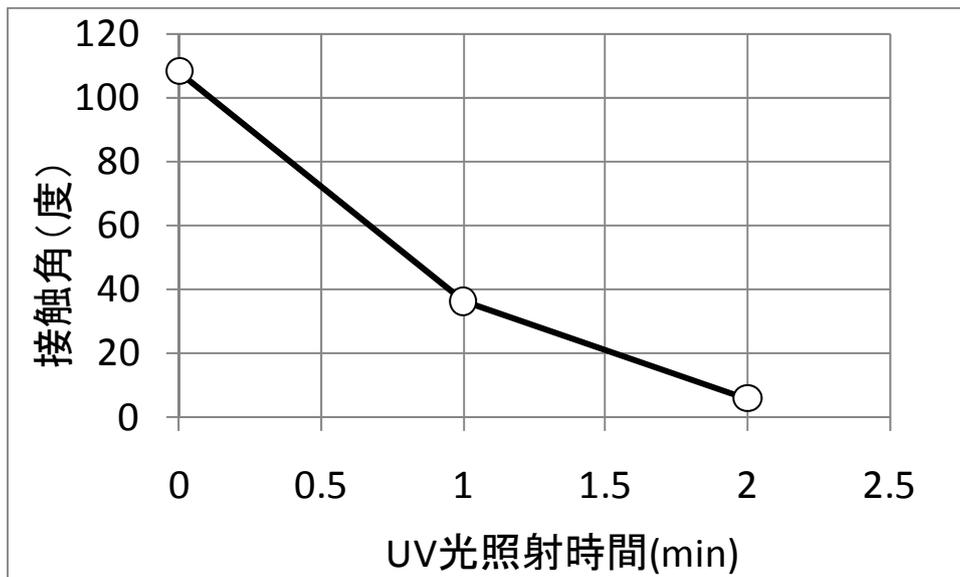
なった。



図V.2.4.3-3-2 FDTS膜の接触角温度依存性

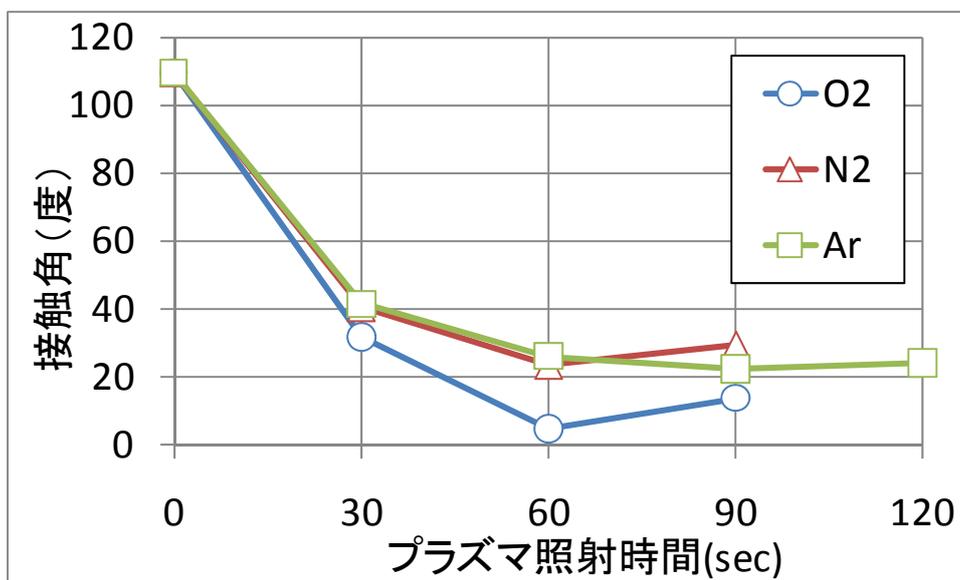
図V.2.4.3-3-2より、接触角は成膜直後には約110度と高い撥水性を示すが、温度が300を超えたあたりから接触角は低下し、400°Cでは約20度となり親水性を示すことが判った。このことから、250°C以下の低温接合技術の確立が必要であることが確認できる。

次にFDTS膜にDeepUV光(合成石英ランプ：波長184.9nm+253.7nm)を照射し接触角の変化を測定した。UV照射には、セン特殊光源株式会社製UV照射装置(PL2003N)を使用した。UV照射後の接触角の変化を図V.2.4.3-3-3に示す。UV光を2min程度照射することで接触角を10度以下にすることが出来ることが判った。また、オゾンが発生する波長184.9nmが出ないオゾンレス石英ランプ(波長253.7nmのみ)を使用した場合、10min照射後も接触角が変化しないことが判っている。そのため、FDTS膜の分解にはオゾンの寄与が大きいものと考えられる。



図V.2.4.3-3-3 UV 光照射時間と接触角の関係

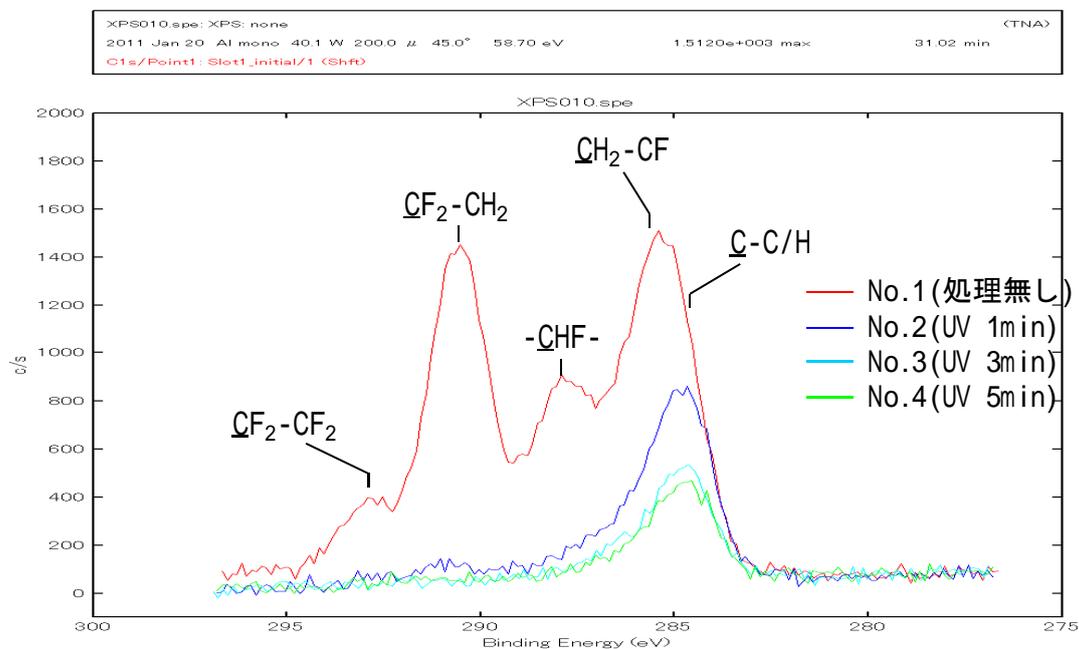
図V.2.4.3-3-4 に各種プラズマを照射した場合の接触角の変化を示す。O₂、N₂、Ar のプラズマガスを用いた。どの場合も 60sec 照射すれば接触角は十分な低さを示すことが判る。特に、O₂ プラズマはより親水性を示すことが判り、表面改質としては O₂ プラズマの効果が大きいことが判った。



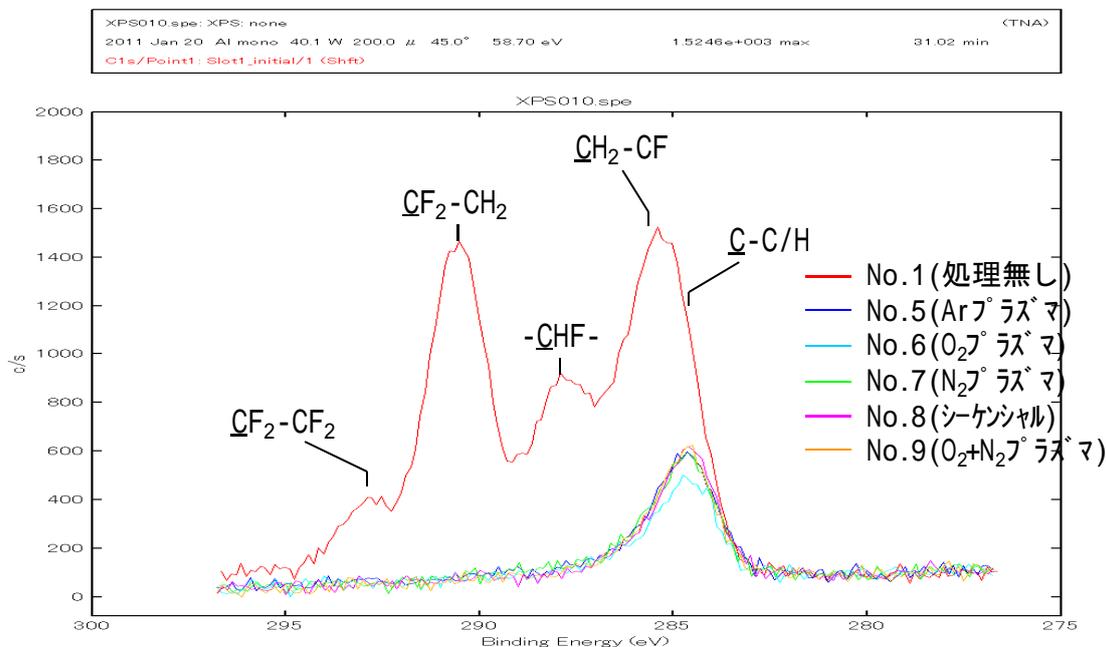
図V.2.4.3-3-4 プラズマ照射時間と接触角の関係

さらに、UV 光、プラズマ照射の影響を確認するため、UV 光、プラズマを照射した場合

の表面組成の変化を XPS(X 線光電子分光)で分析した。図 V.2.4.3-3-5 に XPS 分析結果を示す。使用した試料はシリコンウエハ上に FDTS 膜を成膜し、その後 UV 光照射、プラズマ照射をしたウエハを使用した。



(a) UV 光



(b) プラズマガス種

図 V.2.4.3-3-5 XPS 分析

[試料内容]

- No.1(処理無し)
- No.2(UV 光 1min)
- No.3(UV 光 3min)
- No.4(UV 光 5min)
- No.5(Ar プラズマ)
- No.6(O₂プラズマ)
- No.7(N₂プラズマ)
- No.8(シーケンシャル:O₂プラズマ後 N₂ラジカル処理)
- No.9(O₂+N₂プラズマ)

UV 光は前述合成石英ランプを使用 (波長 184.9nm+253.7nm)
プラズマガスの照射条件は接合条件と同様

XPS 装置は PHI 社製 Quantum-2000 を使用した。

処理無しの No.1 については、FDTS 膜由来の CF₂-CF₂, CF₂-CH₂, -CHF-, CH₂-CF, C-CH 結合成分が認められた。

UV 光を照射すると時間とともに各結合が減少し、No.3 の 3min 以上の照射でほとんど無くなることが判った。

プラズマ照射ではガス種に関わらず、全ての処理で FDTS 膜がほとんど残っていないことが確認出来た。特に No.6 の O₂ プラズマ照射では C-CH 結合の低下が最も大きく、FDTS 膜の除去能力が高いことが判った。

次に、FDTS 膜を除去した後に接合可能か確認をした。図 V.2.4.3-3-6 に、FDTS 膜を UV 光、N₂、O₂ プラズマ照射で除去後、真空封止した場合の圧力変動結果を示す。ダイアフラムは先の実験と同様の SOI 構造を使用している。UV 光照射の場合はダイアフラム(SOI ウエハ)側はシーケンシャルプラズマを照射して接合している。FDTS 膜に N₂、O₂ プラズマを照射した場合は、ダイアフラム側は同種のプラズマガス種(N₂、O₂)で表面活性化をしている。

図 V.2.4.3-3-6 より圧力変動はほとんどなく十分な気密封止が達成出来ていることが判る。したがって、FDTS 膜を成膜し、UV 光やプラズマを照射することで FDTS 膜を除去することが可能となることが判った。

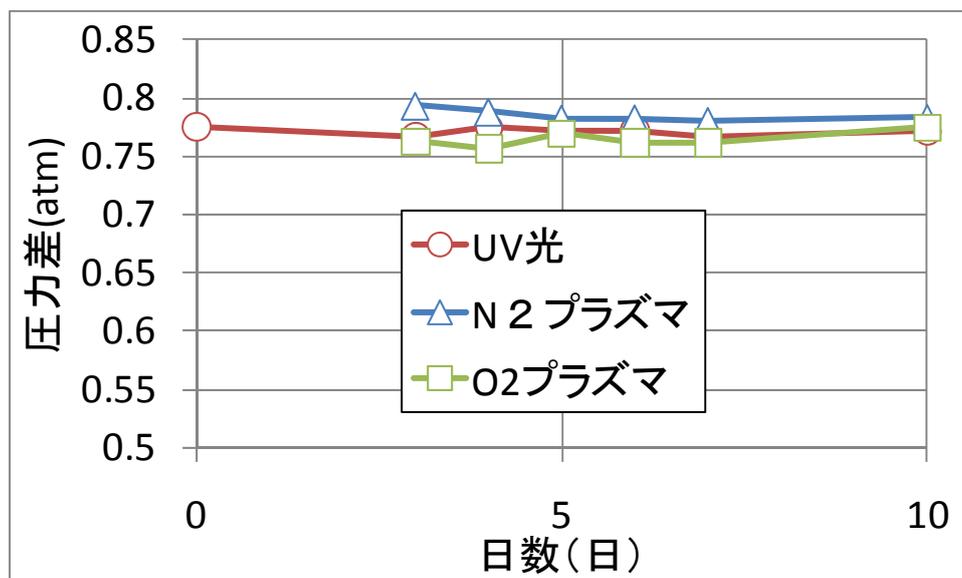


図 V.2.4.3-3-6 真空封止後の圧力変動

図 V.2.4.3-3-7 にシリコンチップをステンシルマスクとした場合のパターニング結果を示す。FDTS 膜を成膜したウエハ上に 1～10mm 角のシリコンチップを配置し、(a)UV 光 5min、(b)N₂ プラズマ、(c)O₂ プラズマを照射した。

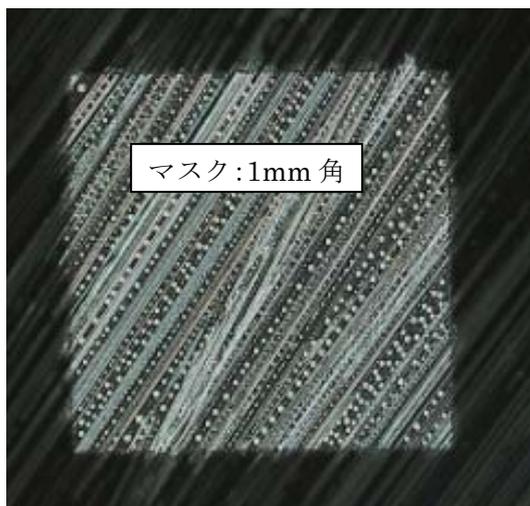
(a)UV 光照射の場合、パターン形状がはっきり観察できるが、斜線も観察された。このことより、パターニングは可能であるが、FDTS 膜の除去能力が低いことと、僅かではあるが裏面に回り込んで FDTS 膜を損傷するものと考えられる。

(b)N₂ プラズマ照射の場合、ほぼ回り込みが無く、パターニングが可能であることを確認した。Ar プラズマでも同様の結果を得た。

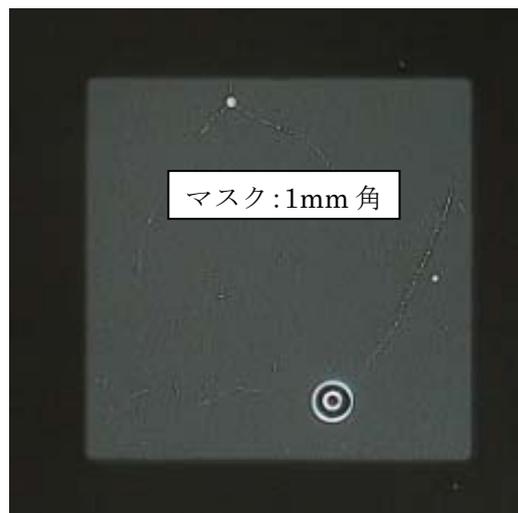
(c)O₂ プラズマ照射の場合、回り込みが大きく、3mm 角チップをステンシルマスクとしても、FDTS 膜の領域が 1mm 角程度まで小さくなるが判った。シーケンシャル、O₂+N₂ プラズマでも同様の結果を得た。

