

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2017年7月20日(20.07.2017)



(10) 国際公開番号
WO 2017/122404 A1

- (51) 国際特許分類:
H01L 21/31 (2006.01) C23C 16/52 (2006.01)
C23C 14/54 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2016/080993
- (22) 国際出願日: 2016年10月19日(19.10.2016)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2016-004259 2016年1月13日(13.01.2016) JP
- (71) 出願人: ソニー株式会社 (SONY CORPORATION)
[JP/JP]; 〒1080075 東京都港区港南1丁目7番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 久保井 信行 (KUBOI, Nobuyuki); 〒1080075 東京都港区港南1丁目7番1号 ソニー株式会社内 Tokyo (JP).
- (74) 代理人: 亀谷 美明, 外 (KAMEYA, Yoshiaki et al.); 〒1600004 東京都新宿区四谷3-1-3 第一

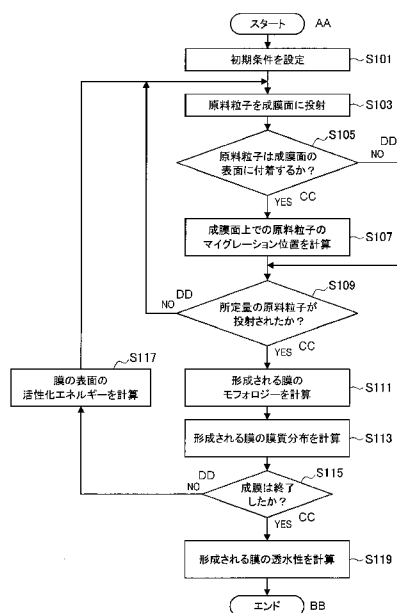
富澤ビル はづき国際特許事務所 四谷オフィス Tokyo (JP).

- (81) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, KE, KG, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 指定国 (表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ユーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR),

[続葉有]

(54) Title: FILM FORMING SIMULATION METHOD, PROGRAM, AND SEMICONDUCTOR PROCESSING SYSTEM

(54) 発明の名称: 成膜シミュレーション方法、プログラム、および半導体加工システム



S101 Set initial conditions
S103 Project raw material particles onto film formation surface
S105 Have raw material particles adhered to film formation surface?
S107 Calculate migration position for raw material particles on film formation surface
S109 Has the prescribed amount of raw material particles been projected?
S111 Calculate morphology of formed film
S113 Calculate film quality distribution for formed film
S115 Is film forming complete?
S117 Calculate activation energy of film surface
S119 Calculate water permeability of formed film
AA Start
BB End
CC YES
DD NO

(57) Abstract: [Problem] To provide a film forming simulation method that can predict film quality of a film formed on a macro scale. [Solution] A film forming simulation method including: calculation of the migration position on a film formation surface for each raw material particle incident to the film formation surface on the basis of activation energy for the film formation surface using a calculation device; calculation of information related to defects in a film formed with the raw material particles on the film formation surface on the basis of the migration positions for a prescribed amount of the raw material particles each time the migration positions of the prescribed amount of the raw material particles are calculated; and calculation of the activation energy for the surface of the film formed with the raw material particles on the basis of the information related to the defects in the film. The activation energy for the surface of the film calculated immediately before is used in calculating the migration positions for each of the raw material particles.

(57) 要約: 【課題】マクロスケールで成膜される膜の膜質を予測することを可能にする成膜シミュレーション方法を提供する。【解決手段】演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置を計算するたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算することと、を含み、前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーが用いられる、成膜シミュレーション方法。

WO 2017/122404 A1

WO 2017/122404 A1



OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第 21 条(3))

明 細 書

発明の名称：

成膜シミュレーション方法、プログラム、および半導体加工システム

技術分野

[0001] 本開示は、成膜シミュレーション方法、プログラム、および半導体加工システムに関する。

背景技術

[0002] 近年、半導体素子の特性を向上させることが増々求められている。ここで、半導体素子の特性を向上させるには、成膜プロセスを最適化することにより、成膜される膜の被覆性、および膜質（例えば、密度、欠陥密度、透水性、および密着性など）を適切に制御することが重要である。

[0003] ここで、成膜される膜の種々の特性を予測する技術として、様々な成膜シミュレーション技術が提案されている。

[0004] 例えば、下記の非特許文献1には、入射ガスの流量に関する情報を用いて、入射ガス粒子の成膜面での付着位置をモンテカルロ法で解くことで、成膜される膜の成膜速度、および被覆性を計算する技術が開示されている。

[0005] また、第一原理計算または分子動力学（Molecular Dynamics：MD）計算を用いて、原子1個1個の挙動を詳細に解析することにより、成膜される膜の膜質を数ナノメートルの領域で予測することが提案されている。

先行技術文献

非特許文献

[0006] 非特許文献1：Steve K. Dew, et. al 「IEEE TRANSACTIONS ON ELECTRON DEVICES」, 1992 vol. 39, No. 7, p. 1599

発明の概要

発明が解決しようとする課題

- [0007] ただし、非特許文献1に開示された技術では、成膜される膜の被覆性をマイクロメートルの領域で予測することは可能であるが、成膜される膜の膜質を予測することは困難であった。また、第一原理計算またはMD計算を用いた解析では、成膜される膜の膜質を数マイクロメートルの領域で予測することは、膨大な費用および時間が必要となるため、現実的ではなかった。
- [0008] そこで、マイクロメートルの範囲にて、成膜される膜の膜質を予測することが可能な成膜シミュレーション方法が求められていた。

課題を解決するための手段

- [0009] 本開示によれば、演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置を計算するたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算することと、を含み、前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーが用いられる、成膜シミュレーション方法が提供される。
- [0010] また、本開示によれば、コンピュータを成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、前記マイグレーション演算部によって、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、として機能させ、前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、プ

ログラムが提供される。

[0011] また、本開示によれば、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、を備え、前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、半導体加工システムが提供される。

[0012] 本開示によれば、成膜中の膜の膜質分布の変化を反映させながら、膜のモフォロジーを計算することが可能である。

発明の効果

[0013] 以上説明したように本開示によれば、成膜される膜の膜質をマイクロメートルの範囲で予測することが可能である。

[0014] なお、上記の効果は必ずしも限定的なものではなく、上記の効果とともに、または上記の効果に代えて、本明細書に示されたいずれかの効果、または本明細書から把握され得る他の効果が奏されてもよい。

図面の簡単な説明

[0015] [図1]本開示の第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法で扱われる成膜方法を説明する説明図である。

[図2]同実施形態に係る成膜シミュレーション方法の流れを示すフローチャート図である。

[図3]原料粒子のマイグレーション位置の第1の計算方法を示した説明図である。

[図4]原料粒子のマイグレーション位置の第2の計算方法を示した説明図である。

[図5]成膜対象の上の膜のモフォロジーを二次元ボクセルモデルにて表した説明図である。

[図6]同実施形態に係る成膜シミュレーション方法と、他のシミュレーション方法との連動の一例を示す説明図である。

[図7A]図3を用いて説明した第1の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。

[図7B]図3を用いて説明した第1の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。

[図8A]図4を用いて説明した第2の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。

[図8B]図4を用いて説明した第2の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。

[図9]微細構造が形成された成膜面に対する成膜を説明する説明図である

[図10]異方性を有する成膜方法を説明する説明図である。

[図11]エッチングシミュレーションと成膜シミュレーションとの連動の流れを説明するフローチャート図である。

[図12A]エッチングシミュレーションのシミュレーション結果を示す画像である。

[図12B]エッチングシミュレーションのシミュレーション結果を示す画像である。

[図13]本開示の第2の実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置を説明する説明図である。

[図14]同実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置の機能構成を示したブロック図である。

[図15]同実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置のハードウェア構成例を示したブロック図である。

[図16]本開示の第3の実施形態に係る半導体加工システムの概略を説明する説明図である。

[図17]同実施形態に係る半導体加工システムの機能構成を示したブロック図である。

発明を実施するための形態

[0016] 以下に添付図面を参照しながら、本開示の好適な実施の形態について詳細に説明する。なお、本明細書及び図面において、実質的に同一の機能構成を有する構成要素については、同一の符号を付することにより重複説明を省略する。

[0017] なお、説明は以下の順序で行うものとする。

1. 第1の実施形態

1. 1. 概略

1. 2. 成膜シミュレーション方法の流れ

1. 3. 他のシミュレーションとの連動

1. 4. 具体例

2. 第2の実施形態

2. 1. 概略

2. 2. 成膜シミュレーション装置の構成例

2. 3. ハードウェア構成例

3. 第3の実施形態

3. 1. 概要

3. 2. 半導体加工システムの構成例

4. まとめ

[0018] <<1. 第1の実施形態>>

<1. 1. 概略>

まず、図1を参照して、本開示の第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法の概略について説明する。図1は、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法で扱われる成膜方法を説明する説明図である。

[0019] 図1に示すように、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法では、成膜対象5の成膜面に対して、原料粒子1を投射し、原料粒子1からなる膜3

を形成する成膜方法を扱う。

[0020] 具体的には、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、各種蒸着法を扱い、成膜される膜の膜質分布を予測するものである。本実施形態に係る成膜シミュレーション方法で扱うことが可能な成膜方法としては、例えば、抵抗加熱蒸着法、電子ビーム蒸着法、分子線エピタキシー法、イオンプレーティング法、およびスパッタリング法などの物理蒸着法（Physical Vapor Deposition: PVD）、ならびに熱またはプラズマ化学気相蒸着法、原子層堆積法（Atomic Layer Deposition: ALD）、有機金属気相成長法などの化学蒸着法（Chemical Vapor Deposition: CVD）などを例示することができる。

[0021] 原料粒子1は、例えば、原子、分子、またはこれらを電離させたイオンである。原料粒子1は、成膜チャンバに導入された原料ガスを熱またはプラズマ等を用いて分解または電離することで形成されてもよく、金属ターゲットに希ガス原子等を衝突させることで形成されてもよい。

[0022] また、原料粒子1は、1種であってもよく、2種以上であってもよい。すなわち、膜3は、単一の原料から形成された膜であってもよく、複数の原料を反応させることで形成された膜であってもよい。

[0023] 成膜対象5は、例えば、金属基板、半導体基板、ガラス基板、石英基板、または樹脂基板などである。成膜対象5の成膜面の表面の形状および材質は、特に限定されない。例えば、成膜対象5の成膜面には、薄膜が形成されていてもよく、微細構造が形成されていてもよい。

[0024] 成膜対象5に成膜される膜3は、例えば、数マイクロメートル程度の膜厚の薄膜である。また、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法にて扱うことが可能な領域の大きさは、例えば、一辺の長さが数マイクロメートル程度の領域である。

[0025] 本実施形態に係る成膜シミュレーション方法によれば、上述した成膜方法において、成膜される膜3の密度、欠陥密度および透水性などのミクロな性

質を数マイクロメートルの範囲にて予測することが可能である。

[0026] <1. 2. 成膜シミュレーション方法の流れ>

続いて、図2を参照して、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法の流れについて説明する。図2は、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法の流れを示すフローチャート図である。

