

# Heuristische Simulation der Plasma-Impedanz beim reaktiven Magnetron-Sputtern

## Einleitung

A. Pflug  
pflug@ist.fraunhofer.de

M. Siemers  
B. Szyszka  
Fraunhofer IST

O. Kappertz  
T. Nyberg  
S. Berg  
Universität Uppsala,  
Schweden

D. Severin  
M. Wuttig  
RWTH Aachen

Zur Simulation der Gesamtdynamik des reaktiven Sputterprozesses eignen sich mikroskopische, detaillierte Verfahren wie z. B. »Particle-In-Cell Plasmasimulation« [1] aufgrund des inhärenten hohen Rechenaufwands nur bedingt. Der gegenteilige Ansatz besteht in einem parametrisierbaren, heuristischen Modell des reaktiven Magnetron-Sputterns. Ein derartiges Modell wurde zuerst in [2] vorgestellt und wird im Folgenden als »Berg-Modell« bezeichnet.

In diesem Modell wird die Geometrie einer Sputteranlage zu einem kastenförmigen Volumen mit homogenen Partialdrücken vereinfacht. Substrat und Target werden jeweils durch eine Oberfläche mit einem homogenen Oxidationsgrad,  $\theta_C$  und  $\theta_T$ , repräsentiert. Die restlichen Innenflächen einer Sputteranlage wie z. B. Abschirmbleche, Innenseiten etc. werden zur Substratfläche subsumiert. Mittels materialabhängiger Sputterausbeuten und Reaktivgas-Getterkoeffizienten sowie des Ionenstroms  $j^+$  als Eingangsgröße gibt das Modell qualitativ die wichtigsten Eigenschaften des Sputterprozesses - z. B. das Hysterese-Verhalten bei Reaktivgas-Flussvariation - wieder. Dieses Modell wurde im Folgenden von mehreren Gruppen in verschiedene Richtungen - z.B. Sputtern mit zwei Reaktivgasen oder Co-Sputtern - erweitert. Ein Übersichtsartikel hierzu findet sich in [3].

Ein Nachteil des Berg-Modells besteht darin, dass die Ionenstromdichte als Eingangsgröße benötigt wird, diese jedoch

als Messgröße i.d.R. nicht zur Verfügung steht. So findet z. B. das oft komplexe Verhalten der Targetspannung beim Wechsel vom Metallic- in den Reaktivmode im Berg-Modell keine Berücksichtigung. Aus diesem Grund wurde in [4] als Erweiterung ein vereinfachtes Berechnungsverfahren für die Katodenfallspannung beim reaktiven Sputtern vorgestellt, welches auf die Balance zwischen Ionenverlust durch Sputtern und Ionenregeneration durch Sekundärelektronen basiert. In [5] wurde dieses Modell verwendet, um die Spannungs- und Ratenschwankungen aufgrund der Bewegung eines Glassubstrats durch eine In-line-Sputteranlage zu simulieren.

## Theorie

Für einige Materialien, z. B. Ti oder Hf, zeigen die Targetspannungs-Charakteristiken eine Komplexität, die auch mit dem in [4] eingeführten Modell noch nicht gut beschrieben werden kann: Beim Wechsel vom Metallic- in den Reaktivmode steigt die Targetspannung zunächst um ca. 100-200V an. Bei weiterer Erhöhung des Reaktivgasflusses nimmt die Targetspannung jedoch allmählich wieder ab. Um einen derartigen Spannungsverlauf im Modell wiedergeben zu können, wird in dieser Arbeit ein erweitertes Modell für die Katodenfallspannung mit nach Gasarten und Targetoxidationszustand getrennten Sekundärelektronenkoeffizienten eingeführt.

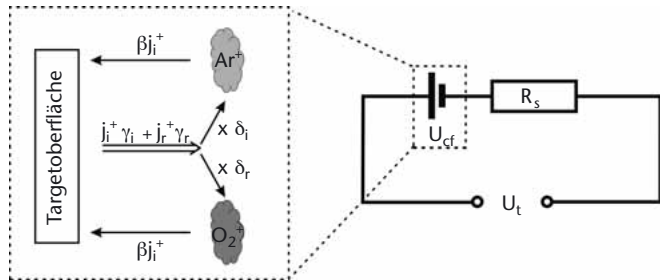
In diesem Modell ist  $n^+ = n_i^+ + n_r^+$  die Flächenkonzentrationen von Ar- und O<sub>2</sub>-Ionen vor der Targetoberfläche. Diese werden durch die Sputterstromstärken  $\beta_{j_i}^+$ ,  $\beta_{j_r}^+$  verringert; mit einem Vorfaktor von  $\beta > 1$  können wie in [5] neben Sputtern zusätzliche Ionenverlustmechanismen berücksichtigt werden. Die Ionenregeneration erfolgt in zwei Schritten durch (i) Sekundärelektronenemission gemäß der Koeffizienten  $\gamma_i$ ,  $\gamma_r$