このことから、以下のことが考察される。

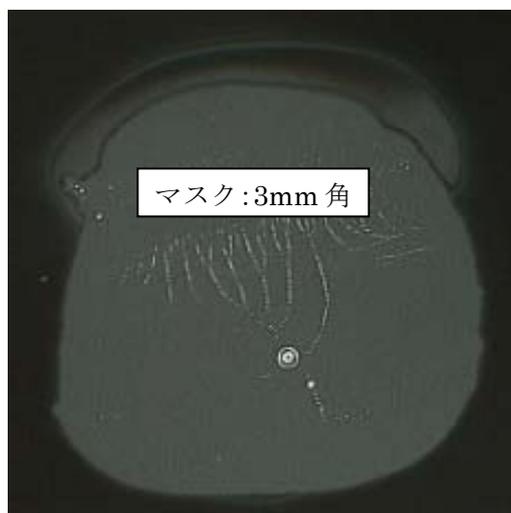
- ・オゾンは吸着してさらに UV 光が照射されることで、初めて除去能力が生じる。
- ・N₂、Ar プラズマではイオンの衝撃効果によって膜が除去される。
- ・O₂ プラズマで発生するオゾン等の活性種には、FDTS 膜を除去する効果がある。



(a)UV 光



(b)N2 プラズマ



(c)O2 プラズマ

図V.2.4.3-3-7 ステンシルマスク保護での FDTS 膜除去

(4) まとめ

以上の研究開発によって、次のことが判明した。

- 1) 表面粗さや接合パターンを制御することで、一括集積化のためにキャリアウエハへの仮接合の接合強度を、正規の接合強度の 1/10 以下に安定して制御することが可能となることが判った。
- 2) 接合強度は接合パターンの外枠の影響が大きいことが判った。
- 3) SAM 膜(FDTS 膜)は UV 光、プラズマ照射で除去可能であり、除去後の接合で十分な気密封止が得られることが判った。
- 4) FDTS 膜のパターニングは N2、Ar プラズマが最良である。UV 光では除去が不十分

であることと裏面への多少の回り込み、O₂プラズマはFDTS膜の除去能力は大きい、回り込み量が多いことが判った。

本研究開発の結果から、表面粗さや接合パターンを制御して接合することで、一括集積化技術を実現するための接合が可能であることが判った。本技術を発展させることで、ウエハサイズ、チップサイズに制限されることのない、様々な異種デバイスの集積化を実現することが可能となる。

(5) 参考文献

- 1) “Thermal stability of self-assembled octadecyltrichlorosilane monolayers on planar and curved silica surfaces”, S. A. Kulkarni, et. al., Thin Solid Films, 496(2006), 420
- 2) “Wafer 接合の技術動向”、高木秀樹他、産業技術総合研究所
- 3) “Sequential Plasma Activated Process for Silicon Direct Bonding”, M. M. R. Howlader, T. Suga, H. Itoh, M. J. Kim, ECS Transactions, 3 (6) 191-202 (2006)
- 4) “Double-Cantilever Cleavage Mode of Crack Propagation”, P. P. Gillis and J. J. Gilman, J. Appl. Phys. 35, 647 (1964).

． 2. 5 スマートファブシステム技術開発

(1) 背景・目的

環境負荷の低減は持続可能な文明の実現へ向けた地球規模の課題であり、特に近年、地球温暖化への対応として、温室効果ガスの削減の必要性が強調されてきている。温室効果ガスには、二酸化炭素、メタン、六フッ化硫黄等の様々な化学種が存在するが、最新の IPCC 第 4 次評価報告書によれば、人為的に排出されている温室効果ガスの中では二酸化炭素の影響量が最も大きいと見積もられている。

産業界においては、エネルギー供給産業や輸送産業をはじめとし食品加工業や機器製造業など、温室効果ガスの削減に向けた取り組みが近年盛んになってきている。このような取り組みの中では、ライフサイクルアセスメント (LCA) の概念が導入され、製品の製造、輸送、販売、使用、廃棄、再利用までの各段階における環境負荷を明らかにすることで低炭素社会の実現を目指す取り組みが活発化しつつある。LCA の概念に基き二酸化炭素の排出量を表示することで環境負荷の低い製品・サービスを消費者に対して訴求する仕組みである「カーボンフットプリント」は、英国をはじめとする欧州、米国、韓国、タイなど世界中に広がっており、我が国においても経済産業省により「カーボンフットプリント制度試行事業」が実施されている。

このような社会的状況の中で、末端消費者・最終組み立てメーカー一体となった社会的な要請により、MEMS 製品についても環境負荷の低い製品へのニーズが生じてくることが想定され、MEMS 製品での環境負荷の低減が課題になっている。

MEMS に先駆けて一大産業となった半導体産業における環境負荷の低減は、「高環境負荷プロセスガスの排出量低減」と「製造工場（製造工程）のスマート化」といった方策で取り組まれている。前者は、半導体加工で用いられる CF_4 、 C_2F_6 、 C_3F_8 、 C_4F_8 、 CHF_3 、 SF_6 、 NF_3 等の排出量を減らすという取り組みであり、使用量自体の削減・代替ガス利用というアプローチがとられている。後者の「製造工場（製造工程）のスマート化」に関しては萌芽期にあり、センサーネットワークを活用した工場全体の空調や清浄度管理の最適化や印刷技術を用いた新たな製造工程の構築といったアプローチが検討され始めている状況である。

製造工場（製造工程）のスマート化では、まず、工場全体の稼働に関わる情報や、製造された製品品質に関する情報、製造装置の稼働状況に関する情報、および、これらを元に得られる環境負荷情報を収集することが必要である。環境負荷の低減のためには、さらに、このようにして収集した情報を如何に環境負荷低減へと結びつけるかが重要である。

本研究開発では、上記の観点に立ち、設計から実際の製品へと至る流れにおいて、開発・製造の効率化と製品の歩留まりの向上に資する計測データの設計へのフィードバックに関する技術と、環境情報も含め製造工程に関する情報を共有化し設計へのフィードバックを可能にするデータベースシステムの設計・プロトタイプ開発を行った（3次元設計・計測情報の共有化技術の開発）。また、製造時において、環境負荷の高い装置・工程・項目の分析を可能とする二酸化炭素排出量の算定手法、および、算定のための情報共有化についての技術開発を行った（環境情報共有化技術の開発）。

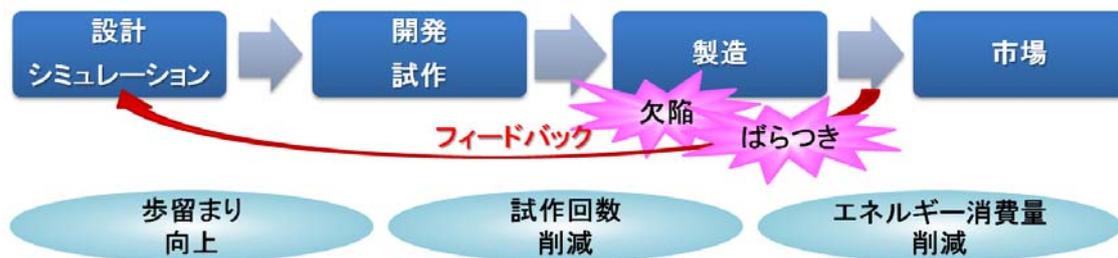
3次元設計・計測情報の共有化技術の開発では、X線CT装置による形状データや機械特性・電気特性の計測データから、デバイス設計・プロセス設計改善の示唆を可能にするための技術開発を行った。MEMS製品では作製されたデバイスの形状が、機械特性・電気特性に大きく影響を与えることから、製品性能のばらつき低減や歩留まりの向上のため、設計に対してよりの確な指針を与えることが必要になっている。このため、X線CT装置での測定条件、形状データの変換手法の検討や、形状データ・特性データに基づくモデリング手法の検討を行った。併せて、これらの情報共有のためのデータベースシステムの設計・プロトタイプ開発を行った。

環境情報共有化技術の開発では、プロジェクトにて構築される製造ラインにて製造される製品の二酸化炭素排出量の算定方法を開発した。MEMSに関連の深い半導体製造業界では、大規模な調査に基づき半導体パッケージの足型とピンの数から環境負荷を推定するツールが作られる¹など、LCAの実績と知見の集約が進みつつある。しかしながら、MEMSが半導体電子デバイス以上に多種多様なデバイス構造や製造工程を有すること一因があると考えられ、MEMSの製造工程ではLCAの実施が進んでおらず、個々の製品に対するLCAの実施例は見られない。低環境負荷製品を実現するためには環境負荷の算定が不可欠であることから、算定方法を早期に確立することが必要になっている。

¹ 半導体専用 LCA 算出ツール JLCAS 社団法人電子情報技術産業協会 半導体部会
半導体環境安全専門委員会

(2) 3次元設計・計測情報の共有化技術の開発

本研究開発項目は、MEMS製品の設計、開発、製造のフローにおける情報の共有を推進し、開発や製造の効率化・歩留まりの向上を通して、環境負荷の低減に貢献することを目的としている。この目的に即し、MEMS製品の製造時のレシピや稼働状況、形状・特性の計測データを効果的に設計へとフィードバックするフローの構築のための開発を行った（図V.2.5.2-1）。



図V.2.5.2-1 情報共有化による設計へのフィードバックフローの構築

この目的の実現のため、情報共有のための3次元構造計測技術・計測情報変換技術の開発と、MEMS統合設計データベースシステムの基盤構築を行った。

情報共有のための3次元構造計測技術・計測情報変換技術の開発では、X線CT装置計測によるMEMSの3次元構造の取得、および、計測された3次元構造情報や機械特性・電気特性を設計に活用に関するための研究開発を行った。

MEMS統合設計データベースシステムの基盤構築では、情報共有のためのインフラストラクチャとしてのデータベースシステムの設計・プロトタイプ作成を行うとともに、設計データ、装置のレシピおよび稼働に関するデータ、計測・検査データを共有し、設計時での活用を可能とする情報共有化フレームワークの要求仕様を策定した。

(2) -1 情報共有化のための3次元構造計測技術・計測情報変換技術

MEMS は、半導体プロセスと同様なプロセスで作製されるが、通常の半導体デバイスとは異なり、製造時の形状のばらつきがデバイス特性のばらつきに直結する。歩留まりの向上やデバイス特性の均質化のためには、シリコン基板上に作製された μm サイズのデバイスの形状を観察し、製造プロセスの改善を行う必要がある。このデバイス製造プロセスの改善に向け、X線CT装置を用いシリコン基板上に作製されたデバイスの3次元形状を計測し、設計時とのデバイス特性の差異を解析するための方法について検討を行った。

MEMS センサでは、可動部に印加された力を、構造体の歪みや固定電極との相対位置の変化による静電容量の変化等により検出する。そのため、可動部および周囲の形状・サイズがデバイスの検出・出力特性に大きく寄与する。設計時にはシミュレーションを用い、所望のデバイス特性を満足するように構造体形状の設計が行われる。

MEMS 製造においては、半導体デバイスと同様な微細加工プロセスが使用される。工程は複雑な半導体デバイスには及ばないが、数十を越える工程によって製造が行われる。一方で、半導体デバイスにはない可動部を構築するためのプロセスを有することを特徴とする。実際のデバイス形状を設計形状に近づけるため、様々なプロセスの組み合わせと条件設定が必要になっている。

このように MEMS では意図した動作特性の実現のため、構造設計と併せ製造プロセスの設計も重要であるが、作製されたデバイスの動作特性の評価のみから直接プロセス改善への示唆を得ることは困難である。しかしながら、計測により3次元構造が得られ設計データと比較可能なデータとして利用できれば、設計との形状の差異がどこに生じているのか、形状の差異がどのような動作特性の差異に関連するのかを把握することができる。また、形状が直接利用できない場合でも3次元形状を反映したデバイスのモデル化によって形状と動作特性の関連を把握することで、計測した機械特性・電気特性と設計時に意図した機械特性・電気特性との差異の原因を推測することができる。

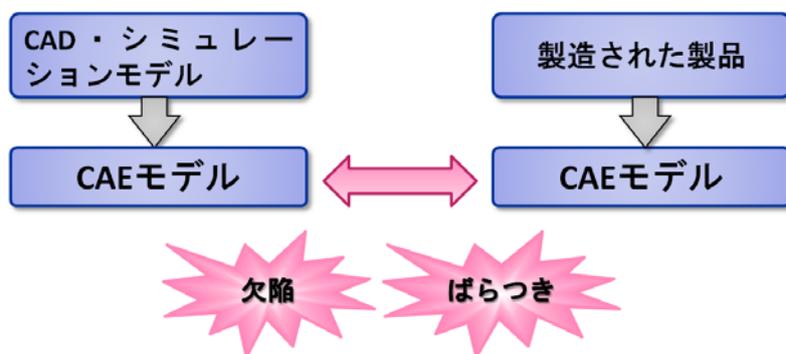


図 V.2.5.2-2 設計データ (CAD・シミュレーションモデル) と計測データ (製品) の比較

このようなリバースエンジニアリングやモデル化（図V.2.5.2-2）を通して、デバイス形状や製造プロセス設計での指針を与えることが可能になると期待される。

本研究開発項目では、上述の狙いの実現に向け、MEMS に対して X 線 CT 装置による 3 次元構造計測、および、設計時の形状や力学特性との比較を可能とする計測構造データの変換技術について開発を行った。同時に、機械特性・電気特性計測データを用いて設計への示唆を与えることを可能にするデバイスのモデル化法について検討を行った。

（2）-1.1 X 線 CT 装置によるマイクロスケール構造体の 3 次元形状評価

X 線 CT 装置による機械部品の 3 次元構造計測は、これまでに多数行われてきているが、MEMS についてはほとんど行われていない。特に、構造物全体が μm サイズであるものについては、研究実施例が見当たらない。

このような微小な構造を計測するため、図V.2.5.2-3に示すX線CT装置 (MicroXCT-400、Xradia) を使用した。この装置の最大分解能は $1.0\ \mu\text{m}$ であり、このときの視野は $700\ \mu\text{m}$ 程度である（対物レンズ 40X 使用時）。

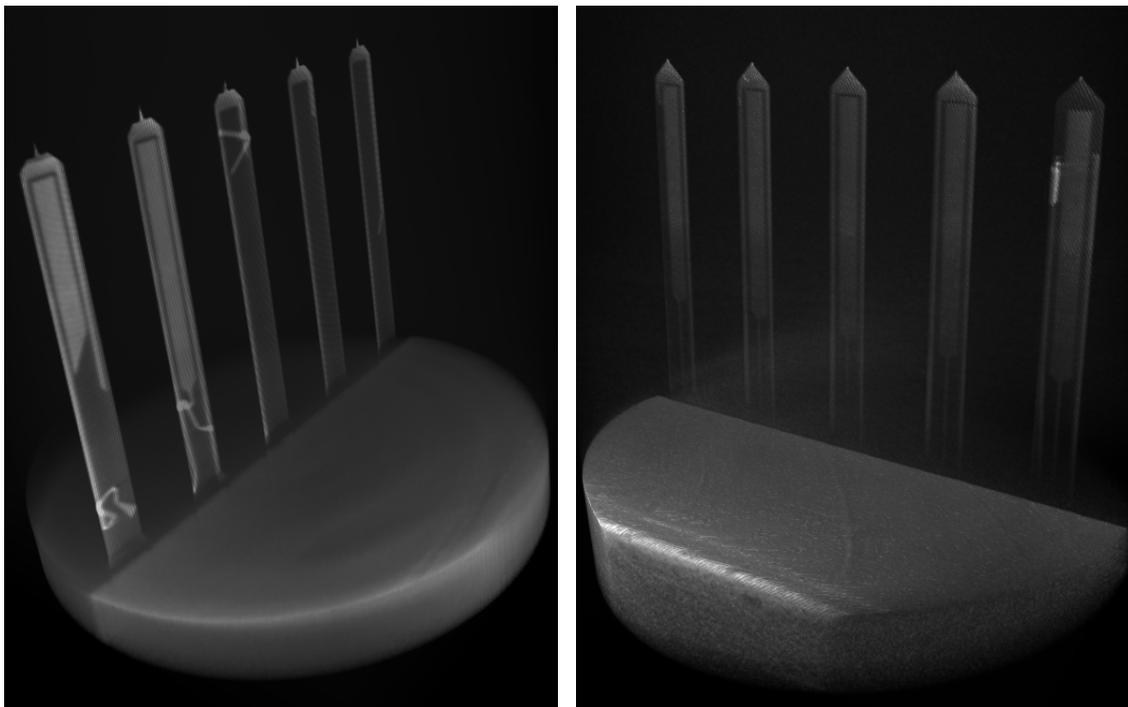


図V.2.5.2-3 MicroXCT-400 外観

シリコンは通常の金属と比較して X 線が透過しやすいため、空気とのコントラストを得るため、管電圧、管電流、撮像枚数、1 枚あたり露光時間などの検討を行い、撮像条件を決定した。