[0027] 図2に示すように、まず、成膜の初期条件が設定される（S101）。成膜の初期条件とは、具体的には、成膜条件に関する情報、および成膜面に関する情報などを含む。成膜条件に関する情報は、例えば、成膜方法、成膜温度、成膜時の印加パワー、成膜圧力、成膜時間、および成膜速度などの情報であり、成膜面に関する情報は、例えば、成膜面の材質および形状などの情報である。

[0028] 例えば、成膜方法がガスを原料とする蒸着方法である場合、S101では、成膜条件に関する情報として、ガス種、ガスフラックス量、成膜温度、成膜時の印加パワー、成膜圧力、および成膜時間等が設定されてもよい。また、成膜面に関する情報として、成膜面の材質および形状が設定されてもよい。

[0029] また、後述するように、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法では、成膜の進行に伴い、所定量の原料粒子が成膜面に投射されるたびに、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布等が計算される。そこで、S101では、初期条件として、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布等を計算する時間ステップが設定されてもよい。

[0030] 次に、原料粒子が成膜面に仮想的に投射される（S103）。原料粒子の投射方向および投射位置は、例えば、モンテカルロ法を用いて決定される。なお、成膜方法が等方的な成膜方法（例えば、CVDなど）である場合、原料粒子の投射方向は、ランダムに決定される。また、成膜方法が異方的な成膜方法（例えば、PVDなど）である場合、原料粒子の投射方向は、成膜方向に基づいた方向性を有するように決定される。例えば、原料粒子の投射方向は、成膜面に対する垂直方向を中心値とするガウシアン分布を有するよう

に決定されてもよい。

[0031] 続いて、成膜面に投射した原料粒子が成膜面に付着するか否かを判定する (S105)。投射された原料粒子は、所定の付着確率で成膜面に付着する (S105/Yes)。なお、付着しない原料粒子は、成膜面の表面で反射される (S105/No) ため、成膜には寄与しない。成膜面に対する原料粒子の付着確率は、原料粒子の種類および投射速度、ならびに成膜面の材質および反応性などに基づいて適切に設定されるが、例えば、例えば、0.1以上1.0以下の範囲で設定されてもよい。

[0032] 次に、成膜面に付着した原料粒子のマイグレーション位置が計算される (S107)。成膜面に付着した原料粒子は、成膜面の表面でマイグレーションした後、最終的な付着位置にて膜を形成する。このように、成膜面の表面に原料粒子が順次付着し、堆積していくことによって、成膜面に膜が形成される。

[0033] ここで、図3および図4を参照して、原料粒子の成膜面でのマイグレーション位置の計算方法について具体的に説明する。図3は、原料粒子のマイグレーション位置の第1の計算方法を示した説明図である。また、図4は、原料粒子のマイグレーション位置の第2の計算方法を示した説明図である。

[0034] 本実施形態に係る成膜シミュレーション方法では、成膜される膜の様態（モフォロジーともいう）を種々の形状のセルを用いてモデル化して表すことができる。具体的には、図3および図4に示すように、成膜対象5の上の膜3のモフォロジーを二次元ボクセルモデルにて表すことができる。なお、膜3のモフォロジーは、他の形状のセルでモデル化して表すことも可能である。例えば、膜3のモフォロジーは、多角形状または円形状のセルを用いたモデルで表されてもよい。また、膜3のモフォロジーを三次元にて表すことも可能であり、このような場合、球形状または立方体形状のセルを用いたモデルで表されてもよい。

[0035] 図3を参照すると、第1の計算方法では、まず、原料粒子1がマイグレーションする領域Mが設定され、領域M内でモンテカルロ法を用いることで、

原料粒子 1 が膜 3 の表面上で最終的に付着する位置を決定する。

[0036] 領域Mは、原料粒子 1 が入射した位置を中心とする成膜面の面内方向にLの長さの領域である。Lは、原料粒子 1 が入射した成膜面の活性化エネルギー E_a 、および成膜温度 T に依存し、例えば、下記の数式 1 にて決定される値である。

[0037] [数1]

$$L = \sqrt{D_0 \tau} \times e^{-E_a/2k_B T} \quad \dots \text{数式 1}$$

[0038] 数式 1 において、 D_0 は、拡散定数であり、 τ は、拡散時間であり、 k_B は、ボルツマン定数である。なお、活性化エネルギー E_a は、成膜された膜 3 の表面状態に影響されるため、後述するように、膜 3 の膜質分布が計算されるたびに、膜 3 の膜質分布を反映して再計算される。

[0039] 具体的には、第 1 の計算方法では、まず、原料粒子 1 がマイグレーションする領域M内にて凹形状の表面位置 33 が存在するか否かが判定される。凹形状の表面位置 33 が存在する場合、凹形状の表面位置 33 を原料粒子 1 が最終的に付着する位置と判断する。また、凹形状の表面位置 33 が複数存在する場合、原料粒子 1 が入射した位置から最近接の凹形状の表面位置 33 を原料粒子 1 が最終的に付着する位置と判断する。

[0040] 一方、凹形状の表面位置 33 が存在しない場合、領域M内でランダムに選択した表面位置を原料粒子 1 が最終的に付着する位置と判断する。なお、表面位置の選択には、原料粒子 1 が入射した位置からの距離に応じた重み付けがされていてもよい。

[0041] 図 4 を参照すると、第 2 の計算方法では、原料粒子 1 が有するエネルギーが閾値以下になるまで原料粒子 1 を膜 3 の表面上でランダムに移動させることで、原料粒子 1 が膜 3 の表面上で最終的に付着する位置を決定する。

[0042] 具体的には、原料粒子 1 は、膜 3 の表面を移動するたびに、以下の数式 2 で表されるエネルギー収支を受け、エネルギーが減少する。ここで、原料粒子 1 が有するエネルギー E が閾値以下となった位置を原料粒子 1 が最終的に

付着する位置と判断する。

[0043] [数2]

$$E = E_0 + \sum_j^n (k_B T \times j) - \sum_j^n E_a(j) \quad \cdots \text{数式 2}$$

[0044] 数式 2 において、 E_0 は、原料粒子 1 が成膜面に入射した際に有していた初期のエネルギーであり、 j は、成膜面の表面で原料粒子 1 が移動した回数である。また、 E_a は、数式 1 と同様に、原料粒子 1 が入射した成膜面の活性化エネルギーであり、 T は成膜温度であり、 k_B は、ボルツマン定数である。すなわち、数式 2 の第 2 項は、成膜温度 T に基づいて周囲環境から原料粒子 1 が受け取るエネルギーを表し、第 3 項は、成膜面の活性化エネルギー E_a によって原料粒子 1 が失うエネルギーを表す。

[0045] S 1 0 7 では、上述した第 1 または第 2 の計算方法を用いることで、原料粒子のマイグレーション位置を計算することができる。

[0046] 続いて、所定量の原料粒子が成膜面に投射されたか否かが判定され (S 1 0 9)、所定量の原料粒子が成膜面に投射された場合 (S 1 0 9 / Y e s)、投射された原料粒子にて形成される膜の様態 (モフォロジーともいう) が計算される (S 1 1 1)。所定量の原料粒子が成膜面に投射されたか否かの判定 (S 1 0 9) は、例えば、単位時間あたりのガスフラックス量 F_0 に膜のモフォロジー等を計算する時間ステップ dt を乗算した値 ($F_0 \times dt$) を投射した原料粒子の数 F_t が超えたか否かで判定されてもよい。

[0047] 膜のモフォロジーの計算 (S 1 1 1) では、投射された原料粒子によって形成される膜の欠陥 (ボイドともいう) に関する情報が計算される。成膜面に投射された原料粒子は、成膜面の表面でマイグレーションするため、原料粒子によって形成された膜は、均一ではなく、不均一に成長している。そのため、原料粒子によって形成された膜は、空隙を有する構造となっている。そこで、膜のモフォロジーの計算 (S 1 1 1) では、S 1 0 7 で計算された原料粒子の成膜面でのマイグレーション位置に基づいて、原料粒子によって形成された膜の構造を計算することにより、膜のボイド幅分布を計算することができる。

- [0048] ここで、図5を参照して、膜のモフォロジーについてより詳細に説明する。図5は、成膜対象5の上の膜3のモフォロジーを二次元ボクセルモデルにて表した説明図である。
- [0049] 図5に示すように、成膜対象5の上の膜3は、成膜面に投射された原料粒子1が成膜面の表面でマイグレーションするため、不均一に成長しており、空隙であるボイド7が形成されている。S111では、膜3のモフォロジーとして、膜3に形成されたボイド7の大きさ、および分布を表すボイド幅分布を計算する。
- [0050] 具体的には、原料粒子の各々のマイグレーション位置に基づいて、各セルの材質（空隙、膜、または成膜対象のいずれであるのか）を表す情報、および他のいずれのセルと隣接しているのかを表す隣接情報を計算することで、図5に示すような膜3のボイド構造を計算する。さらに、直前の計算ステップで計算した成膜面のボイド構造と、計算したボイド構造とを合わせることで、膜3の全体のボイド構造を計算し、膜3のボイド幅分布を計算することができる。
- [0051] 続いて、S111で計算された膜のモフォロジー（例えば、ボイド幅分布）に基づいて、原料粒子によって形成される膜の膜質分布が計算される（S113）。膜質分布とは、具体的には、原料粒子によって形成される膜の密度分布、または欠陥密度分布の少なくともいずれかを表す。例えば、膜の密度または欠陥密度は、S111で計算された膜のボイド幅に基づいて計算することができるため、このような膜の密度または欠陥密度の計算を膜全体について行うことにより、膜の密度分布または欠陥密度分布を計算することができる。
- [0052] 具体的には、膜の密度は、S111で計算された膜のボイドの大きさ、原料粒子の組成、および成膜温度を用いて計算することができる。また、膜の欠陥密度は、S111で計算された膜のボイドの大きさ、原料粒子の組成、成膜温度、ならびに成膜対象に関する情報（材質および形状）を用いることで計算することができる。

- [0053] なお、膜の密度または欠陥密度は、あらかじめ上述した情報を変数とする関数またはデータベースで定義され、上述した情報を代入することで対応する膜の密度または欠陥密度を導出することができるようになっていてもよい。このように、膜の密度または欠陥密度を導出する関数またはデータベースをあらかじめ定義しておくことにより、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法にて実行される計算量を減少させることができる。膜の密度または欠陥密度を導出する関数またはデータベースは、例えば、実測値からの近似、第一原理計算、またはMD計算を用いることで、あらかじめ定義することが可能である。
- [0054] ここで、初期条件で設定した成膜時間が経過したか否かが判定されることで、仮想的な成膜が終了したか否かが判定される（S 1 1 5）。成膜が終了していない場合（S 1 1 5 / N o）、膜の表面の活性化エネルギーが再計算される（S 1 1 7）。
- [0055] 膜の表面の活性化エネルギーの計算（S 1 1 7）では、S 1 1 3で計算された膜の膜質分布に基づいて、膜の表面の活性化エネルギーが再計算される。具体的には、膜の表面の活性化エネルギーは、膜の欠陥密度分布に基づいて変化するパラメータであり、活性化エネルギーは、膜の欠陥密度が高くなるほど高くなる。
- [0056] したがって、所定量の原料粒子が投射されるたびに、成膜された膜の膜質分布を計算し、計算された膜質分布に基づいて、膜の表面の活性化エネルギーの値を更新することにより、成膜面の表面状態をより反映させて原料粒子のマイグレーション位置を計算することができる。これによれば、計算される原料粒子のマイグレーション位置の計算精度を向上させ、膜のボイド構造をより正確に計算することができるため、膜の膜質分布の計算精度を向上させることができる。
- [0057] 仮想的な成膜が終了した場合（S 1 1 5 / Y e s）、原料粒子によって形成される膜全体の透水性が計算される（S 1 1 9）。水分等は、成膜された膜に存在する微小な空隙に入り込むことで膜に浸透する。そのため、成膜さ

