



Title	反応性マグネトロンスパッタによる非晶質薄膜堆積過程の数値解析
Author(s)	田口, 雅文
Citation	大阪大学, 2007, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/48556
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名 田 口 雅 文

博士の専攻分野の名称 博 士 (工 学)

学 位 記 番 号 第 2 1 1 8 9 号

学 位 授 与 年 月 日 平成 19 年 3 月 23 日

学 位 授 与 の 要 件 学位規則第 4 条第 1 項該当

工学研究科生産科学専攻

学 位 論 文 名 反応性マグネトロンスパッタによる非晶質薄膜堆積過程の数値解析

論 文 審 査 委 員 (主査)

教 授 浜口 智志

(副査)

教 授 平田 好則 教 授 岡田 成文

論 文 内 容 の 要 旨

今日、通信形態の主流になりつつある光ファイバー通信で利用されるキーデバイスとして、光学フィルターや回折格子などがある。本研究では、光学フィルターの多層薄膜成膜開発や回折格子上へ真空成膜する微細加工技術 ODMS (Oblique Deposition by Multiple Sources) 法の開発において、より高精度な特性を得るため、数値解析を用いて、成膜条件と、堆積膜の微細断面形状および膜質の関係を調べた。

ODMS 法とは、回折格子基板に対して複数のターゲットから、異なる角度でスパッタ粒子を基板に照射する方法である。このプロセスによって得られる堆積膜微細断面形状を予測することを目的に、ODMS 法による成膜プロセス用に微細断面形状時間発展の数値シミュレーション手法とシミュレーションコードを開発し、そのシミュレーション結果が、実験結果を精度よく再現できることを確認した。こうしたシミュレーション結果の解析により、成膜粒子の入射角によって膜密度が異なる現象が推測され、成膜条件が膜質に大きな影響を及ぼすことが示唆された。

次に、成膜条件が膜質に及ぼす影響について、分子レベルの数値解析を行った。非晶質 SiO_2 成膜の数値解析では、分子動力学 (MD) 法のみで熱的緩和過程を取り扱うと、現在の計算機能力の限界で規定される計算可能な時間スケールをはるかに越える長い計算時間が必要となるため、直接的な MD 手法は非現実的である。そこで、MD 法とモンテカルロ (MC) 法を組み合わせた手法を開発した。これにより、熱的緩和によって薄膜の構造がその温度で安定化されながら、入射粒子が表面に堆積していく過程を近似的に取り扱うことが可能になった。結晶薄膜成長では MC 法を用いた数値解析手法が過去に報告されているが、非晶質薄膜について MD 法と MC 法の両手法を同時に取り扱った点に本研究の独自性がある。この新しい数値解析手法を用いたシミュレーションにより、反応性マグネトロンスパッタ成膜プロセスにおいて、入射粒子のエネルギー・入射角度、および、高エネルギー Ar イオン等が膜質へ与える影響について新たな知見を得た。

これらのシミュレーションにより、入射粒子の運動量の垂直方向成分が、膜密度に大きな影響を与えていることが分かった。また Si の入射エネルギーによって、入射粒子が膜表面に留まるのか膜中深くまで到達するかで、膜組成に及ぼす影響も明らかにした。高エネルギー Ar イオンの影響は、大きな運動量の垂直方向成分によって膜が緻密になる効果と、薄膜表面の原子をスパッタする効果が見られた。気相中の酸素が大量に基板表面に到達するため、酸素原子で表面が覆われている。酸素は Ar によって選択的にスパッタされる現象が確認された。

このように、形状計算と MD・MC 計算を組み合わせることで、反応性マグネトロンスパッタの諸条件によって薄

膜の膜質が受ける影響を定量的に予測するシミュレーション手法を確立した。こうした手法を活用することにより、今後の高精度なデバイス開発において膜質によって引き起こされる不具合について、予め知見を得ることが可能となった。今後、本手法と第一原理量子シミュレーションを直接組み合わせることで、より高い精度で表面化学反応を取り扱うことができると予想される。

論文審査の結果の要旨

本論文では、光学フィルターの多層薄膜成膜開発や回折格子 $\uparrow$ へ真空成膜する微細加工技術において、より高精度な膜特性を得るため、数値解析を用いて、成膜条件と、堆積膜の微細断面形状および膜質の関係を調べている。本論文の前半では、成膜プロセス用の微細断面形状時間発展の数値シミュレーション手法とシミュレーションコードを開発し、そのシミュレーションによって得られた薄膜形状が、実験結果を精度よく再現できることを確認している。また、本論文の後半では、成膜条件が膜質に及ぼす影響について、分子動力学 (MD) シミュレーションとモンテカルロ (MC) シミュレーションを組み合わせた分子レベルの数値解析を行い、反応性マグネトロンスパッタ成膜プロセスにおいて、入射粒子のエネルギー・入射角度、および、高エネルギーAr イオン等が膜質へ与える影響について、新たな知見を得ている。このように、本論文において、形状計算と MD・MC シミュレーションを組み合わせることにより、反応性マグネトロンスパッタの諸条件によって薄膜の膜質が受ける影響を定量的に予測するシミュレーション手法を提案していることは、この分野の今後の発展に大きな貢献をしたといえる。例えば、これらのシミュレーション手法を活用することにより、今後の高精度なデバイス開発において膜質によって引き起こされる不具合について、予め知見を得ることが可能となる。更に、本手法と第一原理量子シミュレーションを直接組み合わせることで、より高い精度で表面化学反応を取り扱うことができるようになることも予想される。

以上のように、本論文は、新たに開発したシミュレーション手法を元に、反応性マグネトロンスパッタ法による薄膜形成技術の進歩に大きな貢献をした。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。