TKB812 で試作されたマルチプローブについて、対物レンズ 20X を用いて X 線 CT 計測を

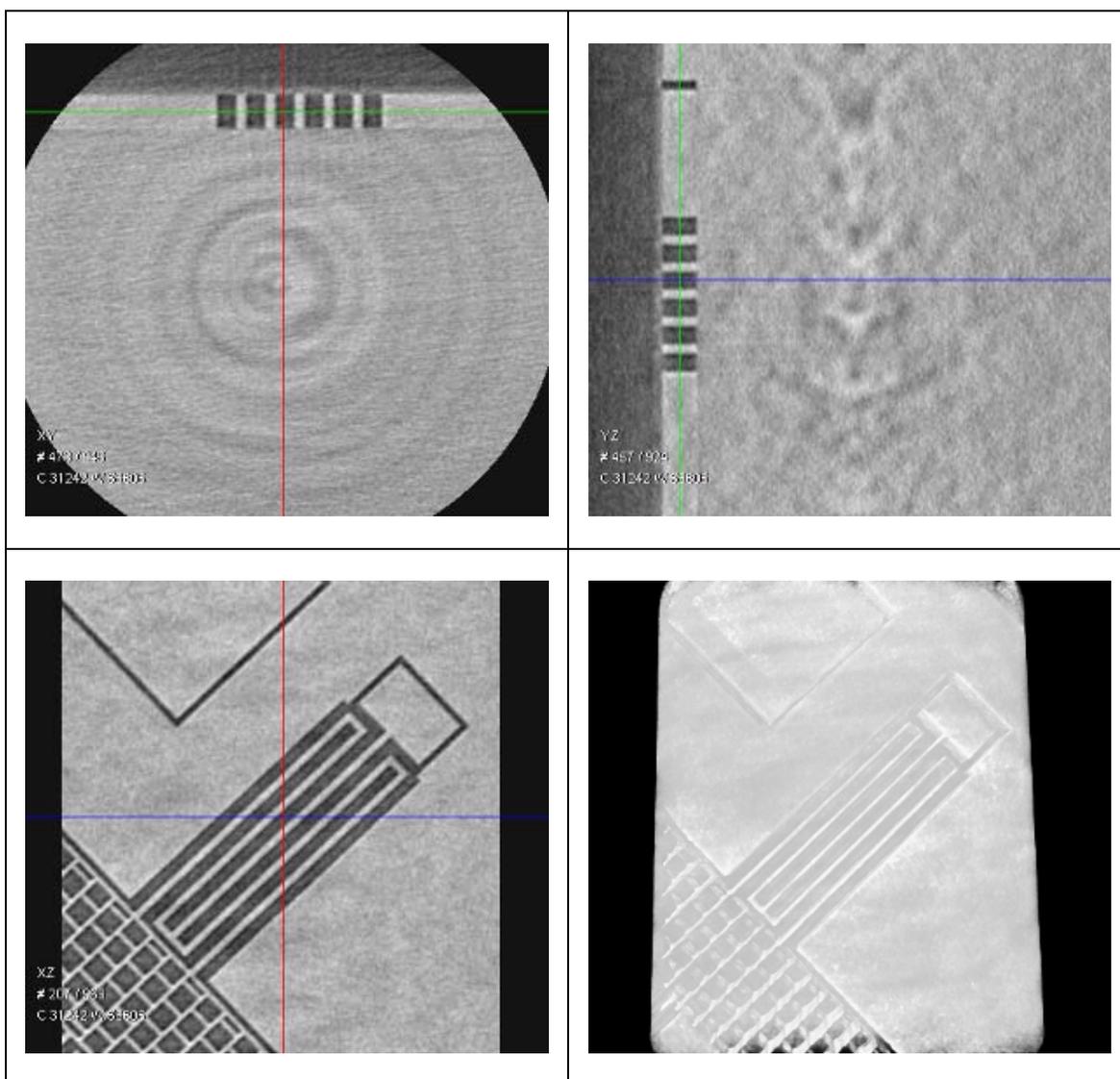
行い、透過画像から3次元に再構成した画像を図V.2.5.2-4に示す。マルチプローブは、シリコン基板のエッジに形成された長さ $500\mu\text{m}$ ・幅 $80\mu\text{m}$ の薄い板状のプローブであり、表面に電極が作製されている。図V.2.5.2-4では、先端の細かい形状の違いや電極が剥離している状況を捉えることができる。



図V.2.5.2-4 マルチプローブ：先端形状鋭角（左）、直角（右）

同様にTKB812で試作された櫛歯折り返し梁について、MicroXCT-400の最高倍率となる対物レンズ40Xを用いてX線CT計測を行い、透過画像から3次元に再構成した画像を図

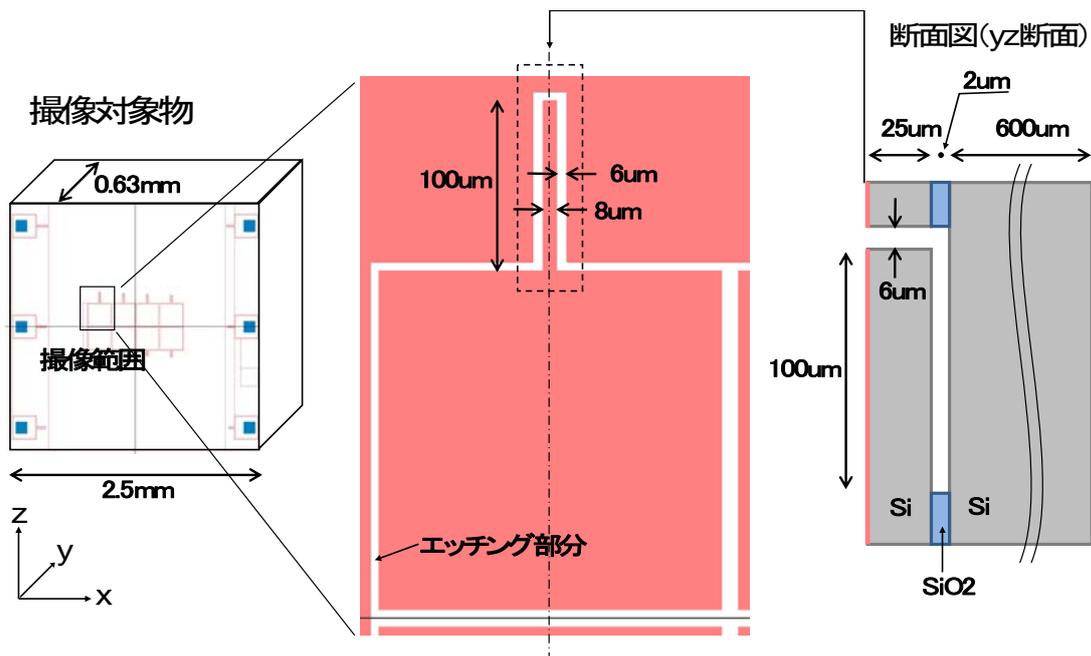
.2.5.2-5に示す。櫛歯折り返し梁は 2cm 角のチップ上に作製されており、梁の大きさは長手方向が約 $220\mu\text{m}$ 、幅は $5\mu\text{m}$ 、周囲に掘ったトレンチの幅は $10\mu\text{m}$ 、深さは $25\mu\text{m}$ である（埋め込み酸化膜は除去されていない）。リングアーチファクトや斑模様のアーチファクトが見られるが、構造物の細部の形状を捉えることができる。



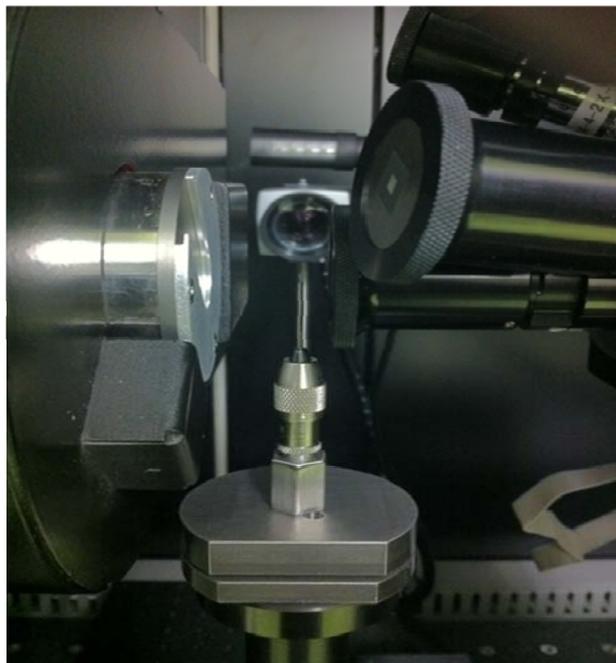
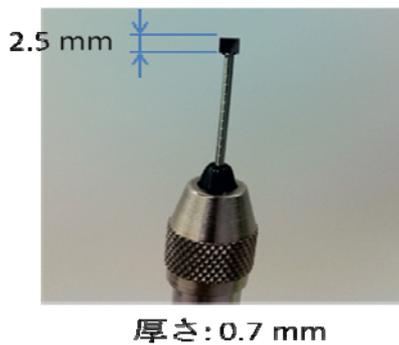
図V.2.5.2-5 櫛歯折り返し梁（上段：基板厚さ方向断面、下段左：基板表面に平行な断面、下段右：3次元像）

更に小さい長さ $100\ \mu\text{m}$ のカンチレバー（片持ち梁）についてもX線CT計測を行った。撮像の対象は、図V.2.5.2-6に示すシリコンをベースとするチップである。埋め込み酸化膜が除去され可動な構造物としてカンチレバー（片持ち梁）が形成されている。

実際の撮影では、撮影対象をX線源-検出器の間に配置し、撮像範囲中心部分を通りz軸にほぼ平行な直線を回転軸として回転させて、断層撮影を行った（図V.2.5.2-7）。撮像条件は、管電圧 40kV 、管電流 $4\ \mu\text{A}$ 、対物レンズ $40\times$ 、回転角 $-91^\circ \sim 91^\circ$ 、撮像枚数 1639 枚、1枚あたり露光時間 60 秒である。



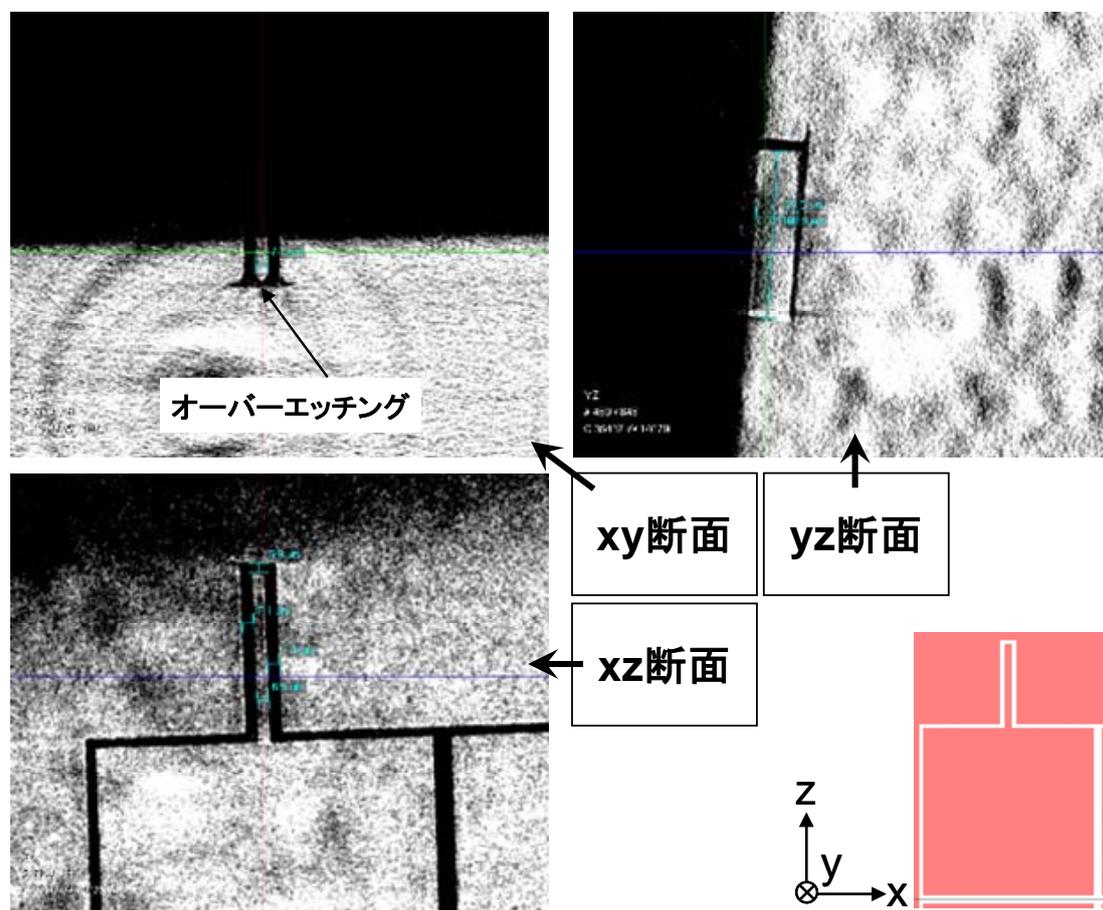
図V.2.5.2-6 カンチレバーと撮像対象物



図V.2.5.2-7 カンチレバーのX線CT計測状況

撮影の結果得られた透過像から再構成フィルタをかけて再構成した断層画像を図 .2.5.2- 8に示す。シリコンと空気とのコントラストはつきづらいため、図ではコントラストを際立たせるように処理を行っている。画像から、エッチングされたパターンの形状はうまく再現されていることがわかる。また、基板内部の埋め込み酸化膜 (SiO₂) がエッチ

リングにより除去されている様子や、埋め込み酸化膜近傍のシリコンの形状がオーバーエッチングによって角が取れている様子も把握できる。一方で、構造のないバルクシリコン部において、リングアーチファクトやまだら模様などのアーチファクトが見られる。



図V.2.5.2- 8 カンチレバー再構成断面

(2) -1.2 X線 CT装置撮像データの設計へのフィードバック

設計データとの形状・力学特性比較

X線CT装置計測によって得られたカンチレバーの3次元画像データ(図V.2.5.2- 8)からデータ変換を行い、設計データとの形状や力学特性の差異を評価した。

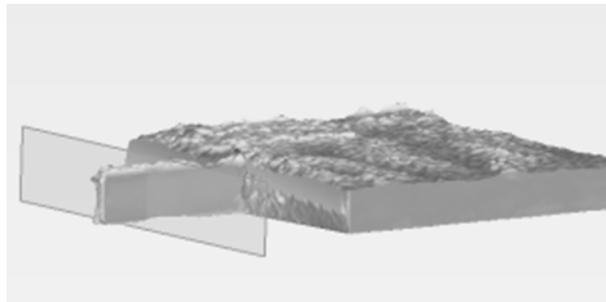
データ変換手法の検討

計測によって得られたデータは、Siと空気とのコントラストがつかづらいことの反映として、かなり間隙の多いデータとなっている。そのため、まず3次元画像データに対してメディアンフィルタ・ガウスフィルタをかけて平滑化を行い、続けて、Marching Cubes法によってポリゴンデータへ変換した。このポリゴンデータを以下に述べる評価の出発点と

して使用した。

形状比較

リバースエンジニアリング用のソフトウェアPointMaster (Wenzel ScanTec. 販売：日本ビジュアルサイエンス株式会社) によって、ポリゴンデータを読み込み、修正を施した後、設計データと比較した (図V.2.5.2-9)。計測によるポリゴンデータでは、表面にかなりの凹凸が見られるが、これらはアーチファクトによるものと思われる。また、カンチレバーの断面では、カンチレバーの横幅が細くなっている様子が見られる。また、上下方向にはサイズが大きくなっている。詳細な形状については、アーチファクトの影響が大きく実際の形状を反映していないと思われる。



図V.2.5.2-9 計測・設計データの形状比較

力学特性の比較

CAE解析用の構造データ処理ソフトウェア TSV-Pre (株式会社テクノスター) を用い、ポリゴンデータから4面体要素により構造体を充填するボリウムメッシュを生成した。生成したボリウムメッシュを使用して、MEMS設計開発用統合システムである MemsONE (MemsONE コンソーシアム、みずほ情報総研株式会社、日本ユニシス・エクセリションズ株式会社、株式会社数理システム) により構造解析を行った。

計測および設計データに基づくカンチレバーのモデルについて、振動モードを解析した結果の比較を図V.2.5.2-10に示す。1次モードと2次モードは似通っている。しかし、3次モードでは違いが見られ、計測によるモデルではカンチレバーのねじれが見られるのに対して、設計データからのモデルでは横方向の振動の高次モードとなっている。

それぞれの振動モードの固有振動数を表V.2.5.2-1に示した。

振動の様子が計測・設計モデルで似ている1次モードの固有振動数は、計測・設計モデルで同程度である。一方、同様に振動の様子が似ている2次モードでは、差異が大きくなっている。振動の様子が異なる3次モードでは、設計モデルの2倍となっている。