れる膜のボイド幅分布を用いることで、成膜される膜の透水性を計算することが可能である。例えば、膜の透水性は、S 1 1 3で計算された膜のボイド幅分布、原料粒子の組成、および成膜温度を用いることで計算することができる。

[0058] 以上にて説明した流れによれば、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、成膜される膜の密度分布、欠陥密度分布、および透水性などの膜質分布を計算することが可能である。また、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、原子1個1個の挙動を解析するのではなく、成膜条件などのマクロパラメータを用いて計算するため、膨大な計算量および時間を必要とすることなく、成膜される膜の膜質を数マイクロメートルの範囲で予測することが可能である。

[0059] また、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、所定の時間ステップにて、膜の表面の活性化エネルギーを再計算し、直前に再計算した活性化エネルギーを用いて、シミュレーションを行う。これによれば、原料粒子のマイグレーション位置の計算に用いる成膜面の活性化エネルギーの精度を向上させることができるため、成膜される膜のボイド構造をより高い精度で予測することができる。

[0060] なお、上記では、原料粒子の種類数は、特に言及しなかったが、原料粒子は、1種でもよく、2種以上であってもよい。例えば、成膜方法がガスを原料とする蒸着方法である場合、原料ガスは、1種であってもよく、2種以上であってもよい。また、成膜方法がスパッタリング法である場合、金属ターゲットを用いる通常のスパッタリング法であってもよく、金属ターゲットと、反応性ガスとを用いる反応性スパッタリング法であってもよい。

[0061] 原料粒子が2種以上である場合、成膜の初期条件には、原料粒子の組成比に関する情報がさらに含まれる。また、原料粒子と成膜面との付着確率、および活性化エネルギーは、原料粒子の種類ごとにそれぞれ値が用意され、各種類の原料粒子は、それぞれ別々に成膜面でのマイグレーション位置が計算される。

[0062] <1. 3. 他のシミュレーションとの連動>

次に、図6を参照して、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法と、他のシミュレーション方法との連動について説明する。図6は、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法と、他のシミュレーション方法との連動の一例を示す説明図である。

[0063] 本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、他のプロセスシミュレーションと連動して実行することにより、複数の製造プロセスにわたって膜の膜質分布を予測することも可能である。具体的には、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、同様の膜モデルを用いたプロセスシミュレーションとの間で、互いに膜モデルに関する情報を引き継ぐことができる。これによれば、膜モデルに関する情報を引き継ぐことにより、成膜面の膜の膜質分布等を考慮してシミュレーションを行うことができるため、加工された膜の膜質分布をより正確に予測することができる。

[0064] 例えば、図3～図5で示したような二次元ボクセルモデルにて膜構造をモデル化したシミュレーション間であれば、図6に示すように、本実施形態に係る成膜シミュレーション（S10）と、エッチングシミュレーション（S20）との間で相互に情報の引き継ぎを行い、膜質分布の計算を行う（S11）ことが可能である。

[0065] これによれば、例えば、エッチング後にエッチング面に成膜を行う場合、成膜される膜の膜質分布の計算において、エッチングによる成膜面へのダメージを考慮することが可能である。また、例えば、成膜後に成膜した膜をエッチングする場合、成膜時の膜の膜質分布から、エッチングによって膜の膜質分布がどのように変化するかを予測することが可能である。

[0066] なお、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法と連動して実行させることが可能なエッチングシミュレーション方法としては、例えば、「Kuboi et al., Journal of Vacuum Science and Technology A 33, 061308 (2015)」に開示されるプラズマエッチングシミュレーション方法を例示する

ことができる。

[0067] さらに、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、エッチングシミュレーション以外にも、例えば、他の成膜シミュレーションと連動して実行させることも可能である。これによれば、成膜される膜の膜質分布の計算において、成膜面の膜の膜質分布を考慮することが可能になる。

[0068] <1. 4. 具体例>

続いて、図7A～図12Bを参照して、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法の第1～第4の具体例について説明する。

[0069] (第1の具体例)

まず、図7A～図8Bを参照して、第1の具体例について説明する。第1の具体例は、CVDを用いてSiNからなる平坦膜を形成する場合の膜のモフォロジーおよび膜質分布を予測する例である。

[0070] まず、以下のように初期条件を設定した。原料ガスとしてSiH₄およびN₂の混合ガスを用い、ガス粒子のフラックスは、 10^{17} 個/cm²・sとした。また、ガス粒子の入射は、[0, 1]の乱数を用いて鉛直下向きから±90°の範囲で等方的とした。さらに、成膜温度は、400Kとし、成膜時間は、10秒とし、成膜面の材質は、SiO₂とした。なお、膜のモフォロジーは、1nmサイズの二次元ボクセルモデルにてモデル化した。

[0071] 初期条件を設定した後、ガス粒子を成膜面に仮想的に投射し、0.1秒の時間ステップにて膜のモフォロジーおよび膜質分布を計算した。また、計算結果に基づいて、成膜面の表面の活性化エネルギーを再計算し、再計算した活性化エネルギーの値を以降のガス粒子のマイグレーション位置の計算に反映させた。

[0072] 図3にて説明した第1の計算方法を用いて、ガス粒子のマイグレーション位置を計算した結果を図7Aおよび図7Bに示す。図7Aおよび図7Bは、図3にて説明した第1の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。なお、図7Aと、図7Bとでは、成膜面への付着確率が異なる。具体的には、図7Aは、付着確率が0.5である場合のシミュレーショ

ン結果であり、図 7 B は、付着確率が 0.9 である場合のシミュレーション結果である。

[0073] 図 7 A および図 7 B に示すように、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法を用いることにより、成膜される S i N 膜のモフォロジーを予測することができた。また、付着確率がより低い図 7 A のほうが、ガス粒子が成膜面の表面に拡散しやすいため、よりボイド幅が小さいモフォロジーを形成することがわかった。また、第 1 原理計算および MD 計算を用いて導出したデータベースを参照することで、S i N 膜のモフォロジーから S i N 膜の膜密度、欠陥密度、および透水性を計算することもできた。

[0074] また、図 4 にて説明した第 2 の計算方法を用いて、ガス粒子のマイグレーション位置を計算した結果を図 8 A および図 8 B に示す。図 8 A および図 8 B は、図 4 にて説明した第 2 の計算方法を用いた場合のシミュレーション結果を示す画像である。なお、図 8 A と、図 8 B とでは、成膜面への付着確率が異なる。具体的には、図 8 A は、付着確率が 0.5 である場合のシミュレーション結果であり、図 8 B は、付着確率が 0.9 である場合のシミュレーション結果である。

[0075] 第 2 の計算方法では、入射したガス粒子は、乱数によって成膜面の表面をマイグレーションし、成膜面の表面を 1 ボクセル移動するごとにエネルギーの出入りが計算された。入射したガス粒子が移動を終了するエネルギーの閾値は、 0.02 eV とし、計算時の活性化エネルギー E_a は、およそ 2 eV となるように計算した。

[0076] 図 8 A および図 8 B に示すように、第 2 の計算方法を用いた場合でも第 1 の計算方法を用いた場合と同様に、成膜される S i N 膜のモフォロジーを予測することができた。また、第 1 の計算方法で計算した結果と同様に、付着確率がより低い図 8 A のほうが、よりボイド幅が小さいモフォロジーを形成することがわかった。さらに、第 1 の計算方法と同様に、第 1 原理計算および MD 計算を用いて導出したデータベースを参照することで、S i N 膜のモフォロジーから S i N 膜の膜密度、欠陥密度、および透水性を計算すること

もできた。

[0077] このように、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法によれば、成膜条件に関する情報、および成膜面に関する条件を用いて、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質を予測することが可能である。また、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、上述のSiNに限られず、SiO₂、DLC (Diamond Like Carbon) 膜などの他の膜種についても同様に、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質を予測することが可能である。

[0078] (第2の具体例)

続いて、図9を参照して、第2の具体例について説明する。第2の具体例は、微細構造が形成された成膜面に膜を形成する場合の膜のモフォロジーおよび膜質分布を予測する例である。図9は、微細構造が形成された成膜面に対する成膜を説明する説明図である。

[0079] まず、以下のように初期条件を設定した。原料ガスとして、SiH₄およびN₂の混合ガス、またはTEOS (tetraethyl orthosilicate: Si(OC₂H₅)₄) ガスを用い、ガス粒子のフラックスは、10¹⁷個/cm²・sとした。また、ガス粒子の入射は、[0, 1]の乱数を用いて鉛直下向きから±90°の範囲で等方的とした。さらに、成膜温度は、400Kとし、成膜時間は、10秒とした。また、図9に示すように、成膜対象51の成膜面には、幅200nm、深さ500nmのトレンチ53が設けられている。なお、成膜対象51の材質は、Siとした。

[0080] 膜のモフォロジーは、1nmサイズの二次元ボクセルモデルにてモデル化し、第1の具体例と同様の方法で計算することによって、第1の具体例と同様に、トレンチ53が設けられた成膜対象51に成膜される膜のモフォロジー、および膜質分布を計算することができた。

[0081] (第3の具体例)

次に、図10を参照して、第3の具体例について説明する。第3の具体例は、異方性を有する成膜方法にて成膜面に膜を形成する場合の膜のモフォロ

ジーおよび膜質分布を予測する例である。図10は、異方性を有する成膜方法を説明する説明図である。

[0082] 図10に示すように、異方性を有する成膜方法では、原料粒子1は、所定の傾向を有する入射方向で成膜対象5に入射し、膜3を形成する。例えば、成膜面の垂直方向を中心として、ガウシアン分布を有する入射方向で原料粒子1を成膜面に投射してもよい。なお、原料粒子1の入射方向の異方性は、成膜面の垂直方向に限定されず、成膜面に対して傾斜した斜め方向であってもよい。また、原料粒子1の入射方向が有する分布は、ガウシアン分布以外の分布であってもよい。

[0083] このような異方性を有する成膜方法とは、例えば、抵抗加熱蒸着法、電子ビーム蒸着法、分子線エピタキシー法、イオンプレーティング法、およびスパッタリング法などの物理蒸着法（Physical Vapor Deposition: PVD）を例示することができる。原料粒子1の入射方向は、例えば、原料粒子1の供給源と、成膜対象5との位置関係によって制御することが可能である。

[0084] このような場合であっても、本実施形態に係る成膜シミュレーション方法によれば、第1の具体例と同様の計算方法を用いることで、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布を計算することができた。