für Inert- und Reaktivgas sowie (ii) durch Ionisierung von Neutralgasatomen durch Sekundärelektronen mittels der Effizienzen  $\delta_i, \delta_r$ . Mit  $\delta = \delta_i + \delta_r, j^+ = j_i^+ + j_r^+$  gilt anhand *Abb. 1* für die Ionendichte

$$(1) \quad \frac{\partial n^+}{\partial t} = \delta(j_i^+ \gamma_i + j_r^+ \gamma_r) - j^+ \beta = j^+ \delta \left( \frac{F_i}{F_i + \eta F_r} \gamma_i + \frac{\eta F_r}{F_i + \eta F_r} \gamma_r \right) - j^+ \beta.$$

Im zweiten Term wurden die Teil-Stromdichten  $j_{ar}^+, j_{o2}^+$  mittels der zu den Partialdrücken proportionalen Flächenstromdichten  $F_r, F_i$  von Reaktiv- und Inertgas sowie deren Ionisierungsverhältnis  $\eta$  durch die Gesamtstromdichte  $j^+$  ausgedrückt. Die einfachste Annahme ist, dass die Effizienz der Ionenregeneration linear von der Katodenfallspannung

*Abbildung 1*  
Berechnung der Katodenfallspannung  $U_{cf}$  aus der Balance zwischen Ionenverlust und Regeneration sowie der Gesamtspannung  $U_t$  aus der Serienschaltung zwischen Katodenfall und weiteren in  $R_s$  zusammengefassten Beiträgen



$U_{cf}$  abhängt. Betrachtet man zusätzlich die Sekundärelektronen-Emission als Funktion der Targetoxidation  $\theta_T$ , führt dies auf

$$(2) \quad \delta \gamma_i = U/U_0 (\gamma_{io} \theta_T + \gamma_{im} [1 - \theta_T]), \quad \delta \gamma_r = U/U_0 (\gamma_{ro} \theta_T + \gamma_{rm} [1 - \theta_T]).$$

Die Koeffizienten  $\gamma_{i(i/r)(o/m)}$  bezeichnen die effektiven Sekundärelektronenemissionen von Inert- bzw. Reaktivgas (i/r) auf oxidierter bzw. metallischer Targetoberfläche (o/m). Eingesetzt in Gl. (1) resultiert hieraus im stationären Gleichgewicht

$$U_{cf} = \frac{U_0 \beta}{\frac{F_i}{F_i + \eta F_r} (\gamma_{io} \theta_T + \gamma_{im} [1 - \theta_T]) + \frac{\eta F_r}{F_i + \eta F_r} (\gamma_{ro} \theta_T + \gamma_{rm} [1 - \theta_T])}. \quad (3)$$

Aus *Abb. 1* kann daraufhin die Gesamtspannung  $U_t$  aus der Serienschaltung von Katodenfall und weiteren Widerstandsbeiträgen ermittelt werden. Diese umfassen z. B. die Plasma-Glühregion, Kontaktwiderstände an verschiedenen Oberflächen sowie auch die Zuleitungskabel. Für konstante Leistung  $P$  folgt.

$$U_t = U_{cf} + IR_s = U_{cf} + \frac{P}{U_t} R_s \Rightarrow U_t = \frac{U_{cf} + \sqrt{U_{cf}^2 + 4R_s P}}{2}. \quad (4)$$

Die Fälle »konstanter Strom« und »konstante Spannung« lassen sich auf analoge Weise behandeln. Damit können elektrische Kenndaten reeller Sputteranlagen im Modell wiedergegeben werden.

## Experiment

In einer zylindrischen Labor-Sputterkammer an der RWTH Aachen von der Firma Leybold, die mit bis zu sechs runden Leybold PK Katoden bestückt werden kann, wurden für unterschiedliche Materialien, u.a. Hf und Ti, Targetspannungs-Kennlinien bei Reaktivgasfluss-Variation aufgenom-

men. Der Totaldruck betrug jeweils 0.6 Pa bei einer Ar-Gas-einströmung von anfangs 35 sccm, die mit zunehmendem Reaktivgaseinlass entsprechend zurückgefahren wurde. Alle Kennlinien wurden bei konstanter Stromstärke zwischen 0.4 ... 0.8 A aufgenommen, zusätzlich wurde die Variation der Beschichtungsrate mit einem Schwingquartz gemessen. Die in *Abb. 2a* gezeigten Spannungskennlinien des reaktiven Ti-Sputterprozesses wurden zunächst mit dem in [4] eingeführten Katodenfallspannungs-Modell ohne Gasarten-Separation angepasst (graue Linien); diese Anpassung ist unbefriedigend. Erst durch die Einführung der gasarten-separierten Sekundärelektronenemission (schwarze Linien) ist das Modell in der Lage, den Gesamtverlauf der Spannungskennlinien wiederzugeben. Für den Hf-Prozess wurden wie in *Abb. 2b* und *Abb. 2c* gezeigt, Spannungskennlinie und Beschichtungsrate simultan angepasst.