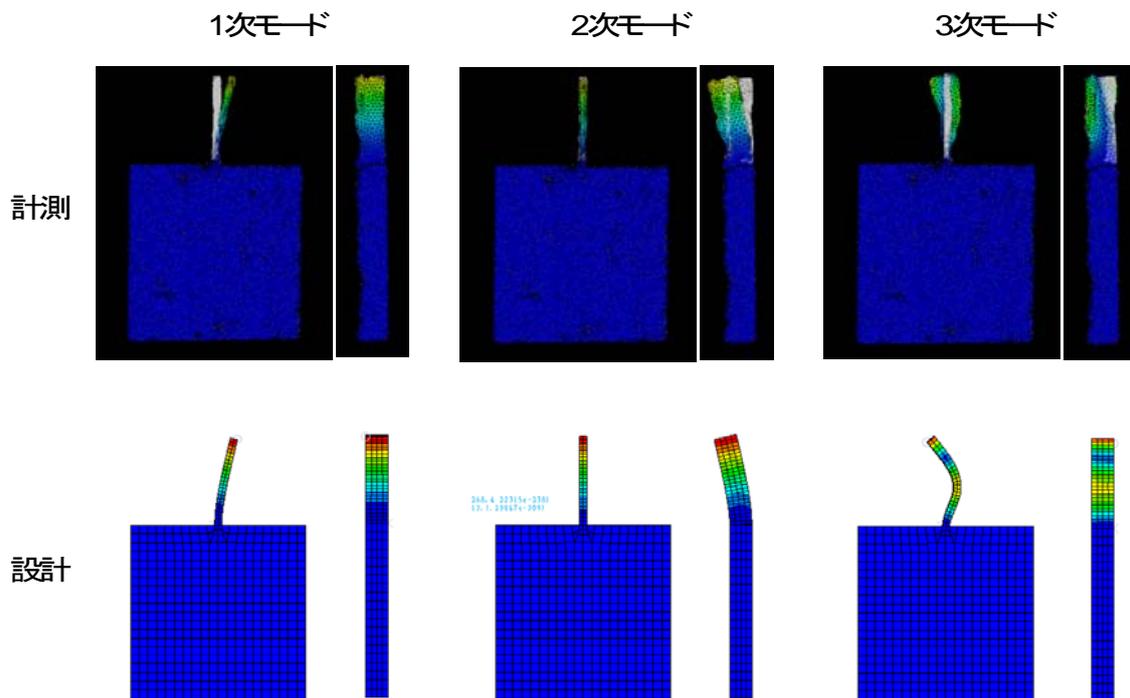


図 V.2.5.2- 10 計測・設計構造モデルの振動モードの比較

表 V.2.5.2- 1 計測・設計構造モデルの固有振動数[MHz]の比較

モデル	モード		
	1次	2次	3次
計測	1.174	4.043	6.832
設計	1.044	2.991	3.343

デバイス・プロセス設計への示唆

構造データにはアーチファクトの影響による構造の不確定性が見られるが、得られたデータが実際の構造をそのまま反映していると仮定すると、製造プロセスに対して次のような示唆が得られる。

振動モードの固有振動数に関する設計モデルとの差異は、カンチレバーの形状が異なることによる質量・ばね定数が変化に起因すると考えられる。再構成断面形状からオーバーエッチングである状況もみられるため、エッチング条件の検討によりオーバーエッチングを回避する必要があることが示唆される。また、デバイスの可動部を構成しているシリコンの厚さの精度や酸化膜の除去の程度にも注意を払う必要があるといえる。

(2) -1.3 電気特性、機械特性データの設計へのフィードバック

MEMS 製造プロセスによって作製されるデバイス構造体の形状は、マスク形状を正確に再現するものにはならない。このため、電気的特性や機械的特性は、マスク形状を仮定した場合に予測される値と、実測される値とは異なる。実測される電気特性や機械特性と、マスク形状を仮定し予測される特性とを比較することにより得られる知見を、設計へフィードバックする方法について検討を行った。

特性評価の対象としたデバイスは、櫛歯の電極を持つ静電容量型の加速度センサを模したものである。可動電極は 4 本の梁で支持されており、2 つの固定電極と対向する。マスク形状と主な寸法を図 V.2.5.2- 11、表 V.2.5.2- 2 に示す。評価対象デバイスを電氣的に駆動し、その電気特性として電流の周波数特性、機械特性として速度の周波数特性を評価した。

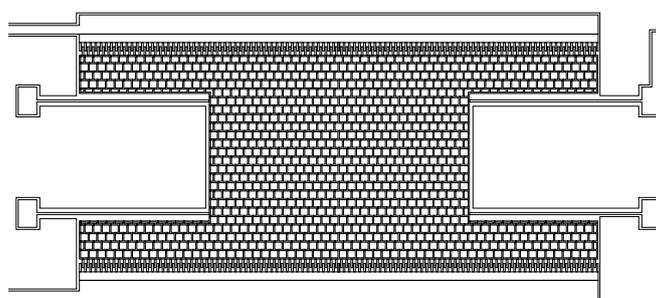
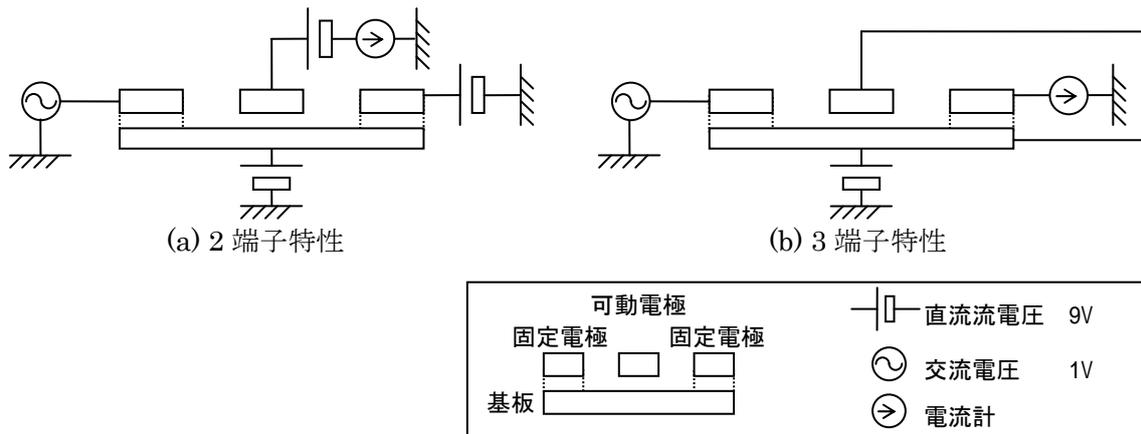


図 V.2.5.2- 11 特性評価デバイスマスク形状

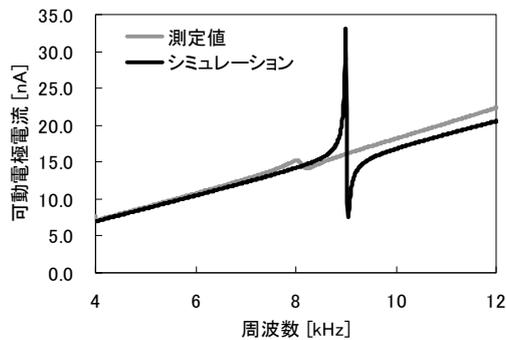
表 V.2.5.2- 2 特性評価デバイスマスク寸法

電極長さ L_m	1204 μm
電極幅 W_m	480 μm
格子穴長 L_{grid}	17 μm
格子幅 $L_{lattice}$	3 μm
櫛歯長さ L_c	20 μm
櫛歯幅 W_c	4 μm
櫛歯対向長さ X_0	10 μm
対向櫛歯間隔 Gap	2 μm
梁長さ L_{beam}	400 μm
梁幅 W_{beam}	5 μm

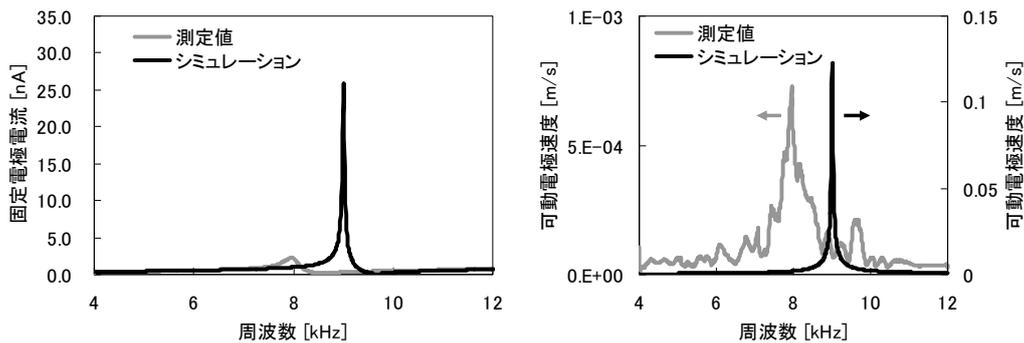
特性測定時の端子設定を図 V.2.5.2- 12 に示す。(a)2 端子特性の測定では、可動電極の電流を測定した。(b)3 端子特性の測定では、固定電極の電流と可動電極の速度を測定した。それぞれの値の周波数特性を図 V.2.5.2- 13 および図 V.2.5.2- 14 に示す。併せて、デバイス形状がマスク形状の通りである場合を仮定し、特性シミュレーションした結果を示す。



図V.2.5.2- 12 測定時端子設定



図V.2.5.2- 13 2端子特性可動電極電流



図V.2.5.2- 14 3端子特性 (左)固定電極電流 (右)可動電極速度

可動部の運動に伴う雰囲気流体の挙動は非常に複雑であり、特性シミュレーション時に機械的な抵抗を精度よく見積もることは非常に困難である。したがって、機械的な抵抗に大きく影響を受ける電流や速度のピーク値を比較することは難しい。一方、ピークとなる周波数（以降、共振周波数と呼ぶ）は機械的な抵抗の影響をほとんど影響受けないので、

ここでは、共振周波数の比較を行った(表V.2.5.2- 3)。シミュレーション値の方が実測値に比べ高い共振周波数になっている。これは、実形状が設計時のマスク形状とは異なることに起因する。

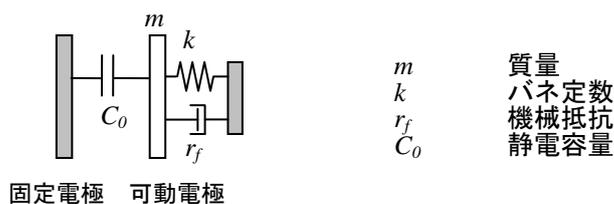
表V.2.5.2- 3 実測とマスク形状モデル特性シミュレーション共振周波数

使用特性カーブ	実測値	シミュレーション
2 端子特性可動電極電流	8010 Hz	8997 Hz
3 端子特性固定電極電流	7970 Hz	9005 Hz
3 端子特性可動電極速度	7950 Hz	9005 Hz

実形状とマスク形状との差をもう少し詳しく見るために、集中質点系モデルを用いて、デバイス形状の見積もりを行った。対象デバイスの集中質点系近似モデルを図V.2.5.2- 15に示す。

マスク形状の集中質点系モデルのパラメータは、構造体の厚さ、密度、ヤング率等の基本的な物性値から解析的に算出した。実形状の集中質点系モデルパラメータは、集中質点系モデルで解析的に得られる特性カーブを目的関数とし、SEMで得られた測長値を制約条件として、最適化手法によって算出した。算出結果を表V.2.5.2- 4に示す。

実形状として推定される、質量、バネ定数ともにマスク形状よりも小さい値である。実形状は、マスク形状よりも「細った」形状であることが考えられる。さらに、実形状として推定されるパラメータ値とマスク形状モデルパラメータ値の差異は、バネ定数をもっとも大きい。よって、表V.2.5.2- 3に示す共振周波数の差は、梁形状の「細り」による、バネ定数の変化が大きく影響していることがわかる。



図V.2.5.2- 15 集中質点系モデル

表V.2.5.2- 4 集中質点系モデルパラメータ

パラメータ	実形状	マスク形状	差異*
質量 kg	7.37e-9	7.98e-9	-7.64%
バネ定数 N/m	17.95	25.55	-29.75%
機械抵抗 N·s/m	1.57e-5	1.71e-5	-8.19%
静電容量 F	2.48e-13	2.64e-13	-6.09%

*差異(=実形状-マスク形状)/マスク形状)

集中質点系モデル近似は、設計時における特性見積もりに広く用いられる方法であり、モデルパラメータと共振周波数等の特性値との関連が明確で扱いやすい。実測される電気特性および機械特性から実形状の集中質点系モデルパラメータという形で設計へフィードバックすることは、マスク形状との差異を把握するのに有益である。

(2) -1.4 まとめ・課題

MEMS の形状計測によりデバイス・プロセス設計への示唆を得るための手法の検討として、シリコンチップ表面に作製されたカンチレバーに対して X 線 CT 装置により 3 次元構造計測を行い、得られた構造から設計時の形状や力学特性の比較を行った。機械特性、電気特性の計測データと設計形状とを、集中質点系モデルを介在させて比較する手法を検討した。

3 次元構造計測による設計へのフィードバックについては、X 線 CT 装置計測、3 次元構造データの再構成、ポリゴンデータへの変換、設計および解析のためのデータ変換、形状・力学特性の比較、という一連の手続きについてひとつおりの検討を行い、デバイス・プロセス設計改善への指針を提示し得ることを示すことができた。X 線 CT 装置による計測では、かなりのアーチファクトの影響があり、計測からデータ変換の一連の手続きの中でこれらを克服する手法・手段の検討が課題である。

機械特性・電気特性計測による設計へのフィードバックについては、計測データからの集中質点系モデルのパラメータの推定により、設計へと効果的に示唆を与えることが可能となった。

(2) -2 MEMS 統合設計データベースシステムの基盤構築

本研究開発は、MEMS の設計に関わる様々なデータを共有し、デバイス設計、プロセス設計の効率化に寄与することを目的とする。特に、計測・検査データおよび環境負荷情報の共有化による有効活用を促し、製品のばらつきを抑え、歩留まりを向上させることで、環境負荷の低減に貢献することを目的としている。

MEMS 統合設計データベースシステムの基盤構築のため、データベースシステムに対する要求分析を行い、データベースシステムの設計として、ソフトウェアアーキテクチャ、ソフトウェア詳細、データベーステーブルを定めた。さらに、設計に基き MEMS 統合設計データベースシステムのプロトタイプを作成を行った。

併せて、設計データ、装置のレシピおよび稼動に関するデータ、計測・検査データを共有し、設計時での活用を可能とする情報共有化フレームワークの要求仕様を策定した。

(2) -2.1 要求分析

デバイス作製に対して、設計データ、工程フローは入力に相当し、評価データ、計測データ、出力に相当する。入力と出力間の関連をトレースできることは、設計データや工程フローの再利用を促し、開発効率の向上につながる。設計データ、工程フロー、計測データの関係性を含めて、MEMS 統合設計データベースシステムで共有できる必要がある。

また、材料物性は設計時に実施するシミュレーションにおいて基本となる値であり、設計時に参照できるよう共有化する必要がある。

さらに、製造プロセス開発時に環境負荷も考慮した製造プロセス選択を行えるように、環境負荷データを共有化する必要がある。

上述のように、設計時に必要となる情報を同一インターフェイスで参照できるシステムを構築することによって、設計効率の向上を目指す。

図 V.2.5.2- 16 に MEMS 統合設計データベースシステムの概要図を示す。

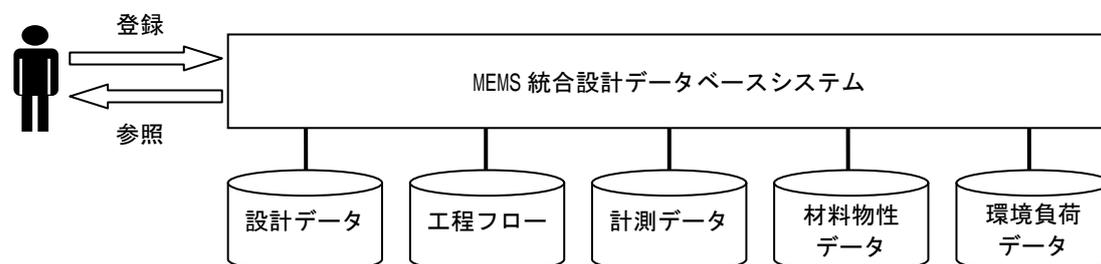


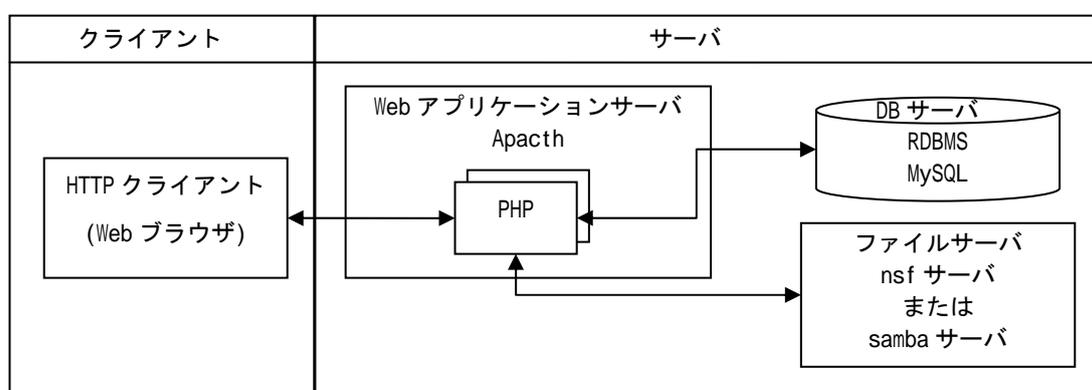
図 V.2.5.2- 16 MEMS 統合設計データベースシステム概要図

(2) -2.2 ソフトウェアアーキテクチャ

MEMS統合設計データベースシステムは、図V.2.5.2- 17のような構成とする。

- ユーザが接続する Web ページは PHP で作成する。
- ユーザが作成し、登録したデータの関連はデータベースへ蓄積される。
- ユーザが作成し、登録するファイルは、ファイルサーバへ格納する。