[0085] （第4の具体例）

続いて、図11～図12Bを参照して、第4の具体例について説明する。第4の具体例は、エッチングシミュレーションと成膜シミュレーションとを連動させ、エッチングによる成膜面へのダメージを考慮した上で、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布を予測する例である。図11は、エッチングシミュレーションと成膜シミュレーションとの連動の流れを説明するフローチャート図である。図12Aおよび図12Bは、エッチングシミュレーションのシミュレーション結果を示す画像である。

[0086] 図11に示すように、第4の具体例では、エッチングシミュレーション（S20）後に、シミュレーションの結果データが成膜シミュレーションに引

き渡される（S 3 1）。ここで、引き渡されたデータから、エッチング後の成膜面のモフォロジーおよび膜質分布（例えば、欠陥密度分布など）を抽出することで、成膜面の初期構造が設定される（S 3 3）。成膜シミュレーションでは、設定された成膜面の初期構造に加えて、成膜の初期条件を設定することにより、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布を計算する（S 1 0）。

[0087] このような第4の具体例によれば、例えば、図12Aに示すように、MOS（Metal-Oxide-Semiconductor）トランジスタにおいて、Si層およびSiO₂層上に成膜されたSiN層をエッチングし、サイドウォール加工を行った後に、SiO₂を成膜する際に、成膜されるSiO₂のモフォロジーおよび膜質分布をより正確に予測することができる。

[0088] 具体的には、エッチングによって成膜面は、ダメージを受け、欠陥が増加している。また、エッチングダメージは、成膜面の材質ごとに異なる。例えば、図12Bに示すように、SiNで形成される斜面部のサイドウォールは、エッチングによるダメージが小さく、欠陥密度が低い、SiO₂で形成される上面および底面は、エッチングによるダメージが大きく、欠陥密度が高くなる。成膜面の欠陥密度が異なる場合、活性化エネルギーも異なる。したがって、成膜面の欠陥密度をエッチングシミュレーションから受け取り、成膜面の欠陥密度を考慮に入れて成膜シミュレーションを行うことにより、成膜面に形成される膜のモフォロジーおよび膜質分布をより正確に計算することができる。

[0089] なお、第4の具体例とは逆に、成膜シミュレーションからエッチングシミュレーションにシミュレーション結果を受け渡すことも可能である。このような場合、成膜による膜質の違いを考慮することで、エッチングの進行の度合などをより正確に予測することができる。

[0090] <<2. 第2の実施形態>>

<2. 1. 概略>

次に、図13を参照して、本開示の第2の実施形態に係るプログラムの概

略について説明する。図13は、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置を説明する説明図である。

[0091] 本実施形態に係るプログラムは、上述した第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を実行するプログラムである。本実施形態に係るプログラムは、例えば、図13で示す情報処理装置100A、または情報処理装置100Aおよび情報処理サーバ100Bからなるシステムによって実行される。

[0092] 本実施形態に係るプログラムは、第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法の計算を実行する演算エンジンがプログラミングされたソフトウェアである。本実施形態に係るプログラムは、例えば、C、C++、Fortran、またはJAV A（登録商標）などのプログラミング言語にてプログラミングされてもよい。また、本実施形態には、第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法の計算を実行する演算エンジンがプログラミングされたソフトウェア（またはコンピュータプログラム）を記憶させた記憶媒体も含まれるものとする。

[0093] 本実施形態に係るプログラムは、例えば、コンピュータ等の情報処理装置100Aにて実行されてもよい。

[0094] また、本実施形態に係るプログラムは、例えば、情報処理装置100A、および情報処理サーバ100Bの協働によって実行されてもよい。このような場合、本実施形態に係るプログラムにて計算量が多い処理を、より演算能力が高い情報処理サーバ100Bで実行させることにより、成膜シミュレーションの実行速度を向上させることができる。

[0095] なお、情報処理装置100Aと情報処理サーバ100Bとを接続するネットワーク11は、インターネットなどの公衆回線網であってもよく、LAN（Local Area Network）などの限られた狭い範囲をカバーするネットワークであってもよい。また、ネットワーク11は、情報処理装置100Aと、情報処理サーバ100Bとを接続することができれば、有線のネットワークであってもよく、無線のネットワークであってもよい。

[0096] <2. 2. 成膜シミュレーション装置の構成例>

続いて、図14を参照して、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置の構成例について説明する。図14は、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置の機能構成を示したブロック図である。なお、図14では、図13の情報処理装置100Aと、図13の情報処理装置100Aおよび情報処理サーバ100Bからなるシステムとをまとめて情報処理装置100として説明する。

[0097] 図14に示すように、情報処理装置100は、入力部101と、入射演算部103と、マイグレーション演算部105と、モフォロジー演算部107と、膜質演算部109と、エネルギー演算部111と、透水性演算部113と、出力部115と、を備える。なお、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置100の実行プラットフォームは、Windows（登録商標）、Linux（登録商標）、Unix（登録商標）、Mac OS（登録商標）、またはOS X（登録商標）など、いずれであってもよい。

[0098] 入力部101は、成膜シミュレーションにおいて、成膜の初期条件の入力を受け付け、入力された成膜の初期条件を入射演算部103に受け渡す。具体的には、入力部101には、成膜条件、成膜装置、計算に用いる各種パラメータ、成膜面の構造データ、および成膜する膜厚などの情報が入力される。入力部101は、例えば、表示装置に表示されたGUI（Graphical User Interface）などであってもよい。また、GUIの構成言語は、OpenGL（登録商標）、Motif、またはtcI/tkなど、いずれであってもよい。

[0099] 入射演算部103は、入力された成膜条件に基づいて、成膜面に入射する原料粒子のフラックス（すなわち、単位時間および単位面積当たりの入射数）を計算する。具体的には、入射演算部103は、入射ガスの流量、成膜圧力、および成膜面のバイアス電圧などに基づいて、成膜面に入射する原料粒子の単位時間および単位面積当たりの数を計算する。また、入射演算部103は、原料粒子の入射方向が等方的か、異方的かを判断し、原料粒子の入射

方向を決定する。

[0100] マイグレーション演算部 105 は、成膜面に付着した原料粒子がマイグレーションした後、最終的に付着する位置を計算する。具体的には、マイグレーション演算部 105 は、成膜面に投射した原料粒子が成膜面に付着するかどうかを判定し、成膜面に付着した原料粒子のマイグレーション位置を計算する。マイグレーション演算部 105 が実行する具体的な計算方法については、第 1 の実施形態にて詳述したので、ここでの説明は省略する。

[0101] モフォロジー演算部 107 は、成膜面に投射された原料粒子にて形成される膜のモフォロジーを計算する。具体的には、モフォロジー演算部 107 は、所定量の原料粒子が成膜面に投射された場合、投射された原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、成膜された膜のモフォロジーを計算する。モフォロジー演算部 107 が実行する具体的な計算方法については、第 1 の実施形態にて詳述したので、ここでの説明は省略する。

[0102] 膜質演算部 109 は、膜のモフォロジーに基づいて、成膜された膜の膜質分布を計算する。具体的には、膜質演算部 109 は、モフォロジー演算部 107 によって計算された膜のモフォロジーに基づいて、原料粒子によって形成される膜の密度分布、または欠陥密度分布の少なくともいずれかを計算する。膜質演算部 109 が実行する具体的な計算方法については、第 1 の実施形態にて詳述したので、ここでの説明は省略する。

[0103] エネルギー演算部 111 は、成膜された膜の膜質分布に基づいて、成膜された膜の表面の活性化エネルギーを再計算する。具体的には、エネルギー演算部 111 は、膜質演算部 109 によって計算された膜の欠陥密度分布を用いて、成膜面に投射された所定量の原料粒子によって形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算する。なお、計算された活性化エネルギーは、マイグレーション演算部 105 に入力され、以降の原料粒子のマイグレーション位置の計算に用いられる。エネルギー演算部 111 が実行する具体的な計算方法については、第 1 の実施形態にて詳述したので、ここでの説明は省略する。

[0104] 透水性演算部 113 は、成膜された膜の膜質分布に基づいて、成膜された膜の透水性を計算する。具体的には、透水性演算部 113 は、仮想的な成膜が終了した後、膜質演算部 109 によって計算された膜の膜質分布（例えば、ボイド幅分布）を用いて、成膜された膜の透水性を計算する。透水性演算部 113 が実行する具体的な計算方法については、第 1 の実施形態にて詳述したので、ここでの説明は省略する。

[0105] 出力部 115 は、計算された膜のモフォロジーおよび膜質分布を出力する。具体的には、出力部 115 は、膜のモフォロジーおよび膜質分布などの計算結果をデータファイルとして出力してもよく、計算結果を GUI などの画像などで可視化して出力してもよい。GUI の構成言語は、OpenGL、Motif、または tc / tk など、いずれも使用することが可能である。また、出力部 115 は、計算された膜のモフォロジーおよび膜質分布の出力を計算終了後にまとめて出力してもよく、計算中にリアルタイムで出力してもよい。

[0106] 情報処理装置 100 は、本実施形態に係るプログラムを実行することにより、上述した機能を実現することが可能であり、成膜される膜の膜質分布を数マイクロメートルの範囲で予測することが可能である。

[0107] <2. 3. ハードウェア構成>

次に、図 15 を参照して、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置のハードウェア構成について説明する。本実施形態に係るプログラムは、図 15 で示すようなハードウェアと協働することにより、図 14 で示した機能構成を実現し、第 1 の実施形態で説明した成膜シミュレーション方法を実行することができる。図 15 は、本実施形態に係るプログラムを実行する情報処理装置のハードウェア構成例を示したブロック図である。

[0108] 図 15 に示すように、情報処理装置 100 は、CPU (Central Processing Unit) 151 と、ROM (Read Only Memory) 153 と、RAM (Random Access Memory) 155 と、ブリッジ 161 と、内部バス 157 および 159 と、イ

インタフェース 163 と、入力装置 165 と、出力装置 167 と、ストレージ装置 169 と、ドライブ 171 と、接続ポート 173 と、通信装置 175 と、を備える。

[0109] CPU 151 は、演算処理装置および制御装置として機能し、ROM 153 等に記憶された各種プログラム（本実施形態に係るプログラム等）に従って、情報処理装置 100 の動作全般を制御する。ROM 153 は、CPU 151 が使用するプログラム、演算パラメータを記憶し、RAM 155 は、CPU 151 の実行において使用するプログラムや、その実行において適宜変化するパラメータ等を一時記憶する。例えば、CPU 151 は、入射演算部 103、マイグレーション演算部 105、モフォロジー演算部 107、膜質演算部 109、エネルギー演算部 111、および透水性演算部 113 等の機能を実行してもよい。

[0110] これら CPU 151、ROM 153 および RAM 155 は、ブリッジ 161、内部バス 157 および 159 等により相互に接続されている。また、CPU 151、ROM 153 および RAM 155 は、インタフェース 163 を介して入力装置 165、出力装置 167、ストレージ装置 169、ドライブ 171、接続ポート 173 および通信装置 175 とともに接続されている。

[0111] 入力装置 165 は、タッチパネル、キーボード、マウス、ボタン、マイクロフォン、スイッチおよびレバーなどの各種情報が入力される入力手段を含む。また、入力装置 165 は、入力または測定された情報に基づいて入力信号を生成し、CPU 151 に出力するための入力制御回路なども含む。例えば、入力装置 165 は、入力部 101 の機能を実行してもよい。