## Zusammenfassung

Mit Hilfe des Berg-Modells und der in dieser Arbeit gezeigten heuristischen Erweiterung für die Plasmaimpedanz lassen sich reale Sputterprozesse sowohl hinsichtlich der elektrischen als auch hinsichtlich der internen physikalischen Parameter in ein parametrisierbares Modell abbilden. Ein solches Modell lässt sich daraufhin zur Analyse und Verbesserung der Stabilität bzw. Homogenität des reaktiven Sputterprozesses verwenden.

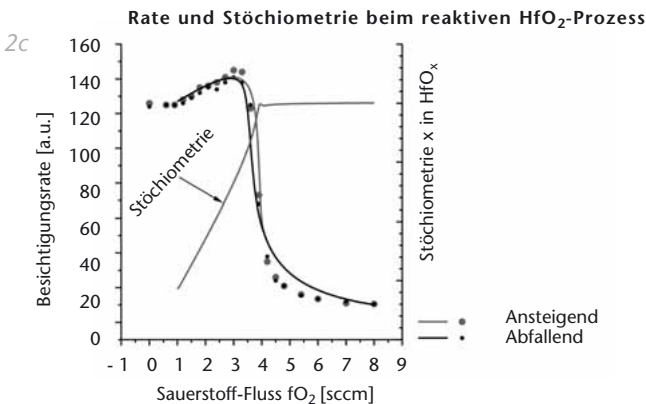
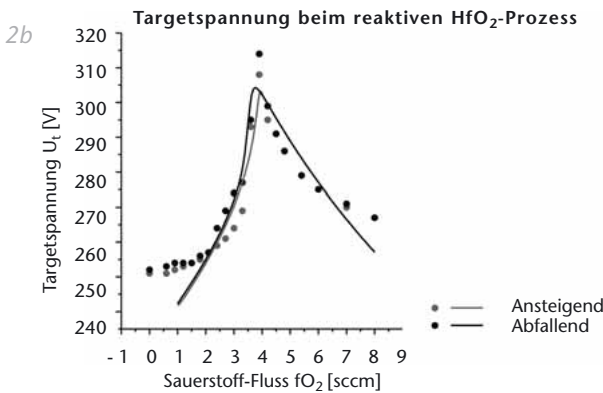
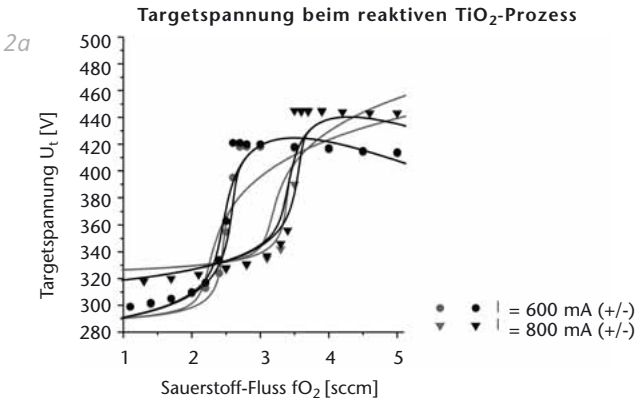


Abbildung 2a,b,c  
Anpassung gemessener TiO<sub>2</sub>- (a) und HfO<sub>2</sub>- (b) Spannungskennlinien sowie der Beschichtungsrate (c) beim HfO<sub>2</sub>-Prozess mit Hilfe des Berg-Modells und des Modells zur Kato-denfallspannung mit gasarten-separierten Sekundärelektronen-koeffizienten

## Danksagung

Die hier gezeigten Arbeiten werden im Rahmen eines Verbundprojektes zwischen RWTH Aachen, Uppsala Universität, TU-Braunschweig und Fraunhofer IST von der Volkswagen-Stiftung finanziell gefördert, der an dieser Stelle für die Unterstützung gedankt sei.

## Literatur

- [1] E. Shidoji, E. Ando, T. Makabe, Plasma Sources Sci. Tech. 8 (2001) 621.
- [2] S. Berg, H.-O. Blohm, T. Larsson, C. Nender, J. Vac. Sci. Technol. A5 (2) (1987) 202.
- [3] S. Berg, T. Nyberg, Thin Solid Films 476 (2005) 215.
- [4] A. Pflug, B. Szyszka, V. Sittinger, and J. Niemann, Proc. 46th SVC Tech. Conf. (2003) 241.
- [5] A. Pflug, B. Szyszka, M. Geisler, A. Kastner, C. Braatz, U. Schreiber, J. Bruch, Proc. 47th SVC Tech. Conf. (2004) 155.