ファイルサーバのファイルを共有できるような環境にすると、MEMS 統合設計データベースシステムを物理的配置に制限なく構築することができる。



図V.2.5.2- 17 MEMS 統合設計データベースシステムソフトウェア全体構成図

(2) -2.3 ソフトウェア詳細設計

MEMS 統合設計データベースシステムは、設計データ、計測データ、シミュレーションデータ、工程フロー、材料物性、環境負荷情報の共有を目的としたデータベースシステムである。

MEMS統合設計データベースシステムは、次のデータベースから構成される (図V.2.5.2-18)。

- 設計・計測データベースシステム
- 材料物性データベースシステム
- 環境負荷情報データベースシステム
- CO2 換算量原単位データベースシステム

データベースシステムとユーザとの橋渡しを行うユーザインターフェイス機能を、データベースシステムごとに用意した。

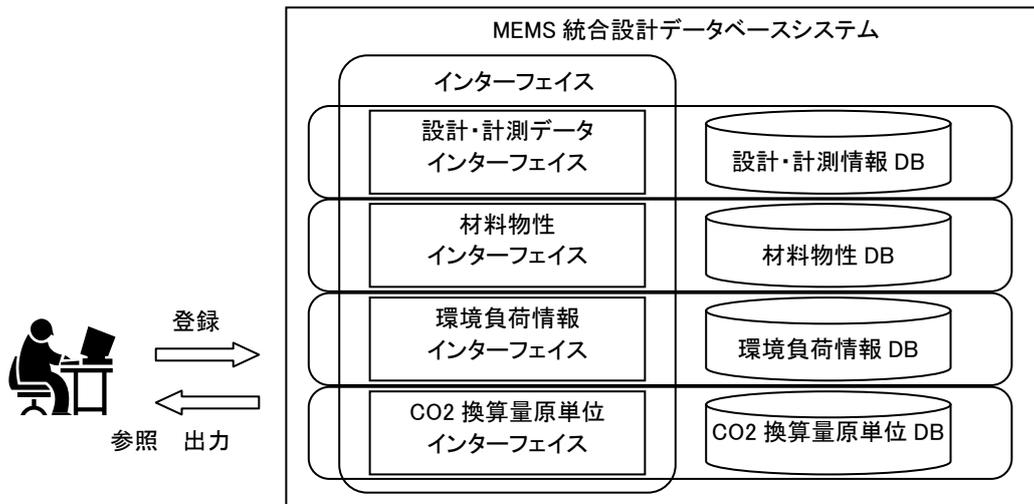


図 V.2.5.2- 18 MEMS 統合設計データベースシステム構成図

(2) -2.4 データベーステーブル

データベース構築のためデータモデリングを行った。データ間の関連を E-R 図 (Entity Relationship Diagram) を用いて示す。

E-R 図はデータの関連を図示したものである。データの実体 (Entity) と関連 (Relationship)、および属性 (Attribute) の 3 つを構成要素としてモデリングを行う手法である。

■ 設計・計測データベース、環境負荷情報データベース

設計・計測データベース、環境負荷情報データベースは、一部テーブルを共有している。E-R図を図 V.2.5.2- 19に示す。

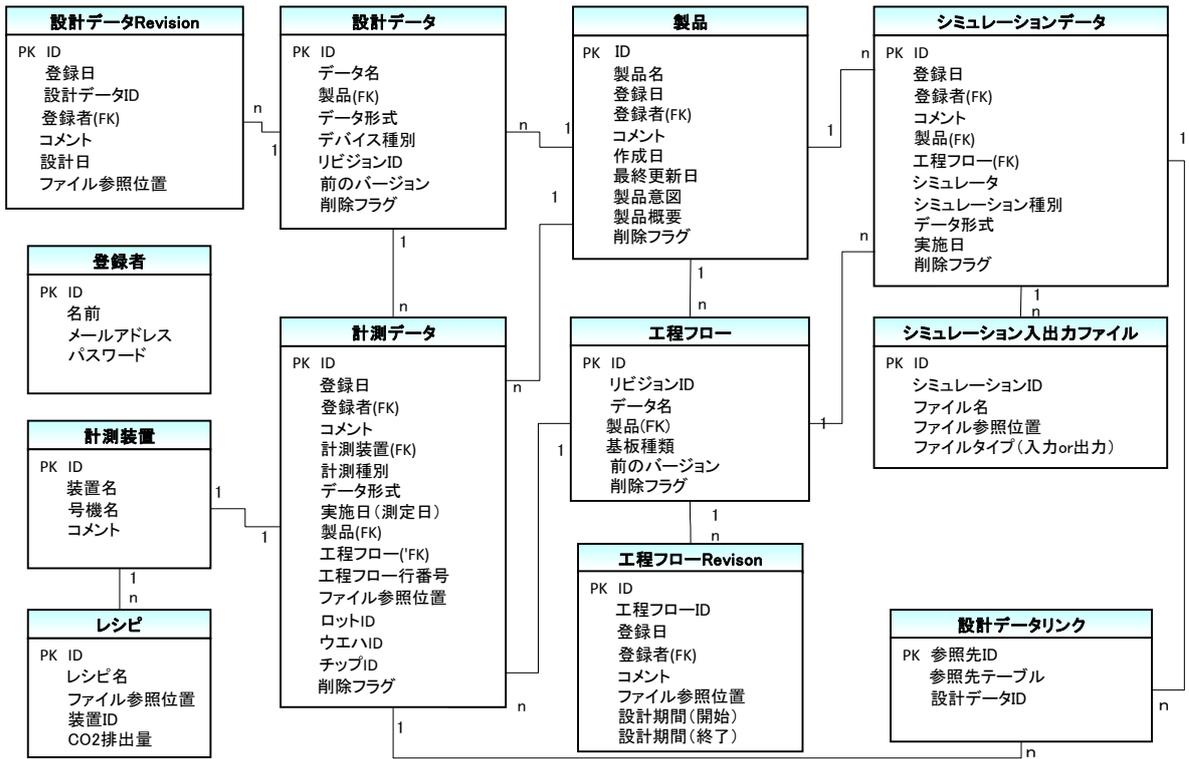


図 V.2.5.2- 19 設計・計測データベース E-R 図

■ 材料物性データベース

材料物性データベースに関するE-R図を図 V.2.5.2- 20に示す。

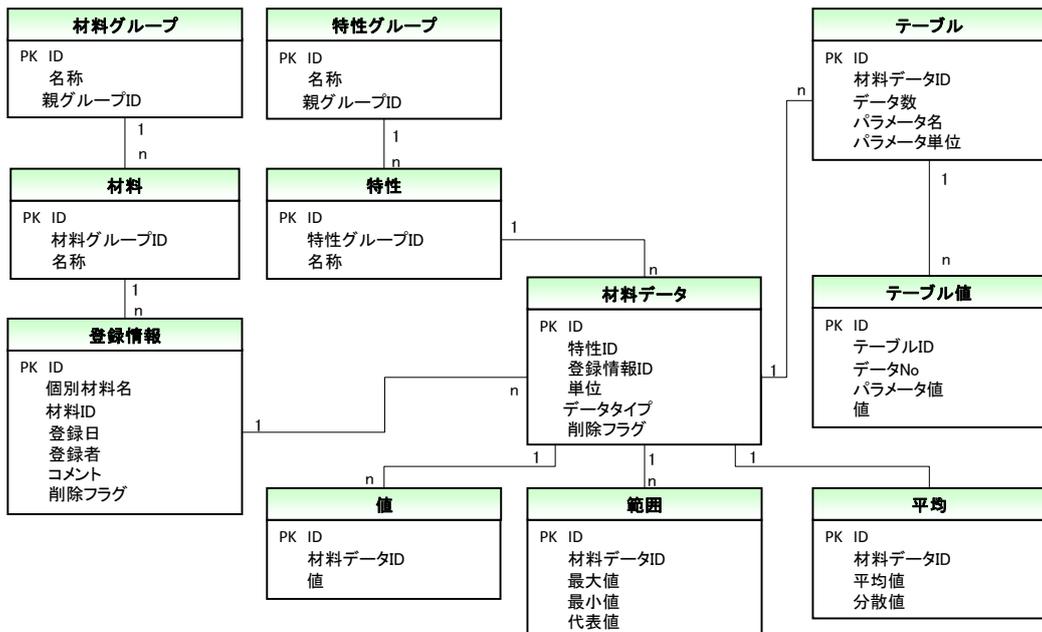


図 V.2.5.2- 20 材料物性データベース E-R 図

■ CO2 換算量原単位データベース

CO2 換算量原単位データベースでは、エンティティはただ一つのみである。E-R図を図 V.2.5.2- 21に示す。

原単位
PK ID
名称
大分類
小分類
単位
GHG排出量
出典
作成日
コメント

図 V.2.5.2- 21 CO2 換算量原単位データベース E-R 図

(2) -2.5 プロトタイプシステム作成

作成した MEMS 統合設計データベースシステムのプロトタイプでは、Web アプリケーションサーバ、DB サーバ、ファイルサーバを同一サーバに配置した。

使用したミドルウェア一覧を表 V.2.5.2- 5に示す。

表 V.2.5.2- 5 ミドルウェア一覧

ミドルウェア	バージョン	機能
Apache	2.0.52	<ul style="list-style-type: none"> ・アプリケーションサーバ ・プレゼンテーション基盤の WEB アプリケーションがデプロイされる ・サービスの WEB サービスがデプロイされる
MySQL	4.1.22	<ul style="list-style-type: none"> ・RDBMS (データベース)
Red Hat Enterprise Linux WS	release 4	<ul style="list-style-type: none"> ・サーバ機のオペレーティングソフトウェア
PHP	5.2.0	<ul style="list-style-type: none"> ・開発言語
Subversion	1.6.12	<ul style="list-style-type: none"> ・プレゼンテーション基盤、ワークフロー、サービスのプログラムリソースの管理ツール ・リソースのバージョン管理を行う
Windows XP	Version 2002 ServicePack3	<ul style="list-style-type: none"> ・クライアント機のオペレーティングソフトウェア
Internet Explorer	7.0 以上	<ul style="list-style-type: none"> ・Web ブラウザ

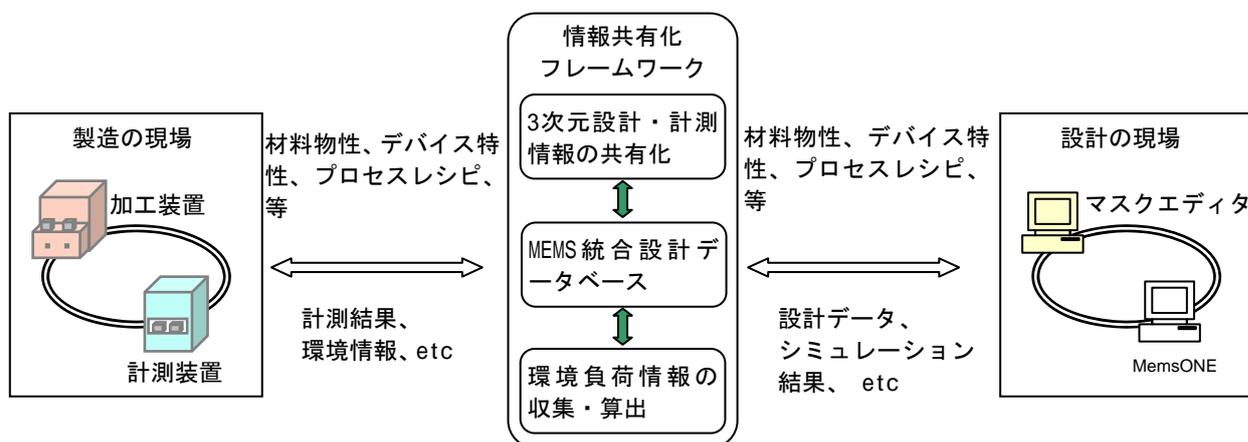
(2) -2.6 情報共有化フレームワークの要求仕様

設計データ、装置のレシピおよび稼動に関するデータ、計測・検査データを共有し、設計時での活用を可能とする情報共有化フレームワークについて検討を行い、検討の結果策定した要求仕様を以下に記載する。

(2) -2.6.1 前提条件

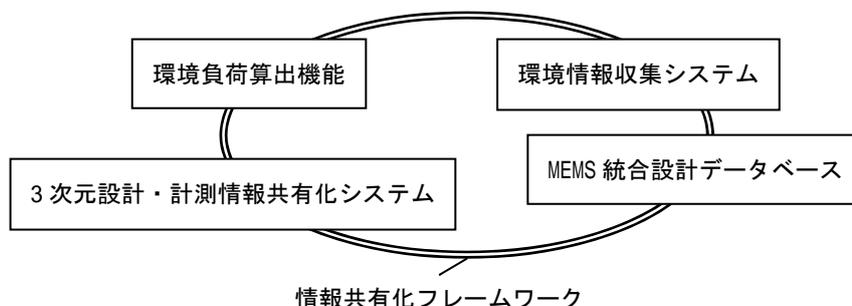
情報共有化フレームワークの概要図を図V.2.5.2- 22に示す。

設計時に生成される、構造設計データや、マスクデータ等を共有化すると共に、製造時に生成される、レシピや装置稼動に関するデータや、特性評価時に生成される計測データや検査データを共有する。製造時および評価時に生成されるデータを設計時に活用できるような枠組みである。



図V.2.5.2- 22 情報共有化フレームワーク概要図

情報共有化フレームワークでは、情報の内容に応じたサブシステムを定義しサブシステム間の連携を行う枠組みを提供する(図V.2.5.2- 23)。情報共有化フレームワーク上で動作させるサブシステムの一覧を表V.2.5.2- 6に示す。



図V.2.5.2- 23 情報共有化フレームワークにおけるサブシステムの連携

表 V.2.5.2- 6 情報共有化フレームワークのサブシステムの定義

番号	サブシステム	定義
1	MEMS 統合設計データベース	設計データ、プロセスフロー、計測データ、材料物性、環境負荷情報を統合的に蓄積するデータベースシステム
2	環境負荷算出機能	8 インチラインに導入される加工装置および評価装置の環境負荷を算出する機能
3	環境情報収集システム	環境負荷算出に必要な情報のうち、8 インチラインの装置から取得する情報を収集するシステム
4	3 次元設計・計測情報共有化システム	3 次元計測で 3 次元形状を、リバースエンジニアリング技術により設計での活用を支援するシステム

(2) -2.6.2 システム要求

情報共有化フレームワークのサブシステムの関連を図 V.2.5.2- 24 に示す。

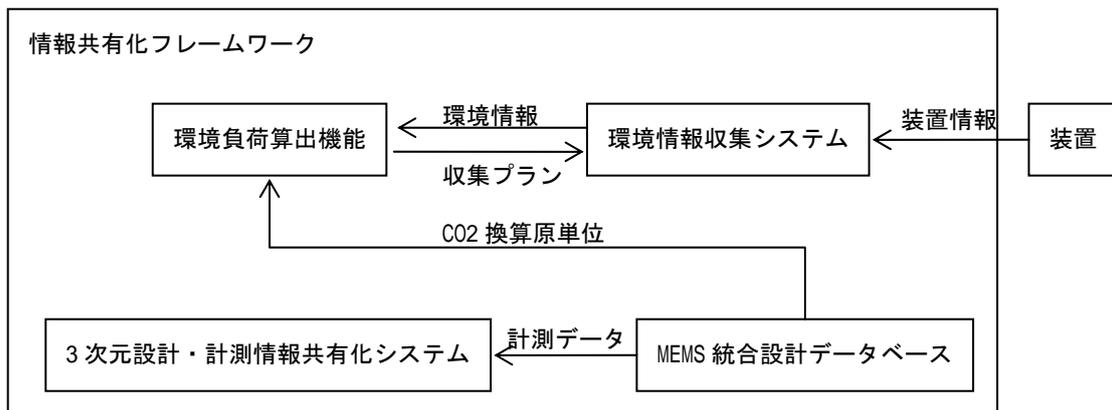


図 V.2.5.2- 24 情報共有化フレームワークのサブシステムの関連

■ 環境負荷算出機能と環境情報収集システムの連携

環境負荷算出機能が、能動的に環境情報収集システムへアクセスする。環境情報収集システムは、環境負荷算出システムに対して受動的であり、要求があるまではデータ提供を行わない。