[0112] 出力装置 167 は、例えば、CRT (Cathode Ray Tube) 装置、液晶表示装置および有機エレクトロルミネッセンス表示装置などの表示装置を含み、また、スピーカおよびヘッドフォンなどの音声出力装置を含む。例えば、出力装置 167 は、出力部 115 等の機能を実行してもよい。

[0113] ストレージ装置 169 は、情報処理装置 100 の記憶部の一例として構成

されるデータ格納用の装置である。ストレージ装置 169 は、記憶媒体、記憶媒体にデータを記憶する記憶装置、記憶媒体からデータを読み出す読み出し装置、および記憶されたデータを削除する削除装置を含んでもよい。

[0114] ドライブ 171 は、記憶媒体用リードライタであり、情報処理装置 100 に内蔵、または外付けされる。例えば、ドライブ 171 は、装着されている磁気ディスク、光ディスク、光磁気ディスク、または半導体メモリ等のリムーバブル記憶媒体に記憶されている情報を読み出し、RAM 153 に出力する。また、ドライブ 171 は、リムーバブル記憶媒体に情報を書き込むことも可能である。

[0115] 接続ポート 173 は、例えば、USB (Universal Serial Bus) ポート、イーサネット (登録商標) ポート、IEEE 802.11 規格ポート、および光オーディオ端子等のような外部接続機器を接続するための接続ポートで構成された接続インタフェースである。

[0116] 通信装置 175 は、例えば、ネットワーク 11 に接続するための通信デバイス等で構成された通信インタフェースである。また、通信装置 175 は、有線によるケーブル通信を行うケーブル通信装置であってもよく、有線または無線 LAN 対応通信装置であってもよい。

[0117] 以上にて説明したように、本実施形態に係るプログラムによれば、第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を演算処理装置によって実行させることが可能である。

[0118] <<3. 第 3 の実施形態>>

<3. 1. 概略>

続いて、図 16 を参照して、本開示の第 3 の実施形態に係る半導体加工システムの概略について説明する。図 16 は、本実施形態に係る半導体加工システムの概略を説明する説明図である。

[0119] 図 16 に示すように、本実施形態に係る半導体加工システムは、半導体加工装置 300 と、第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を実行可能な情報処理装置 200A、または情報処理装置 200A および情報処理サ

ーバ200Bからなるシステムと、を含む。本実施形態に係る半導体加工システムは、上述した第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を用いて、所望の膜質分布を有する膜が成膜できるように、適宜、成膜条件を補正する半導体加工システムである。

[0120] 半導体加工装置300は、成膜装置である。例えば、半導体加工装置300は、容量結合プラズマ（Capacitively Coupled Plasma：CCP）などによってプラズマを発生させ、CVDまたはPVDによって、半導体に成膜する成膜装置であってもよい。

[0121] 情報処理装置200Aは、例えば、コンピュータ等であり、第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を実行する。また、情報処理装置200Aは、第1の実施形態に係る成膜シミュレーション方法の演算の一部を情報処理サーバ200Bに実行させてもよい。このような場合、計算量が多い処理をより演算能力が高い情報処理サーバ200Bで実行させることにより、成膜シミュレーションの実行速度を向上させることができる。なお、情報処理装置200Aと情報処理サーバ200Bとを接続するネットワーク11は、第2の実施形態で説明したものと同様であるのでここでの説明は省略する。

[0122] <3. 2. 半導体加工システムの構成例>

次に、図17を参照して、本実施形態に係る半導体加工システムの構成例について説明する。図17は、本実施形態に係る半導体加工システムの機能構成を示したブロック図である。なお、図17では、図16の情報処理装置200Aと、図16の情報処理装置200Aおよび情報処理サーバ200Bからなるシステムとをまとめて情報処理装置200として説明する。

[0123] 図17に示すように、半導体加工装置300は、加工部301と、センサ部303と、制御部305とを備える。また、情報処理装置200は、入射演算部203と、マイグレーション演算部205と、モフォロジー演算部207と、膜質演算部209と、補正判断部215と、加工停止部217と、を備える。

[0124] (半導体加工装置 300)

加工部 301 は、成膜が行われる加工チャンバである。例えば、加工部 301 は、高真空下でプラズマ等にて原料ガスを電離し、電離させた原料ガス粒子を成膜対象に投射することによって成膜対象を成膜する。ただし、加工部 301 の成膜方法は、第 1 の実施形態で説明したような原料粒子を投射して成膜する方法であれば、特に限定されない。

[0125] センサ部 303 は、加工部 301 での成膜の状態に関する情報を取得する。具体的には、センサ部 303 は、加工部 301 に備えられたセンサ類が測定した加工部 301 の内部の雰囲気の状態、および成膜対象の状態に関する情報を測定し、測定した情報を情報処理装置 200 へ受け渡す。例えば、加工部 301 に備えられたセンサ類は、発光分析器 (Optical Emission Spectrometry: OES)、質量分析計 (Quadrupole Spectrometry: QMS)、吸収分光分析器 (Infrared Laser Absorption Spectroscopy: IRLAS)、またはエネルギー分光アナライザなどであってもよい。また、センサ部 303 による測定結果のサンプリングは、例えば、0.1 秒ごとに行われてもよい。

[0126] 制御部 305 は、加工部 301 での成膜条件を制御する。具体的には、制御部 305 は、情報処理装置 200 から成膜条件を補正する補正条件を受信した場合、受信した補正条件に基づいて、加工部 301 での成膜条件を制御する。また、制御部 305 は、情報処理装置 200 から加工停止指示を受信した場合、加工部 301 での成膜を停止させる。制御部 305 によれば、情報処理装置 200 での成膜シミュレーション結果を加工部 301 へ反映することができる。

[0127] (情報処理装置 200)

入射演算部 203 は、センサ部 303 が測定した成膜の状態に関する情報に基づいて、成膜面に入射する原料粒子のフラックス（すなわち、単位時間および単位面積当たりの入射数）を計算する。具体的には、入射演算部 20

3は、加工部301の内部の雰囲気の状態に関する情報に基づいて、成膜面に入射する原料粒子のフラックスを計算する。例えば、成膜方法がCVDである場合、入射演算部203は、加工部301のチャンバ内へのガス流量、およびプラズマの状態を用いて、成膜面に入射する原料粒子のフラックスを計算してもよい。

[0128] エネルギー演算部211は、センサ部303が測定した成膜の状態に関する情報に基づいて、成膜面の表面の活性化エネルギーを計算する。具体的には、エネルギー演算部211は、成膜対象の状態に関する情報に、成膜面の表面の活性化エネルギーを計算する。また、エネルギー演算部211は、後段の膜質演算部209によって成膜される膜の膜質分布が計算された場合、計算された膜の膜質分布に基づいて、成膜面の表面の活性化エネルギーを再計算する。これにより、情報処理装置200は、成膜面の表面の活性化エネルギーを成膜の進行に伴って再計算し、更新することができるため、より正確に膜質分布を予測することができる。

[0129] マイグレーション演算部205、モフォロジー演算部207、および膜質演算部215は、第2の実施形態にて説明したマイグレーション演算部105、モフォロジー演算部107、および膜質演算部115と実質的に同様であるので、個々での説明は省略する。なお、マイグレーション演算部205、モフォロジー演算部207、および膜質演算部215は、センサ部303が測定した加工部301内の成膜状態に基づいて、成膜される膜のモフォロジーおよび膜質分布を計算する点が第2の実施形態と異なる。

[0130] 補正判断部215は、膜質演算部209が計算した膜の膜質分布と、所望の膜質分布とを比較することで、成膜条件に対する補正の必要の有無を判断し、成膜条件を補正する場合、補正条件を判断する。具体的には、加工部301の内部の成膜状態に基づいて予測した膜の膜質分布が、所望の膜質分布と異なる場合、補正判断部215は、成膜される膜の膜質分布を所望の膜質分布に近づけるための補正条件を判断する。例えば、成膜方法がCVDであり、予測した膜の欠陥数が所望の欠陥数 (3×10^{10} 個/cm²) から50%

以上増加する場合、補正判断部 215 は、原料ガスの流量、成膜圧力、成膜温度、成膜パワー等の順で成膜条件を $\pm 50\%$ ずつ変動させて、再度、マイグレーション演算部 205、モフォロジー演算部 207、および膜質演算部 215 に膜質分布の計算を実行させる。これにより、補正判断部 215 は、欠陥数が所望の欠陥数以下となる補正条件を判断する。

[0131] なお、成膜時間が短いため、成膜条件を変動させてそれぞれ成膜シミュレーションを行い、補正条件を判断することが困難な場合、情報処理装置 200 は、例えば、様々な成膜条件に対して摂動計算を行ったデータベースをあらかじめ用意しておいてもよい。補正判断部 215 は、該データベースを検索することで、補正条件として適切な条件をデータベースから抽出することができる。

[0132] 補正判断部 215 によって判断された補正条件は、半導体加工装置 300 の制御部 305 に送信されることにより、加工部 301 での成膜に反映される。

[0133] 加工停止部 217 は、所望の膜質分布を有する膜を成膜することができないと判断された場合、半導体加工装置 300 における成膜を停止させる。具体的には、膜質演算部 209 が計算した膜の膜質分布が所望の膜質分布と大きく異なり、所望の膜質分布を成膜するための補正条件を見いだせないと補正判断部 215 が判断した場合、加工停止部 217 は、半導体加工装置 300 における成膜を停止させる。加工停止部 217 は、例えば、FDC/EE S (Fault Detection and Classification/Equipment Engineering System) などであってもよい。加工停止部 217 によれば、所望の膜質分布を有する膜が成膜できない場合、早期に半導体加工装置 300 を停止させることによって、エラーに対する対処を早期に行うことができる。また、所望の膜質分布を有する膜を成膜するための成膜条件の探索効率を向上させることができる。

[0134] 本実施形態に係る半導体加工システムによれば、所望の膜質を有する膜を形成するための成膜またはエッチング等の加工条件を効率良く構築すること

が可能である。なお、上記では、本実施形態は、半導体加工装置 300 と、情報処理装置 200 とからなるシステムとして説明したが、本開示に係る技術は、かかる例示に限定されない。例えば、本実施形態は、半導体加工装置 300 と、情報処理装置 200 とが一体化した半導体加工装置であってもよい。

[0135] <<4. まとめ>>

以上にて詳述したように、本開示の第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法によれば、成膜条件および成膜面の条件を反映させつつ、マイクロメートルの領域範囲で、膜の密度分布、欠陥密度分布、および透水性などの膜質分布を予測することが可能である。

[0136] また、本開示の第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、時間ステップごとに、膜質分布に基づいて活性化エネルギーを再計算し、成膜中の膜質分布の変化を原料粒子のマイグレーション位置の計算に反映させることができる。したがって、本開示の第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法によれば、成膜される膜のモフォロジーの計算精度を向上させることができる。

[0137] また、同じモデルを用いたエッチングシミュレーションと連動させることにより、本開示の第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法は、成膜からエッチング、またはエッチングから成膜という一連のプロセスでの膜質分布の予測を行うことができる。

[0138] また、本開示の第 2 の実施形態に係るプログラムによれば、本開示の第 1 の実施形態に係る成膜シミュレーション方法を情報処理装置によって演算処理させることにより、膜質分布の予測を効率的に実行することが可能である。

[0139] さらに、本開示の第 3 の実施形態に係る半導体加工システムによれば、所望の膜質を有する膜を形成するための成膜またはエッチング等の加工条件を効率良く構築することが可能である。

[0140] 以上、添付図面を参照しながら本開示の好適な実施形態について詳細に説

明したが、本開示の技術的範囲はかかる例に限定されない。本開示の技術分野における通常の知識を有する者であれば、特許請求の範囲に記載された技術的思想の範疇内において、各種の変更例または修正例に想到し得ることは明らかであり、これらについても、当然に本開示の技術的範囲に属するものと了解される。

[0141] また、本明細書に記載された効果は、あくまで説明的または例示的なものであって限定的ではない。つまり、本開示に係る技術は、上記の効果とともに、または上記の効果に代えて、本明細書の記載から当業者には明らかな他の効果を奏しうる。

[0142] なお、以下のような構成も本開示の技術的範囲に属する。

(1)

演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、

所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置を計算するたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算することと、を含み、

前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーが用いられる、成膜シミュレーション方法。

(2)

前記膜の欠陥に関する情報は、前記原料粒子にて形成される膜のボイド幅分布を表す情報を少なくとも含む、前記(1)に記載の成膜シミュレーション方法。

(3)

前記原料粒子は、前記成膜面に所定の確率にて付着し、

付着した前記原料粒子に対して前記成膜面上でのマイグレーション位置が

計算される、前記（１）または（２）に記載の成膜シミュレーション方法。

（４）

前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、成膜条件に関する情報がさらに用いられる、前記（１）～（３）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（５）

前記原料粒子は、２種以上であり、

前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、前記原料粒子の種類ごとに独立した前記活性化エネルギーが用いられる、前記（１）～（４）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（６）

前記原料粒子は、等方的または異方的に前記成膜面に入射する、前記（１）～（５）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（７）

前記原料粒子は、四角形、円形、球形、または立方体形のいずれかの形状でモデル化される、前記（１）～（６）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（８）

前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子の前記成膜面への付着位置から所定の領域内にてモンテカルロ法を用いることで計算される、前記（１）～（７）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（９）

前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子の前記成膜面への付着位置から最近接の凹形状を有する表面位置である、前記（８）に記載の成膜シミュレーション方法。

（１０）

前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子をランダムに移動させた際に、前記原料粒子が有するエネルギーが閾値以下となる位置である

、前記（１）～（７）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（１１）

前記原料粒子は、移動ごとに、成膜温度に基づくエネルギーを得ると共に、移動した位置の前記活性化エネルギーに基づくエネルギーを失う、前記（１０）に記載の成膜シミュレーション方法。

（１２）

コンピュータを

成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、

前記マイグレーション演算部によって、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、
として機能させ、

前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、プログラム。

（１３）

成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、

所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の

表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、
を備え、

前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、半導体加工システム。

(14)

成膜状態を計測するセンサ部と、

前記センサ部にて計測された情報を用いて計算される膜の膜質と、所望の膜質との差に基づいて、成膜条件を補正する補正条件を判断する補正判断部と、

前記補正条件に基づいて、前記成膜条件を制御する制御部と、
をさらに備える、前記(13)に記載の半導体加工システム。

(15)

前記補正判断部が前記補正条件を判断できない場合、成膜を停止させる加工停止部をさらに備える、前記(14)に記載の半導体加工システム。

(16)

演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、

前記原料粒子の各々のマイグレーション位置に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の膜質分布を計算することと、

を含む、成膜シミュレーション方法。

(17)

前記膜質分布は、前記膜の密度分布、または前記膜の欠陥の密度分布のいずれかを少なくとも含む、前記(16)に記載の成膜シミュレーション方法。

(18)

前記膜質分布は、あらかじめ設定された関数またはデータベースを用いて計算される、前記（１６）または（１７）に記載の成膜シミュレーション方法。

（１９）

前記原料粒子は、２種以上であり、

前記原料粒子に関する情報は、前記原料粒子の組成比である、前記（１６）～（１８）のいずれか一項に記載の成膜シミュレーション方法。

（２０）

演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、

前記原料粒子の各々のマイグレーション位置に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、成膜される膜全体のボイド幅分布を計算することと、

前記ボイド幅分布に基づいて、成膜される膜全体の透水性を計算することと、

を含む、成膜シミュレーション方法。

（２１）

前記原料粒子は、２種以上であり、

前記透水性は、前記原料粒子の組成比、および成膜温度にさらに基づいて計算される、前記（２０）に記載の成膜シミュレーション方法。

符号の説明

[0143]	1	原料粒子
	3	膜
	5	成膜対象
	7	ボイド
	100、200	情報処理装置

1 0 1	入力部
1 0 3、2 0 3	入射演算部
1 0 5、2 0 5	マイグレーション演算部
1 0 7、2 0 7	モフォロジー演算部
1 0 9、2 0 9	膜質演算部
1 1 1、2 1 1	エネルギー演算部
1 1 3	透水性演算部
1 1 5	出力部
2 1 5	補正判断部
2 1 7	加工停止部
3 0 0	半導体加工装置
3 0 1	加工部
3 0 3	センサ部
3 0 5	制御部

請求の範囲

- [請求項1] 演算装置を用いて、成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算することと、
- 所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置を計算するたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算することと、
- 前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算することと、を含み、
- 前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーが用いられる、成膜シミュレーション方法。
- [請求項2] 前記膜の欠陥に関する情報は、前記原料粒子にて形成される膜のポイド幅分布を表す情報を少なくとも含む、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項3] 前記原料粒子は、前記成膜面に所定の確率にて付着し、
- 付着した前記原料粒子に対して前記成膜面上でのマイグレーション位置が計算される、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項4] 前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、成膜条件に関する情報がさらに用いられる、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項5] 前記原料粒子は、2種以上であり、
- 前記原料粒子の各々のマイグレーション位置の計算には、前記原料粒子の種類ごとに独立した前記活性化エネルギーが用いられる、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項6] 前記原料粒子は、等方的または異方的に前記成膜面に入射する、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。

- [請求項7] 前記原料粒子は、四角形、円形、球形、または立方体形のいずれかの形状でモデル化される、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項8] 前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子の前記成膜面への付着位置から所定の領域内にてモンテカルロ法を用いることで計算される、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項9] 前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子の前記成膜面への付着位置から最近接の凹形状を有する表面位置である、請求項8に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項10] 前記原料粒子のマイグレーション位置は、前記原料粒子をランダムに移動させた際に、前記原料粒子が有するエネルギーが閾値以下となる位置である、請求項1に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項11] 前記原料粒子は、移動ごとに、成膜温度に基づくエネルギーを得ると共に、移動した位置の前記活性化エネルギーに基づくエネルギーを失う、請求項10に記載の成膜シミュレーション方法。
- [請求項12] コンピュータを
- 成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、
- 前記マイグレーション演算部によって、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、
- 前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、
- として機能させ、
- 前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、プログラム。

[請求項13] 成膜面の表面の活性化エネルギーに基づいて、前記成膜面に入射する原料粒子の各々が前記成膜面上でマイグレーションする位置を計算するマイグレーション演算部と、

所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置が計算されるたびに、所定量の前記原料粒子のマイグレーション位置に基づいて、前記成膜面上に前記原料粒子にて形成される膜の欠陥に関する情報を計算するモフォロジー演算部と、