環境負荷算出機能は、装置から得られる環境情報を環境情報収集システムから取得する。また、環境負荷算出機能が必要とするデータ収集プランを環境情報収集システムへ指示する。

■ 環境負荷算出機能と MEMS 統合設計データベースの連携

環境負荷算出機能が、能動的に MEMS 統合設計データベースへアクセスする。MEMS

統合設計データベースは、環境負荷算出機能に対して受動的であり、要求があるまではデータ提供を行わない。

環境負荷算出機能は、必要とする CO2 換算原単位を MEMS 統合設計データベースから取得する。

■ 3次元設計・計測情報共有化システムと MEMS 統合設計データベースの連携

3次元設計・計測情報共有化システムが能動的に MEMS 統合設計データベースへアクセスする。MEMS 統合設計データベースは、3次元設計・計測情報共有化システムに対して受動的であり、要求があるまではデータ提供を行わない。

3次元設計・計測情報共有化システムは、必要とする設計データまたは3次元計測データを MEMS 統合設計データベースシステムから取得する。

インターフェイスに関して、以下のように定義する。

■ 装置インターフェイス

装置は、情報共有化フレームワークの範囲に含めない。装置とのインターフェイスは、装置ごとに個別対応が必要となる。サブシステムである環境情報収集システムにおいて、各装置とのインターフェイスを構築する。

3. 2. 5. 2-2.6.3 シナリオ分析

情報共有化フレームワークに関するユースケース図を図 V.2.5.2- 25 に示す。

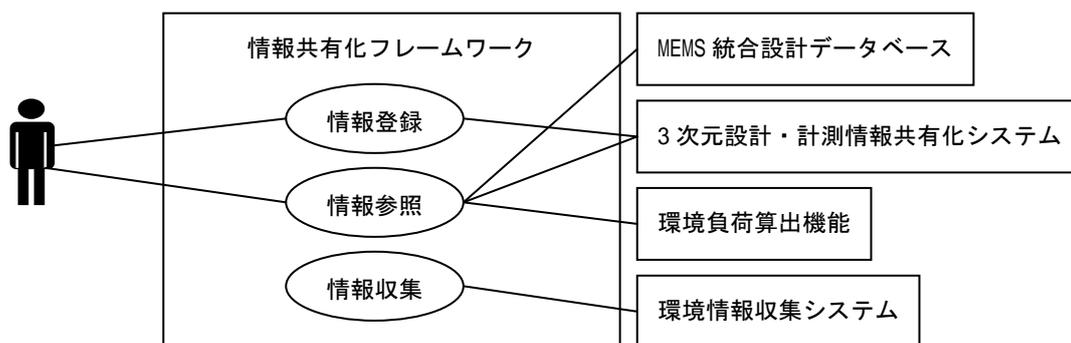


図 V.2.5.2- 25 情報共有化フレームワークのユースケース図

ユースケース「情報参照」のシナリオ例として、3次元計測データのリバースエンジニアリングを示す。計測データをリバースエンジニアリング技術によって、CAD形式の形状データに変換する。得られるCAD形式データを解析ツールであるMemsONEの形状入力として利用し数値計算を行う。この場合のアクティビティ図を図 V.2.5.2- 26 に示す。

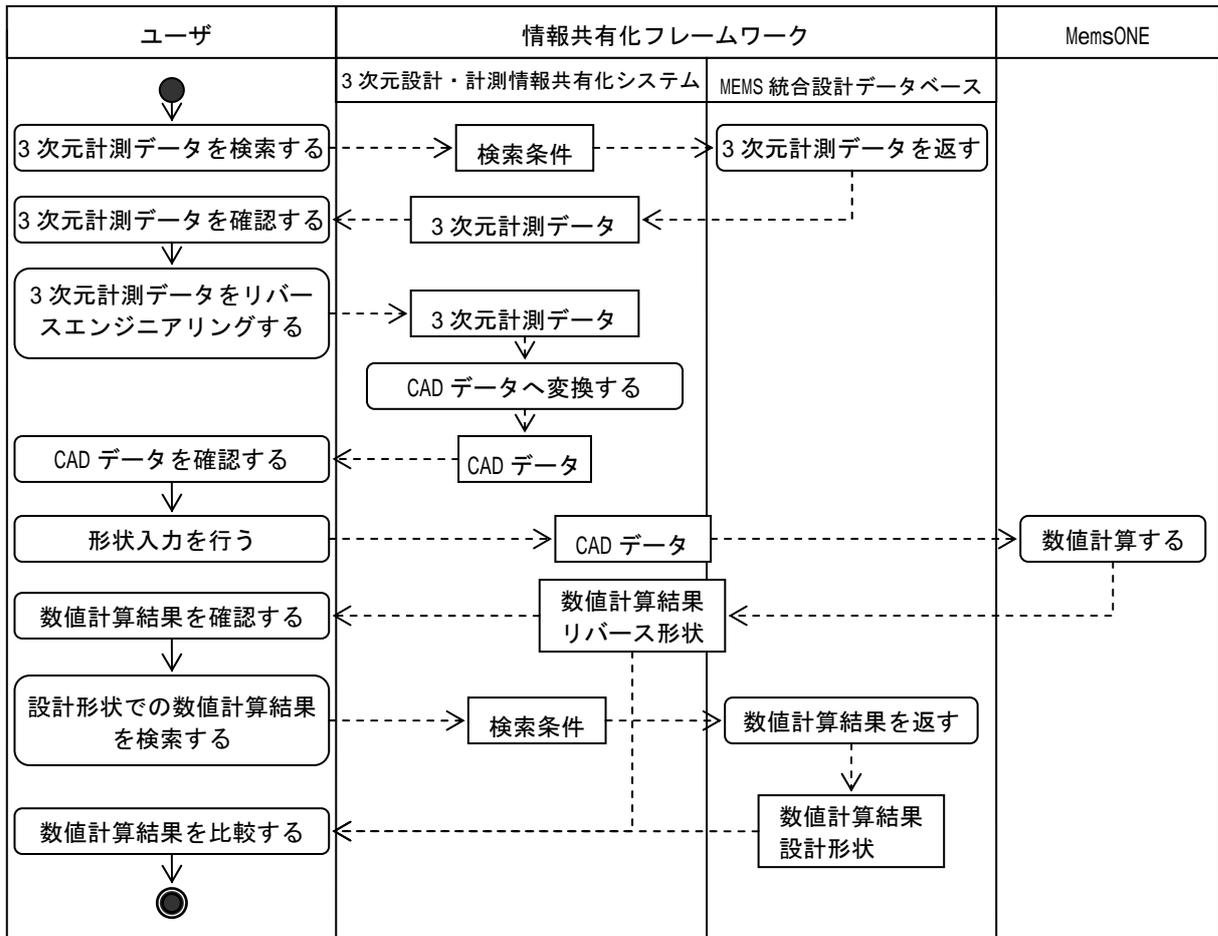
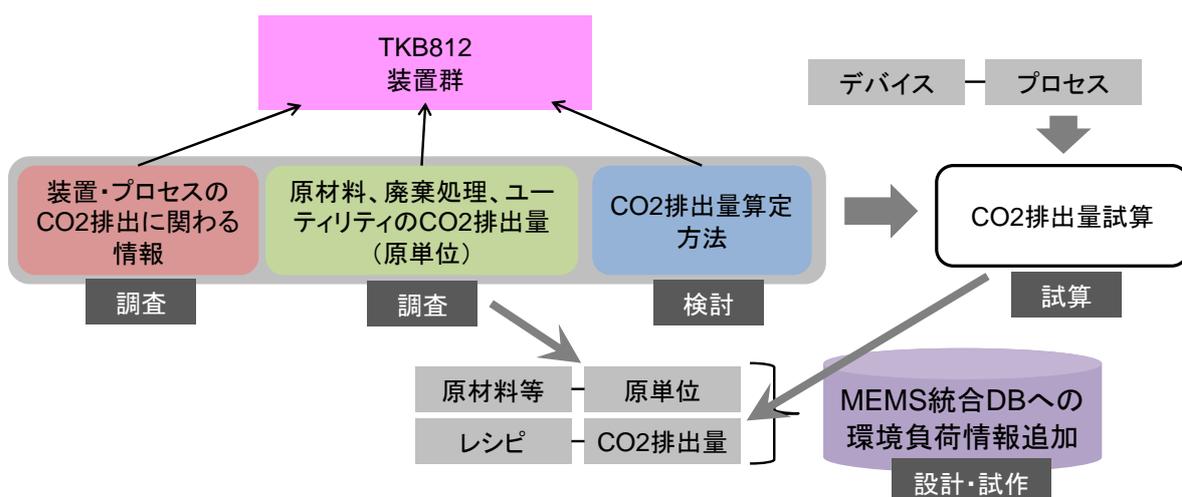


図 V.2.5.2- 26 リバースエンジニアリングのアクティビティ図

(3) 環境情報共有化技術の開発

低環境負荷 MEMS デバイスの実現のためには、環境負荷の算定が必須である。環境負荷の算定に当たっては、製品ライフサイクル（原材料調達、生産、流通、使用・維持管理、廃棄・リサイクル）を考慮し、製品の存在に関わるあらゆる段階の環境負荷を算定し、全体の環境負荷を低減することが必要である。

本研究開発項目では、MEMS製品の環境負荷として、二酸化炭素やPFCガス（CF₄、C₂F₆、C₃F₈、C₄F₈、CHF₃、SF₆、NF₃）の排出量について、温室効果（100年間）の強さをもとに二酸化炭素相当の排出量に換算した「二酸化炭素換算排出（以下、二酸化炭素排出[略記：CO₂排出]と記載）量」の算定方法の開発を行った。特に、MEMS製造プロセスは二酸化炭素排出に関連する原材料・工程・装置などが複雑であり排出量算定が困難であるため、製造プロセスでの二酸化炭素排出量の算定手法の開発を行うとともに、MEMS設計段階での利用を可能にするよう排出量の算定に関わる情報を集積するため、MEMS統合データベースへの環境負荷情報の追加機能の設計・試作を行った（図V.2.5.3-1）。



図V.2.5.3-1 環境情報共有化技術の開発

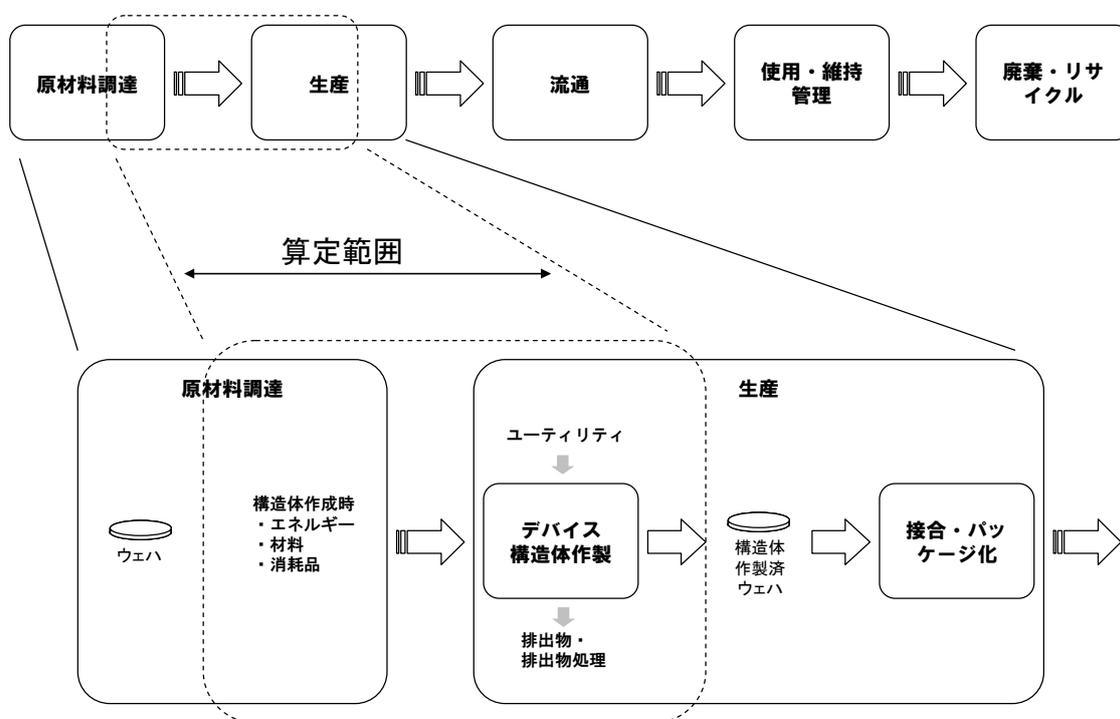
(3) -1 MEMS 製造プロセスの CO₂ 排出量算出手法の開発

本開発項目は、MEMS 製造時の二酸化炭素排出量の算定を行なうシステムの基本設計を検討することを目的とする。この目的のため、TKB812 に導入される製造装置・評価装置の電力使用量、原材料・ガス使用量、冷却水使用量などに関する装置仕様や計測データ、見える化システムによって収集・蓄積されたデータをもとに二酸化炭素排出量の算定方法を検討した。検討の結果得られた排出量算定の方法に基づき実際に排出量を算定し、算定システムの前案とした。

二酸化炭素排出の要因に関する情報を、すべての装置・工程に対して完備するためには多大な労力を必要とする。二酸化炭素排出量に対する寄与を数値化することではじめて項目間・処理間・装置間の比較が可能になり、寄与の大きい項目・工程・装置を明らかにしていくことができるという点が重要である。このような観点に立ち、不足する情報については概算や類推により極力数値を設定するように努めた。

なお、本開発項目にて実施した製造プロセスの二酸化炭素排出量の算定は、LCAの手法を用いて製品・サービスのライフサイクル全体にわたる環境負荷を算定するカーボンフットプリントの枠組みのなかでは、生産段階および原材料調達の一部である（図V.2.5.3-2）。

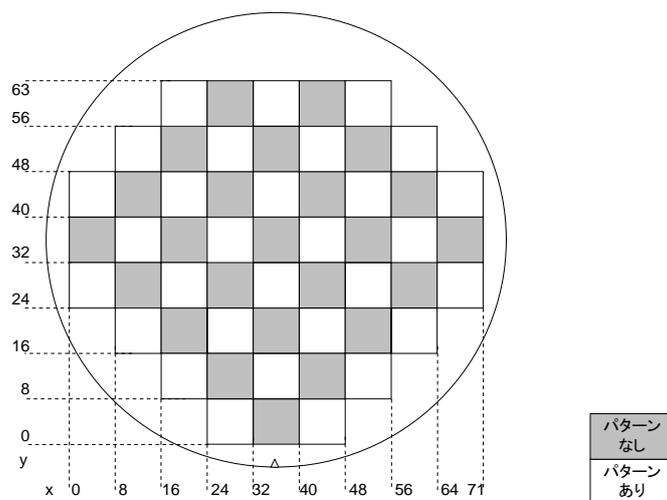
MEMS製品ライフサイクル



図V.2.5.3-2 MEMS製品のライフサイクルと二酸化炭素排出量算定範囲

(3) -1.1 二酸化炭素排出量算定の対象

二酸化炭素排出量の算定の対象製品は、TKB812へ導入された装置を使用し製造ラインの検証のため試作されたセンサTEG（図V.2.5.3-3）とした。センサTEGでは、8インチSOIウェハ（活性層25 μ m、埋め込み酸化膜4 μ m、基板725 μ m）を開始材料とし、ウェハ内に1920個（パターン区画30 \times 64個）のデバイスが作成された。



図V.2.5.3- 3 センサTEG 作製ウェハ

装置についてはセンサTEGの製造工程（表V.2.5.3- 1）に使用されたプロセス装置を二酸化炭素排出量の算定対象とした（表V.2.5.3- 2）。プロセス装置へ供給されるユーティリティに関わる装置についても二酸化炭素排出量の原単位算定を行なった。

TKB812に構築された見える化システムでは、表V.2.5.3- 2の列項目について10分間隔での計測を行なっている。また、必要に応じて、電力計にて1秒～1分間隔での電力を別途計測し、これらの計測値を二酸化炭素排出量の算定に用いた。

表V.2.5.3- 1 センサTEGの製造工程

No.	工程名	使用装置	仕様
1	レジスト成膜（1μm）	コーターデベロッパ	i線ホジレジスト（IP3650）、レジスト膜厚：1um レシピ名：1
2	パターニング（360ms）	ステッパ	SensorTEG_Layer2 レシピ名：SENSOR-TEG-1（360msec）
3	現像（1μm）	コーターデベロッパ	i線ホジレジスト（IP3650）、レジスト膜厚：1um レシピ名：9
4	裏面露光（1s）	ステッパ	レチクルなし、1000msec レシピ名：REWORK
5	裏面アッシング（40s）	アッシャー	O2=100sccm, 200W, 40sec レシピ名：2
6	Siエッチング（0.1μm）	シリコン深堀加工装置	Si加工深さ：0.1um レシピ名：PPS-Align
7	アッシング（1μm）	アッシャー	レジスト膜厚：1um, O2=50sccm, 500W, 15min レシピ名：1