前記膜の欠陥に関する情報に基づいて、前記原料粒子にて形成される膜の表面の活性化エネルギーを計算するエネルギー演算部と、
を備え、

前記マイグレーション演算部は、前記エネルギー演算部によって直前に計算された膜の表面の活性化エネルギーを用いる、半導体加工システム。

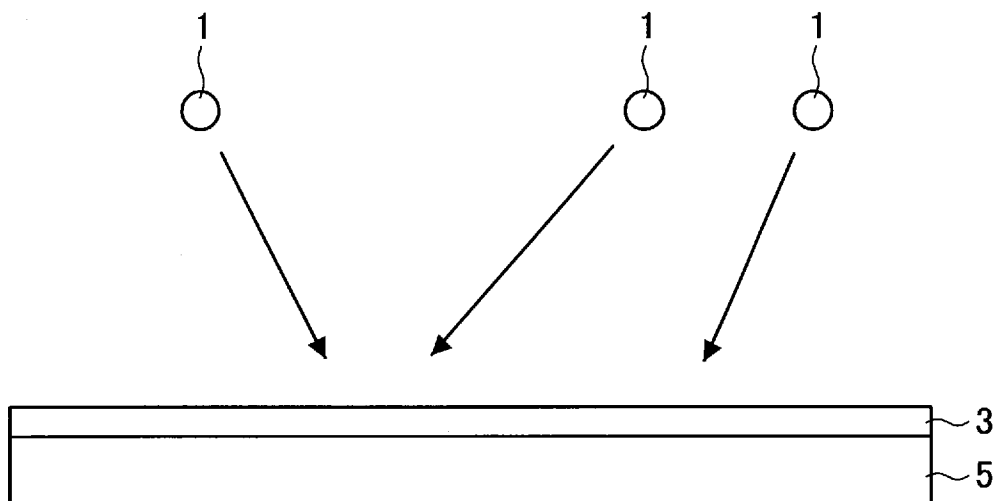
[請求項14] 成膜状態を計測するセンサ部と、

前記センサ部にて計測された情報を用いて計算される膜の膜質と、所望の膜質との差に基づいて、成膜条件を補正する補正条件を判断する補正判断部と、

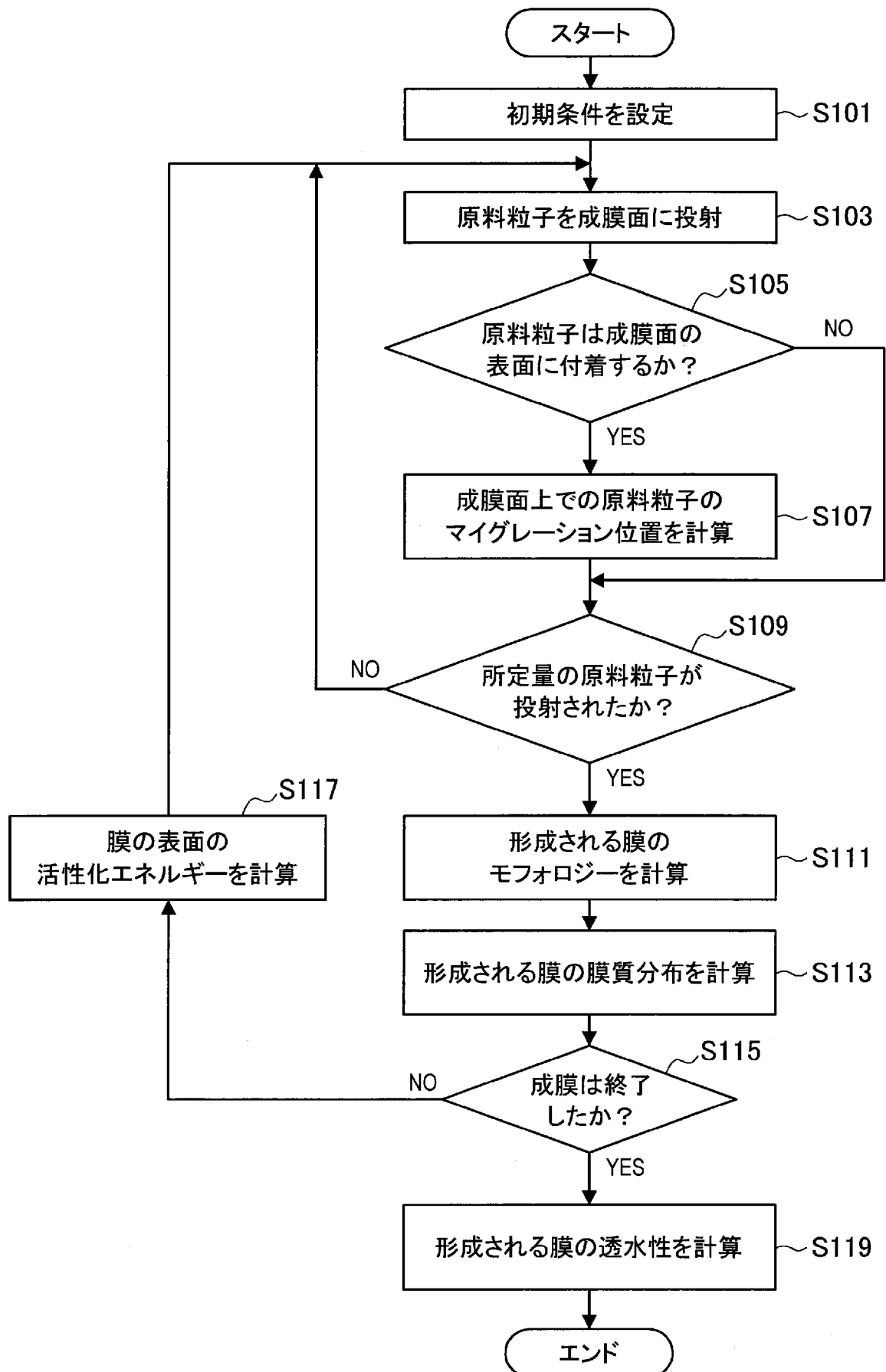
前記補正条件に基づいて、前記成膜条件を制御する制御部と、
をさらに備える、請求項13に記載の半導体加工システム。

[請求項15] 前記補正判断部が前記補正条件を判断できない場合、成膜を停止させる加工停止部をさらに備える、請求項14に記載の半導体加工システム。

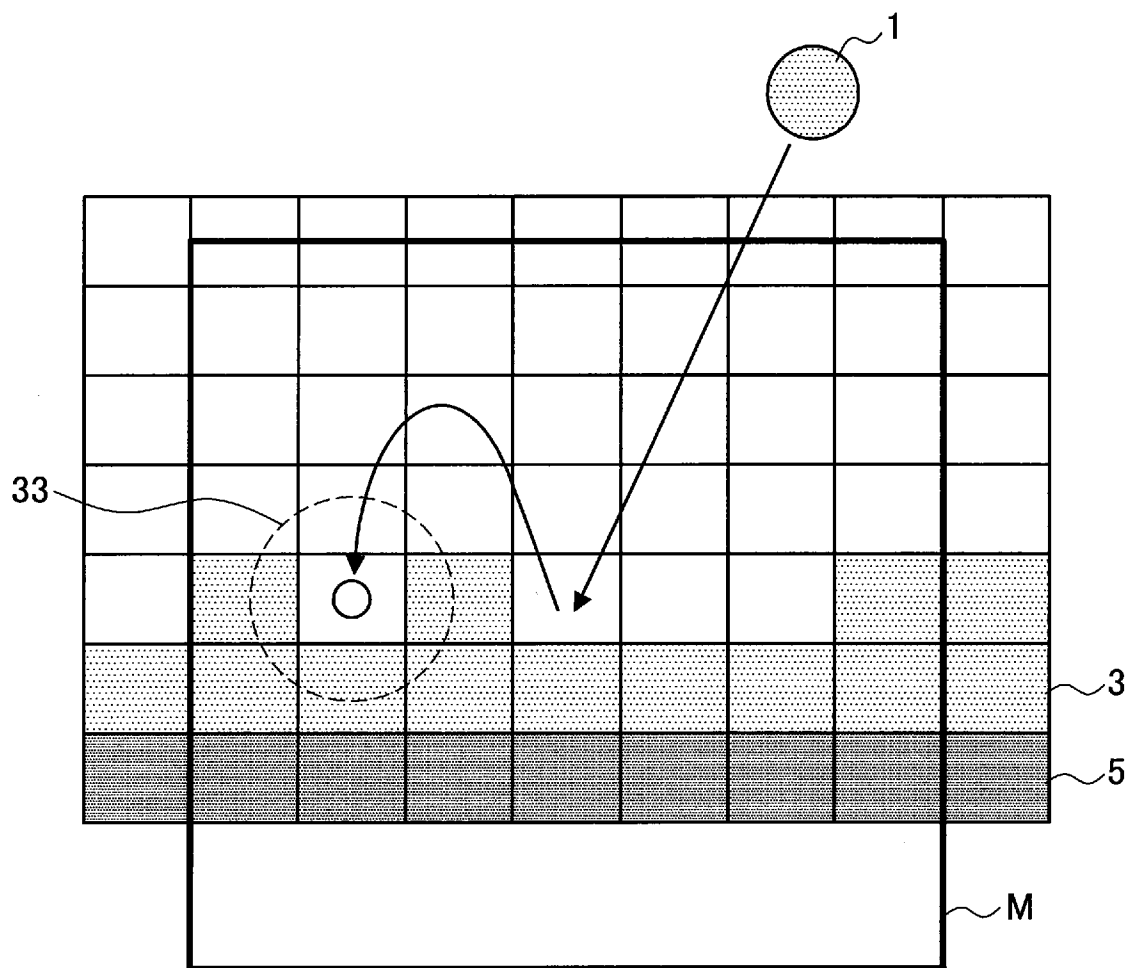
[図1]



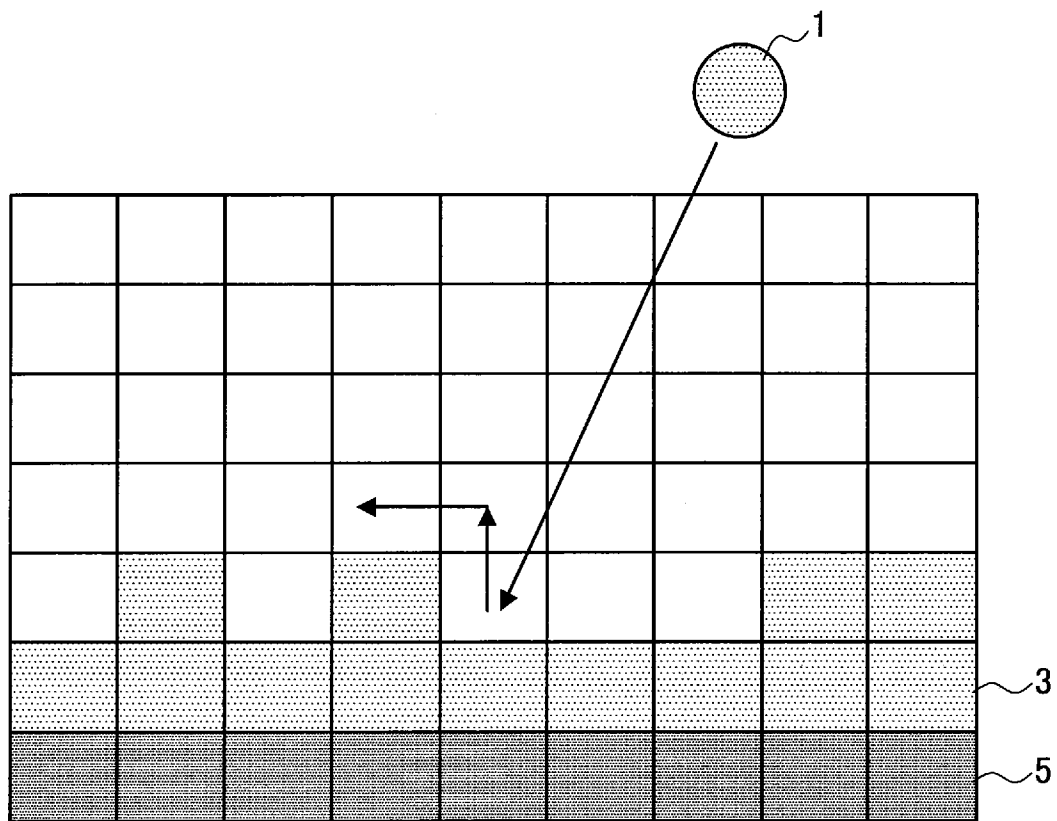
[図2]



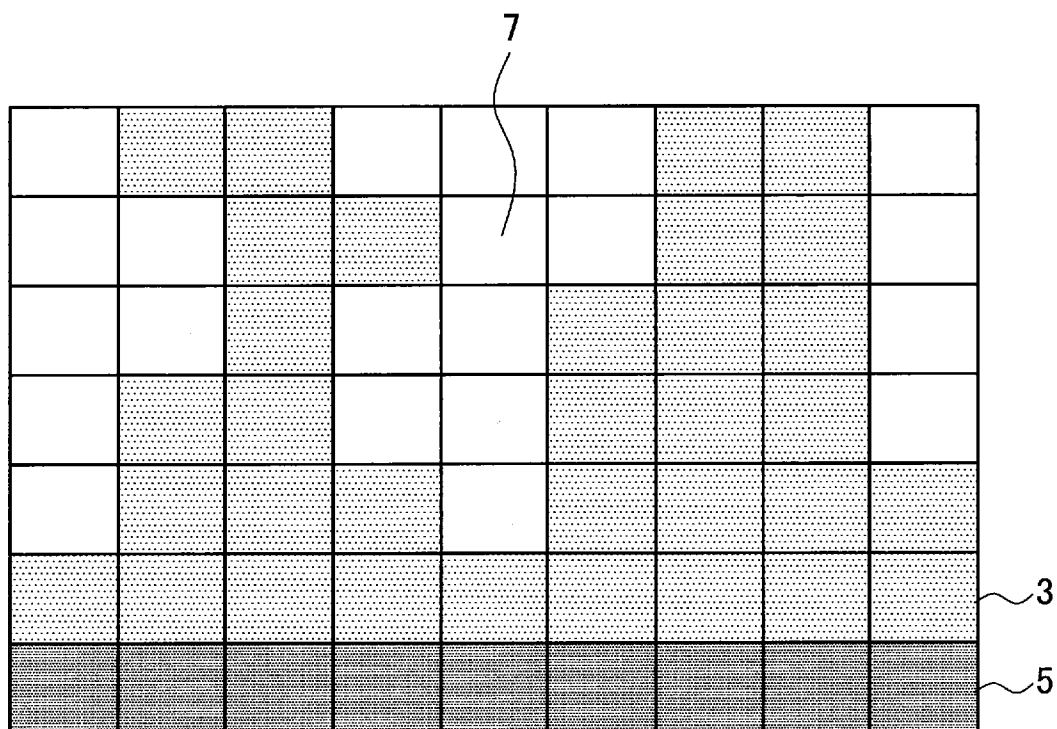
[図3]