8	洗浄 (SPM、HF)	ウェハ洗浄装置 1	SPM : 10min HF : 5min 洗浄 : 3min スピンドライヤ : 1min
9	アルミ成膜 (2 μm)	スパッタ	アルミ膜厚 : 2um レシピ名 : PPS-AL
10	レジスト成膜 (1 μm)	コーターデベロッパ	i 線ボジレジスト (IP3650)、レジスト膜厚 : 1um レシピ名 : 1
11	パターニング (360ms)	ステッパ	SensorTEG_Layer2 レシピ名 : SENSOR-TEG-1 (360msec)
12	現像 (1 μm)	コーターデベロッパ	i 線ボジレジスト (IP3650)、レジスト膜厚 : 1um レシピ名 : 9
13	アルミエッチング (2 μm)	ウェハ洗浄装置 1	アルミエッチング : 5min 純水洗浄 : 3min スピンドライヤ : 1min
14	アッシング (1 μm)	アッシャー	レジスト膜厚 : 1um, O2=50sccm, 500W, 15min レシピ名 : 1
15	熱処理 (400°C、30min)	ボロン拡散炉	アルミ N2 アニール、400°C、30min レシピ名 : 11. SUZUKI_AL
16	レジスト成膜 (1 μm)	コーターデベロッパ	i 線ボジレジスト (IP3650)、レジスト膜厚 : 1um レシピ名 : 1
17	パターニング (360ms)	ステッパ	SensorTEG_Layer1 レシピ名 : SENSOR-TEG-2 (360msec)
18	現像 (1 μm)	コーターデベロッパ	i 線ボジレジスト (IP3650)、レジスト膜厚 : 1um レシピ名 : 9
19	裏面露光 (1s)	ステッパ	レチクルなし、1000msec レシピ名 : REWORK
20	裏面アッシング (40s)	アッシャー	O2=100sccm, 200W, 40sec レシピ名 : 2
21	Si エッチング (25 μm)	シリコン深堀加工装置	Si 加工深さ : 25um レシピ名 : PPS-25um
22	アッシング (1 μm)	アッシャー	レジスト膜厚 : 1um, O2=50sccm, 500W, 15min レシピ名 : 1
23	犠牲層エッチング (4 μm)	HF 犠牲層エッチャー	SiO2 加工量 : 4um

24	熱処理 (200°C)	ホットプレート	HF・水分除去、昇温 10min、200°C (10min)
----	-------------	---------	--------------------------------

表V.2.5.3-2 二酸化炭素排出算定対象装置と見える化システムでの計測項目

装置名称		電力量	SF6	CHF3	高純度窒素	精製窒素	薬品	超純水	上水	冷却水	熱一般排気	有機排気	酸・アルカリ排気
プロセス・評価	ウェハ洗浄装置 1												
	ウェハ洗浄装置 2												
	コータデベロッパ												
	有機ドラフト												
	ウェットエッチング装置												
	マスク露光機												
	ステッパ												
	アッシャー												
	シリコン深掘加工装置												
	金属機能性材料エッチング装置												
	HF 犠牲層エッチャー												
	金属機能性材料膜形成装置												
	酸化炉												
	拡散炉 (ボロン)												
	熱処理炉												
膜厚測定装置													
ユーティリティ	高純度窒素精製装置												
	超純水精製装置												
	ハロゲン除害装置												
	PFC 除害装置												
	熱排気ファン												
	有機排気処理装置												
酸・アルカリ排気処理装置													

(3) -1.1 MEMS 製造装置の CO2 排出量の分析項目

前項に記載した各装置について、プロセス時の温室効果ガス排出量の算定に寄与する要因を整理した (図 V.2.5.3- 4)。

電力が主となる「エネルギー」、「導入系」としてプロセス時に必要となる材料や消耗品、「放出系」として、プロセス時に発生する排出物とその処理、「ユーティリティ」としてプロセス時に必要となるその他の装置について分類した。さらにプロセス・評価装置の稼働時の状況をもとに、導入系、放出系、ユーティリティについて詳細化し、二酸化炭素排出の要因となる要素についてリストアップした (表 V.2.5.3- 3)。

ユーティリティは、製造装置に対する材料・消費材や用力の供給、製造装置からの排出物の処理を行なうものであるため、ユーティリティの使用による二酸化炭素の排出量については、「導入系」での供給量や「放出系」での排出量によって寄与を考慮することとした。

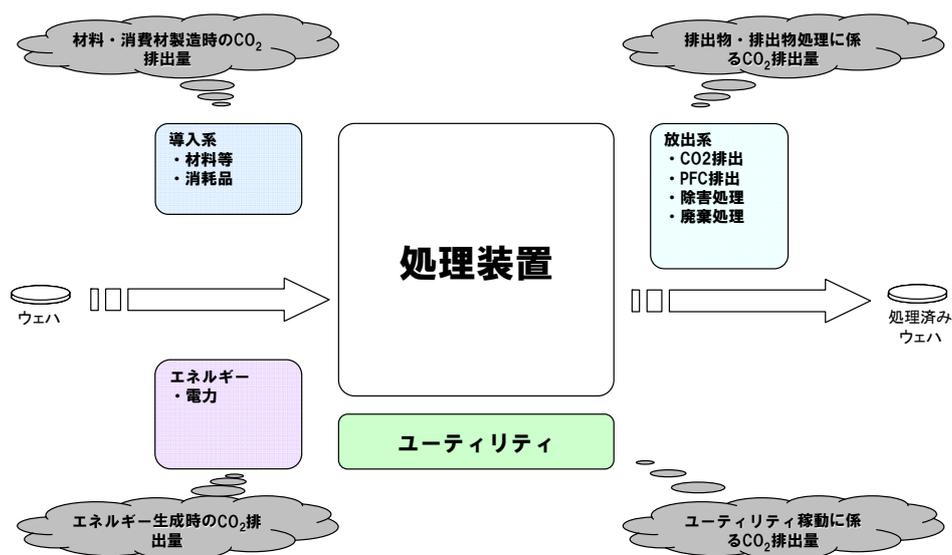


図 V.2.5.3- 4 温室効果ガス排出に係る情報整理

表 V.2.5.3- 3 二酸化炭素排出量の分析項目

エネルギー	電力		精製窒素		
導入系	SF6		圧縮乾燥空気		
	C4F8		超純水		
	CF4		冷却水		
	HF(ガス)		放出系	SF6 (排出)	
	O2			C4F8 (排出)	
	Ar			CF4 (排出)	
	He			PFC 除害	
	H2			ハロゲン除害	
	高純度窒素			熱・一般排気	
	純水 (ポンペ)			酸・アルカリ排気	
	H2SO4			有機排気	
	H2O2			廃液タンク排水	
	HF(50%)			ポリタンク回収	
	HMDS			ユーティリティ	高純度窒素供給
	レジスト				精製窒素供給
	リンス液 (リソ)				超純水供給
	現像液				圧縮乾燥空気供給
	レジスト剥離液				冷却水
	Ti		PFC 除害		
	Pt		ハロゲン除害		
	Cr		熱一般排気処理		
	Au		酸・アルカリ排気処理		
	Al		有機排気処理		
	SiO2				
	Mo				
	Ni				

(3) -1.2 原材料・廃棄処理・ユーティリティの CO2 排出量原単位算定

二酸化炭素排出量の分析項目 (表 V.2.5.3- 3) ごとに二酸化炭素排出量原単位の収集・算定を行なった。

原単位の情報源としては、経済産業省カーボンフットプリント事業²によって公開されて

² <http://www.cfp-japan.jp/> カーボンフットプリント

いる「カーボンフットプリント制度試行事業CO2換算量共通原単位データベース（暫定版）ver. 2.01」を利用した。薬液の成分や固体物質などの化学種のなかには公開情報として原単位の存在しないものがあるため、推定により原単位を導出したものもある。典型的には、次のような推定を行なった。

原料の化学種の原単位が既知である場合は合成反応と合成プロセスに基づき算定した。このような算定ができない場合において、骨格構造を同一にする類似化学物質の原単位からの類推、情報が非常に少ない場合には同種物質との価格の比較などから原単位を推定した。

TKB812でのユーティリティ・廃棄処理関連の原単位については、次表（表V.2.5.3-4）に記載の方針に従って算定を行なった。

表V.2.5.3-4 ユーティリティ・廃棄処理の原単位算定方法

カテゴリ	項目	適用	装置・処理方法	原単位算定方法
導入系	高純度窒素供給	N2（純度 6N）	高純度窒素供給装置(CE-N2)	高純度窒素精製に関する公開原単位を使用
	精製窒素供給	N2（純度 4N）	高純度窒素精製装置(PSA-N2)	TKB812F での窒素製造装置の単位精製窒素量当たりの電力量で概算
	超純水供給	DIW	超純水精製装置	TKB812F の超純水精製装置の単位純水供給量当たりの電力量・上水使用量などから概算
	圧縮乾燥空気供給		圧縮乾燥空気供給装置	TKB812F の CDA 供給用の圧縮乾燥空気供給装置の仕様（単位処理量当たりの電力使用量）から概算
	真空供給		真空供給用ポンプ 2 台、真空ピンセット用	TKB812F のプロセス・評価装置では使用していないため、原単位を算定しない
	冷却水供給		産総研の冷却水供給系	工業用の冷却システムの仕様から概算
放出系	ハロゲン除害	プロセスガス（HBr、BCl3、Cl2、HF、ClF3）、生成化合物	ドライエッチング廃ガス除害装置 処理後は、(1) 酸・アルカリ排気、 (2) PFC 除害を経て酸・アルカリ排気へ廃棄される 2 系統	TKB812F のハロゲン除害装置の単位処理時間当たりの電力使用量から概算
	PFC 除害	プロセスガス（SF6、C4F8、CF4、CHF3）、生成 F 化合物	PFC 除害装置 処理後は酸・アルカリ排気へ	TKB812F の PFC 除害装置の単位処理時間当たりの電力使用量から概算

カテゴリ	項目	適用	装置・処理方法	原単位算定方法
	熱一般排気	熱排気、一般排気	熱排気ファン	TKB812F の熱一般排気ファンの単位排気量当たりの電力使用量から概算
	有機排気	有機排気	有機処理装置	TKB812F の有機排気ガス処理装置の単位処理量当たりの電力使用量から概算
	酸・アルカリ排気	酸性排気、アルカリ性排気	酸・アルカリ排気処理装置	TKB812F の酸・アルカリ排気ガス処理装置の単位処理量当たりの電力使用量から概算
	ポリタンク回収	酸・アルカリ (SPM、APM、HPM+DHF、5%DHF)、有機溶剤	20L ポリタンクによる原液回収処理	回収業者の回収処理状況から推定
	廃液タンク排水	1次・2次洗浄排液	廃液タンクへの排水・回収処理	回収業者の回収処理状況から推定
	研究排水	3次以降洗浄排液	産総研の研究排水への排出	薬品製造などの下水処理に関する公開原単位を使用

(3) -1.3 MEMS 製造プロセスの二酸化炭素排出量算定方法

収集・算定した原単位を用い、以下の考え方にに基づき二酸化炭素排出量を算定した。なお、調査対象の装置の中には取得できる計測値や処理時間、流量速度に関する情報にばらつきがあるため、装置仕様や推定による概算値を用いて以下の式に当てはめる方針とした。

表 V.2.5.3- 5 二酸化炭素排出量算定方法

エネルギー	
◇ 電力	(ウェハー一枚加工あたりの CO ₂ 排出量) =(ウェハー一枚加工あたり電力使用量<測定値>) × (電力の原単位)
導入系・排出系	
◇ 流量がパラメータとなる気液物質	(ウェハー一枚加工あたりの CO ₂ 排出量) =(物質流量) × (ウェハー一枚あたりの加工時間) × (物質原単位)
◇ 一処理あたりの使用量がパラメータとなる気液物質	(ウェハー一枚加工あたりの CO ₂ 排出量) =(ウェハー一枚処理あたりの物質使用量) × (処理回数) × (物質原単位)
◇ 使用時間がパラメータとなる物質	(ウェハー一枚加工あたりの CO ₂ 排出量) =(ウェハー一枚処理あたりの加工時間) × (時間当たり原単位)

装置の使用状況については、MEMS 製品を大量生産する状況を仮定した。したがって、

次のような仮定を置いている。

- 常時電源オンで待機状態にある装置については、連続稼働による処理中の 1 ロット分を切り出して活動量を算定
- 処理時に電源を入れる装置は、電源 On から Off までの活動量を算定
- 製造装置自体の製造・設置、非製造時運用に関する二酸化炭素排出量は考慮していない

また、TKB812 のライン検証としてのセンサ TEG の作製工程により、算定は次の範囲となる。

- ウェハ上へのデバイス構造体の作製過程について算出
 - MEMS 製品としての完成品の歩留まりを考慮していない（歩留まり 100%）
- 原材料・消耗品・ユーティリティなどについての算定は、次の範囲となる。
- 製造時に直接必要となる原材料・消耗品については、基本的に全て算定に含まれている
 - 故障時交換品、長期（1年以上）使用後交換品については、算定に含めていない
 - ユーティリティとして供給されるものについて（精製窒素、超純水など）は、供給のための電力、原材料は考慮されているが、供給装置において稼働に必要な消耗品は考慮されていない
 - 温調装置・空気清浄装置などクリーンルーム内の空調、クリーンルーム内の照明その他付帯的設備にかかる二酸化炭素排出は考慮されていない

（3）－1.4 二酸化炭素排出量試算結果

前項で記載した個別の装置（表 V.2.5.3- 2）に対して、表 V.2.5.3- 1 のセンサ TEG 製造工程ごとに、ウェハ 1 枚当たりの二酸化炭素排出量を試算した。

図 V.2.5.3- 5 に、全工程で合算した二酸化炭素排出量（41.6kg-CO₂e）の内訳を示した。電力、および、精製窒素がいずれも 35% と大部分を占めている。次いで、圧縮乾燥空気 9%、さらに、超純水、レジスト剥離液、廃液タンク排水がいずれも 3% となっている。合算結果からは、二酸化炭素排出量の削減には、電力、および、精製窒素の削減が効果的であるといえる。

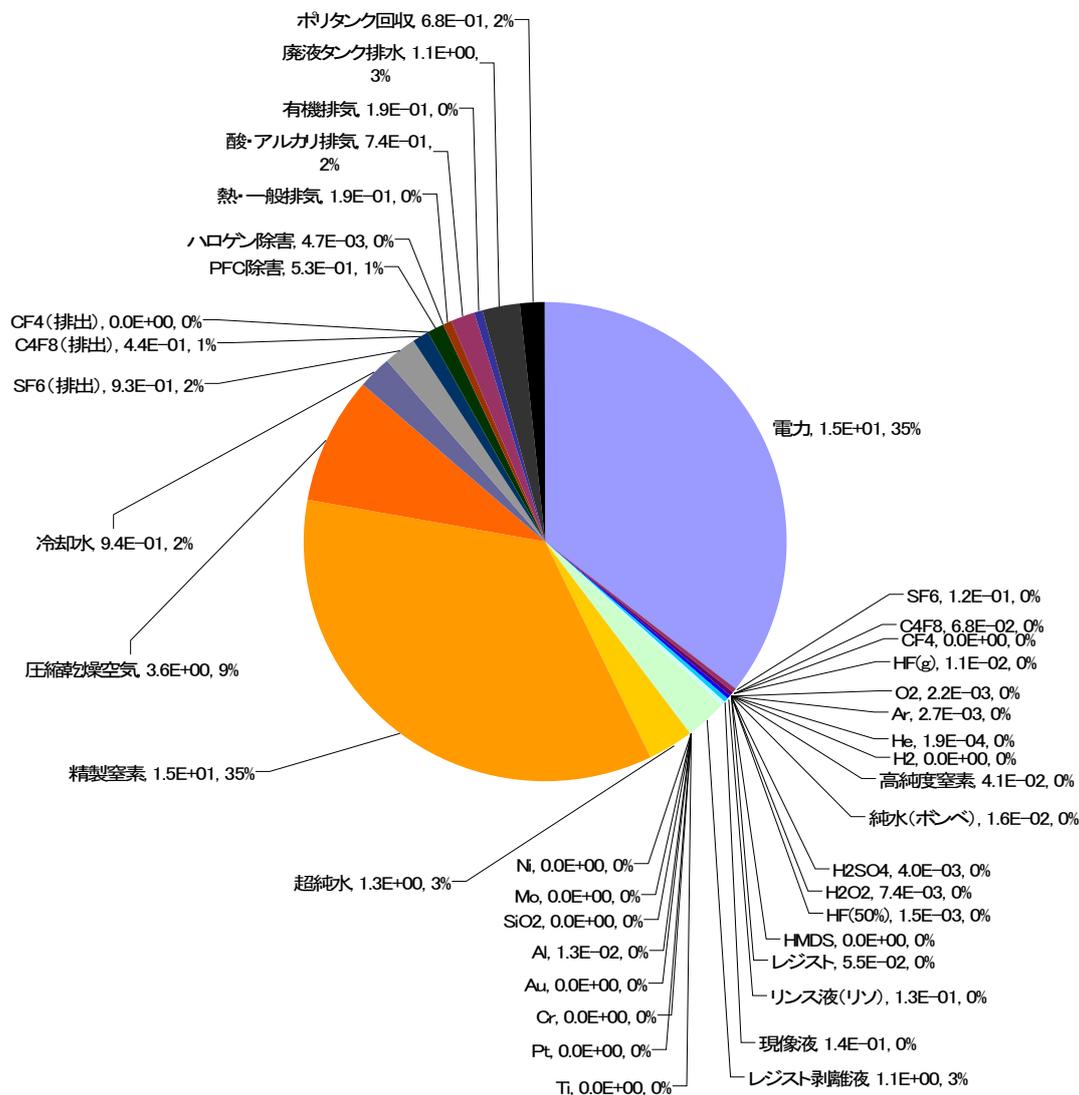


図 V.2.5.3- 5 センサ TEG 全製造工程の二酸化炭素排出量

図 V.2.5.3- 6 にセンサ TEG の作製における製造工程ごとの二酸化炭素排出量を示した。工程の中では、アルミエッチング (2 μm)、Siエッチング (25 μm)、洗浄 (SPM、HF) 工程の二酸化炭素排出量が多い。全工程内の項目を比較した場合には、現像 (1 μm) での精製窒素、アルミ製膜 (2 μm) での電力、Siエッチング (25 μm) での電力、アルミエッチング (2 μm) での電力と圧縮乾燥空気からの二酸化炭素排出量が多い。

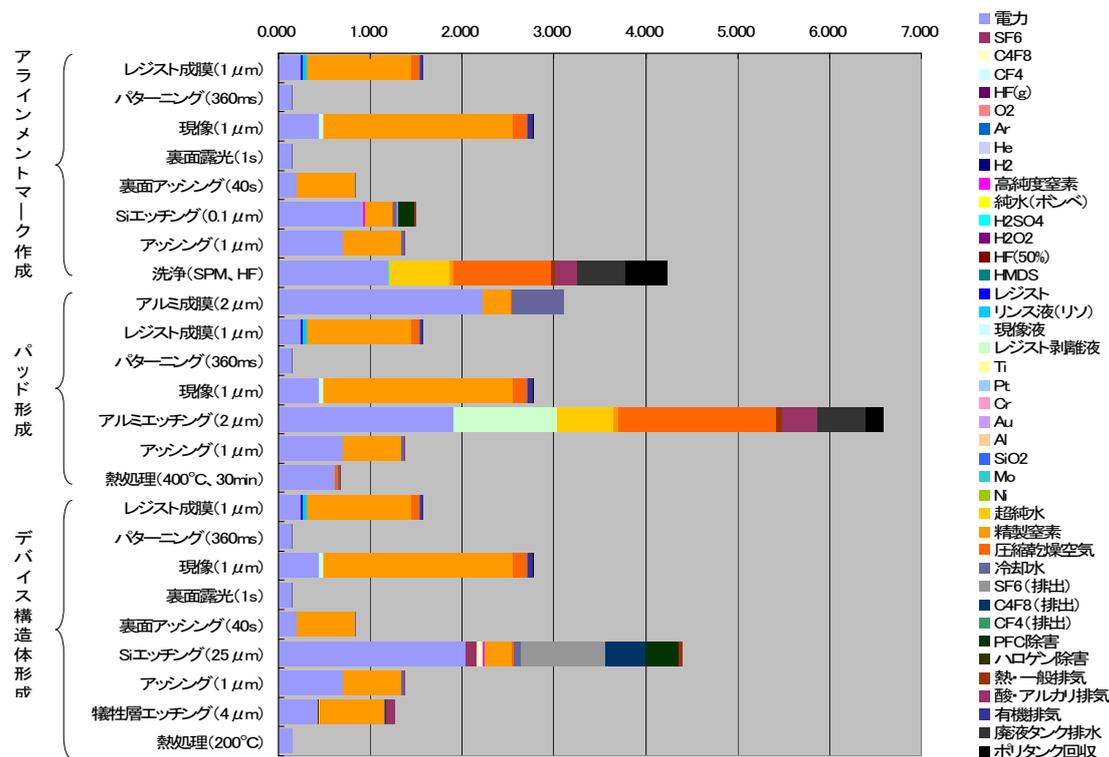


図 V.2.5.3- 6 センサ TEG の製造工程ごとの二酸化炭素排出量

図 V.2.5.3- 7 にセンサ TEG の全製造工程での製造装置ごとの二酸化炭素排出量を示す。コータデベロッパ、ウェハ洗浄装置 1、シリコン深堀装置、アッシャーからの排出量が多い。

コータデベロッパを使用する工程は、全 24 工程のうち 6 工程あり (表 V.2.5.3- 1)、これらからの寄与が積みあがっている。これらの中では精製窒素の使用による二酸化炭素排出量への寄与が大きい。

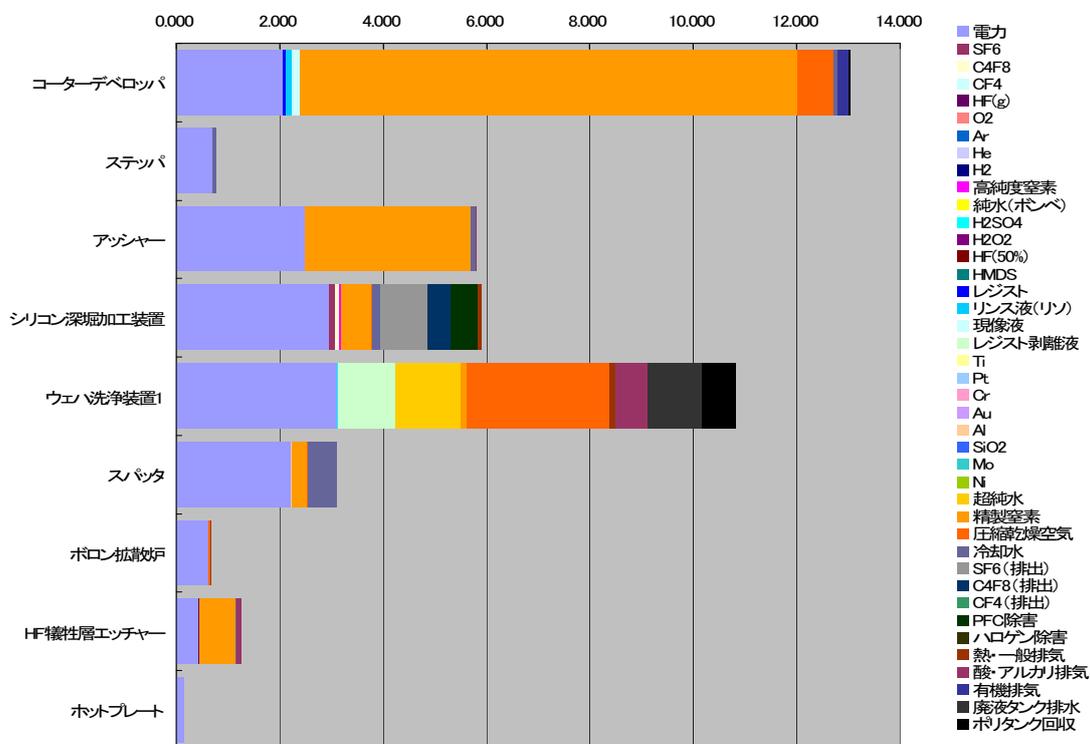
ウェハ洗浄装置 1 を使用する工程は、洗浄 (SPM、HF)、アルミエッチング (2 μm) の 2 工程であり工程間の比較でも二酸化炭素排出量の多い工程である。項目では、電力、および、圧縮乾燥空気の二酸化炭素排出量が多い。

シリコン付加掘装置では、Si エッチング (25 μm) 工程のみである。電力による二酸化炭素排出量が多い。

アッシャーは、全 24 工程のうち 5 工程あり (表 V.2.5.3- 1)、これらからの寄与が積みあがっている。精製窒素、および、電力からの二酸化炭素の排出量がほとんどを占めている。

全装置の全項目間を比較すると、コータデベロッパおよびアッシャーの精製窒素、コータデベロッパ、アッシャー、シリコン付加掘装置、ウェハ洗浄装置 1、およびスパッタの電力、ウェハ洗浄装置 1 の圧縮乾燥空気、からの二酸化炭素排出量が多くなっている。全

製造工程からの二酸化炭素排出量の削減を検討する場合には、これらの項目からの二酸化炭素排出量削減の効果が高いといえる。



図V.2.5.3- 7 センサ TEG 製造工程の装置ごとの二酸化炭素排出量

表V.2.5.3- 6に、MEMS製品についてのデバイス構造体作製と使用時の二酸化炭素排出量を示す。デバイス構造体作製時については、本研究開発でのセンサTEG作製時の二酸化炭素試算結果に基づいている。使用時については、消費電力を1mWと仮定し5年間の連続使用を仮定した。二酸化炭素排出量は、ほぼ同程度の値であると見積もられる。

表V.2.5.3- 6 MEMS 製品についての作製・使用時の二酸化炭素排出量

	デバイス構造体作製 (原材料調達、および、生産の一部)	使用
二酸化炭素排出量	21.6g-CO2e	21.0g-CO2e
算定条件	本研究開発でのセンサ TEG (8 インチ、1920 デバイス) に関する試算	消費電力 1mW、5 年間連続使用

(3) -1.5 課題

本研究開発では、MEMS のデバイス構造体の製造工程について、工程ごとに排出に寄与する項目を調査し、寄与を積算することで二酸化炭素排出量を算定した。算定の結果により、排出量の多い装置・工程・項目に注目することで、装置・工程・項目に対する排出量の削減への指針を得ることができた。

MEMS 製品の構造や製造工程は多種多様であることから、今後、今回開発した算定手法を他の製品・製造工程に適用し情報を統合して、MEMS 製品の二酸化炭素排出量に関する情報をデバイスおよびプロセスの設計時に生かせるようにする必要がある。

MEMS 製品のライフサイクルを通じた二酸化炭素排出量の算定のためには、本研究開発での製造工程での排出量試算において除外した項目を組み入れる必要がある。さらに、原材料としてのウェハ製造、デバイス構造体と同一チップ上または別チップに作製される信号処理量用 IC の製造、および、パッケージングなどの生産段階、流通段階、最終製品に組み込まれた後の使用・維持管理段階、廃棄・リサイクル段階についても算定を進める必要がある。

(3) -2 MEMS 統合 DB 環境負荷データ登録・参照機能の開発

MEMS 製造プロセスの CO2 排出量算出結果を MEMS 統合設計データベースへ登録する機能、および参照する機能を開発した。

(3) -2.1 画面レイアウト

■ 登録

登録画面レイアウトを図 V.2.5.3- 8 に示す。CO2 排出量は、製造装置のレシピごとに算出される。レシピ名、装置名、レシピファイル、CO2 排出量を登録する。

事前に装置管理を行うメニューで、登録しておいた 8 インチライン導入された装置の一覧がプルダウンで表示される。

図 V.2.5.3- 8 登録画面レイアウト

■ 参照

登録された CO2 排出量は、一覧形式で表示される。画面レイアウトを図 V.2.5.3- 9 に示す。

	装置	レシピ名	CO2排出量
1 削除	ACD-12802C-3H 1	R10	3.132
2 削除	ACD-12802C-3H 1	R1	1.484
3 削除	ACD-12802C-3H 1	R9	13.813
4 削除	ACD-12802C-3H 1	R12	17.210

図 V.2.5.3- 9 参照画面レイアウト

(3) -2.2 データベーステーブルの定義

画面レイアウトで表示するデータを考慮し、データベーステーブルの設計を行った。E-R 図を図 V.2.5.3- 10に、テーブル定義を表 V.2.5.3- 7および表 V.2.5.3- 8に示す。

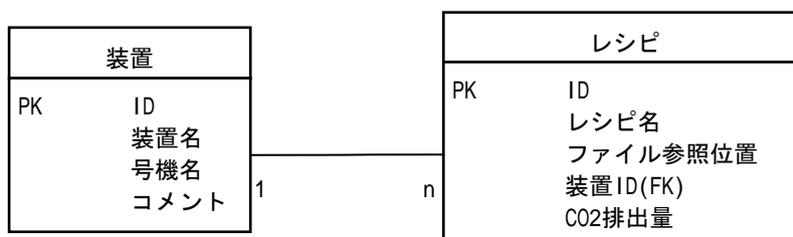


図 V.2.5.3- 10 CO2 排出量 DB E-R 図

表 V.2.5.3- 7 装置テーブル定義

テーブル名(理名)		装置						
テーブル名(物理名)		measuring_equipment						
番号	項目名 (理名)	カラム名	データ型	数	NOT NULL	キー (PK)	外部キー (FK)	説明
1	ID	measuring_equipment_id	Number	7	NOT NULL	PK		
2	装置名	equipment_name	CHAR	256	NOT NULL	PK		
3	号機名	equipment_number	CHAR	256		PK		
4	コメント	comment	CHAR	512				

表 V.2.5.3- 8 レシピテーブル定義

テーブル名(理名)		レシピ						
テーブル名(物理名)		recipe						
番号	項目名 (理名)	カラム名	データ型	数	NOT NULL	キー (PK)	外部キー (FK)	説明
1	ID	id	Number	7	NOT NULL	PK	FK	
2	レシピ名	name	CHAR	32				
3	ファイル参照位置	archive_position	CHAR	256	NOT NULL			レシピファイルのパス
4	装置 ID	equipment_id	Number	7	NOT NULL		FK	装置テーブルの ID
5	CO2 排出量	CO2emission	Real					

(3) -2.3 総括

MEMS 製造における環境負荷の低減のためには、工場全体の稼働に関わる情報や、製造された製品品質に関する情報、製造装置の稼働状況に関する情報、および、これらを元に得られる環境負荷情報を、実際に環境負荷低減へと結びつける手段を確立することが重要である。本研究開発ではこの目的に資するため、3次元設計・計測情報の共有化技術の開発、および、環境情報共有化技術の開発を行った。

3次元設計・計測情報の共有化技術の開発では、**MEMS**の形状計測によりデバイス・プロセス設計への示唆を得るための手法の検討として、シリコンチップ表面に作製されたカンチレバーに対してX線CT装置により3次元構造計測を行い、得られた構造から設計時の形状や力学特性の比較を行った。機械特性、電気特性の計測データと設計形状とを、集中質点系モデルを介在させて比較する手法を検討した。併せて、情報共有のためのデータベースシステムの設計・プロトタイプ開発を行った。

3次元構造計測による設計へのフィードバックについては、X線CT装置計測から形状・力学特性の比較という一連の手続きにより、デバイス・プロセス設計改善への指針を提示し得ることを示すことができた。機械特性・電気特性計測による設計へのフィードバックについては、設計へと効果的に示唆を与える得ることを示した。

今後は、開発した設計へのフィードバック手法・技術を更に改良・発展させ、多種多様な**MEMS**デバイスへの適用を可能にすることが必要である。X線CT装置による計測では、計測からデータ変換の一連の手続きの中で撮像時のアーチファクトを克服する手法・手段の検討が課題である。また、データベースシステムについては現在のプロトタイプシステムをもとに開発を進め、実用に供するシステムを実現することが必要である。

環境情報共有化技術の開発では、プロジェクトにて構築される製造ラインにて製造される製品の二酸化炭素排出量の算定方法を開発した。**MEMS**のデバイス構造体の製造工程について、工程ごとに排出に寄与する項目を積算することで二酸化炭素排出量を算定した。算定の結果により、装置・工程・項目に対する排出量の削減への指針を得ることができた。

MEMS製品の構造や製造工程は多種多様であることから、今後、今回開発した算定手法を他の様々な製品・製造工程に適用して知見を集約し、**MEMS**製品の二酸化炭素排出量に関する情報をデバイスおよびプロセスの設計時に生かせるようにする必要がある。

MEMS製品のライフサイクルを通じた二酸化炭素排出量の算定のためには、本研究開発での製造工程での排出量試算において除外した項目、原材料としてのウェハ製造、信号処

理量用 IC の製造、および、パッケージングなどの生産段階、流通段階、最終製品に組み込まれた後の使用・維持管理段階、廃棄・リサイクル段階についても算定を進める必要がある。

MEMS 製品に関する計測データの設計へのフィードバックによる開発効率向上・歩留まり向上や、二酸化炭素排出量の算定によるデバイス・プロセス設計時の環境負荷の算定が可能になれば、低環境負荷製品の早期市場投入を促進し、MEMS 分野の国際競争力の強化に寄与することができる。