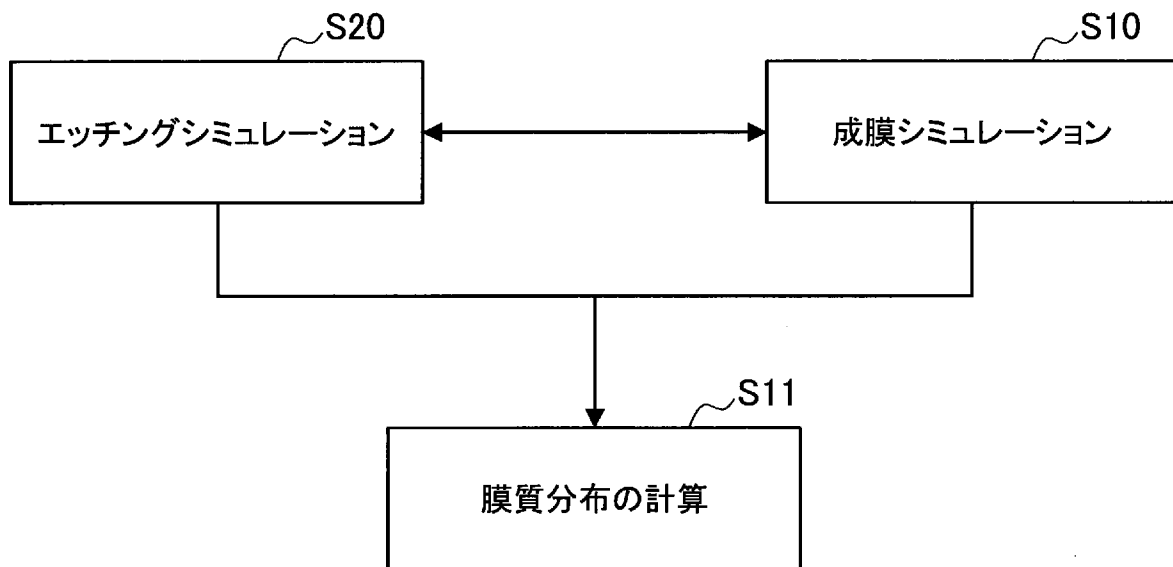
[図4]



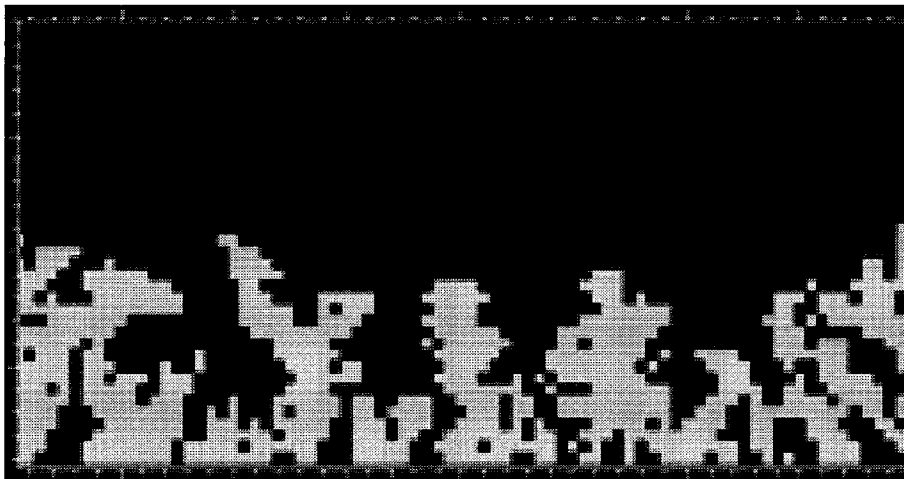
[図5]



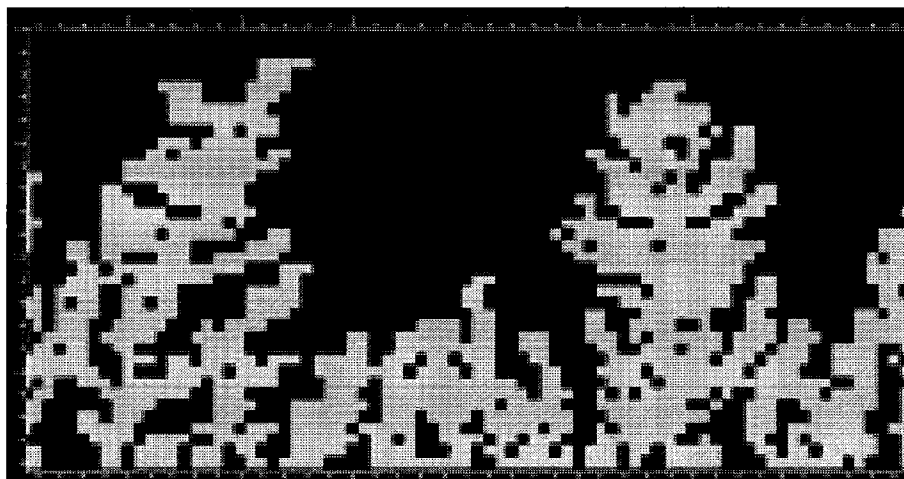
[図6]



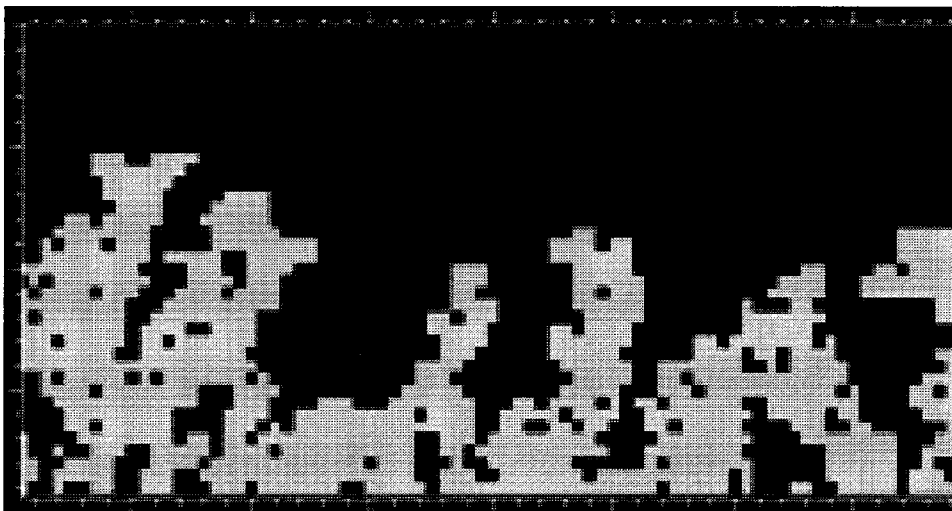
[図7A]



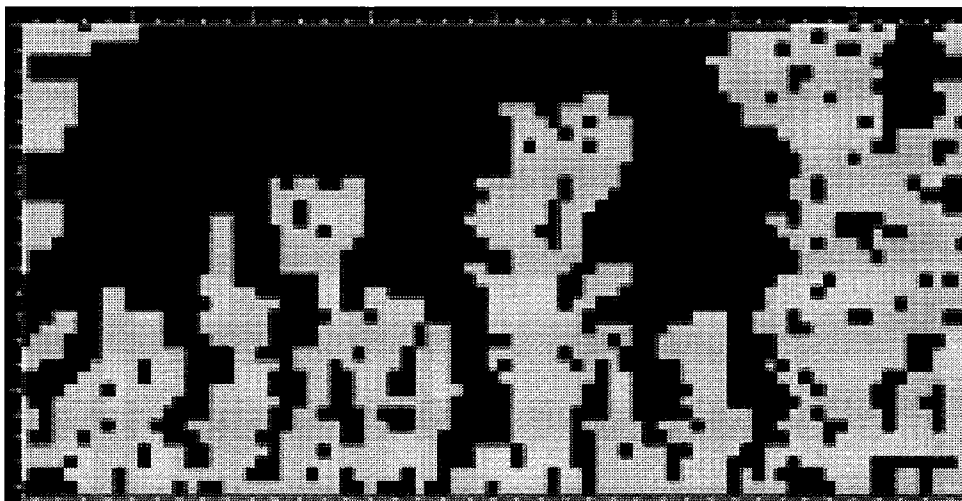
[図7B]



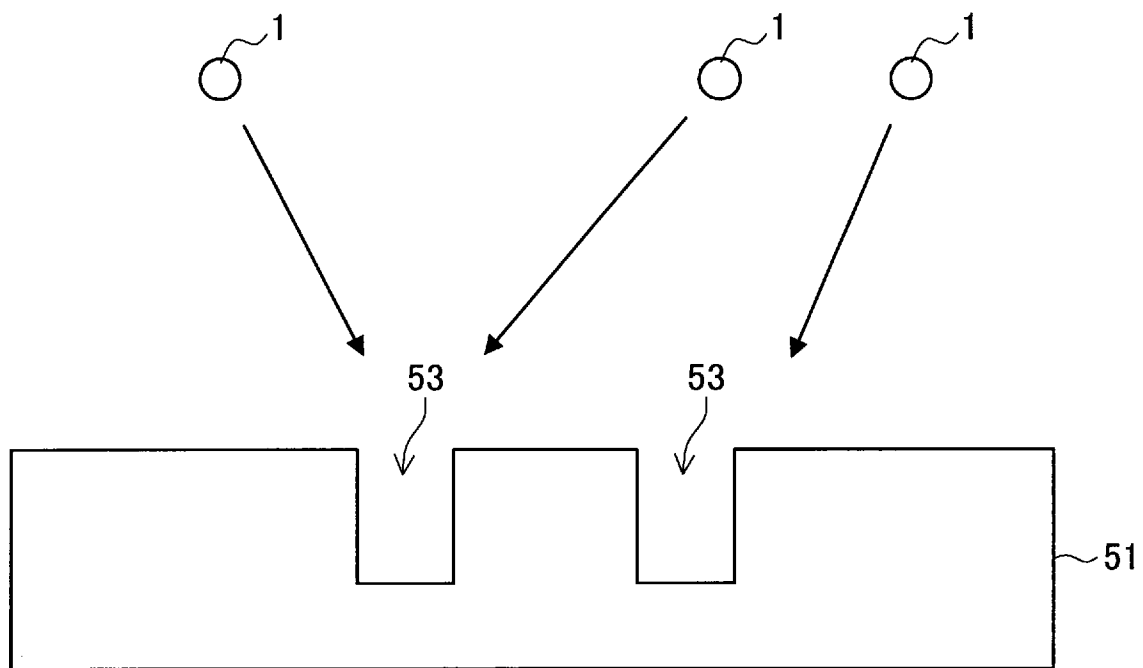
[図8A]



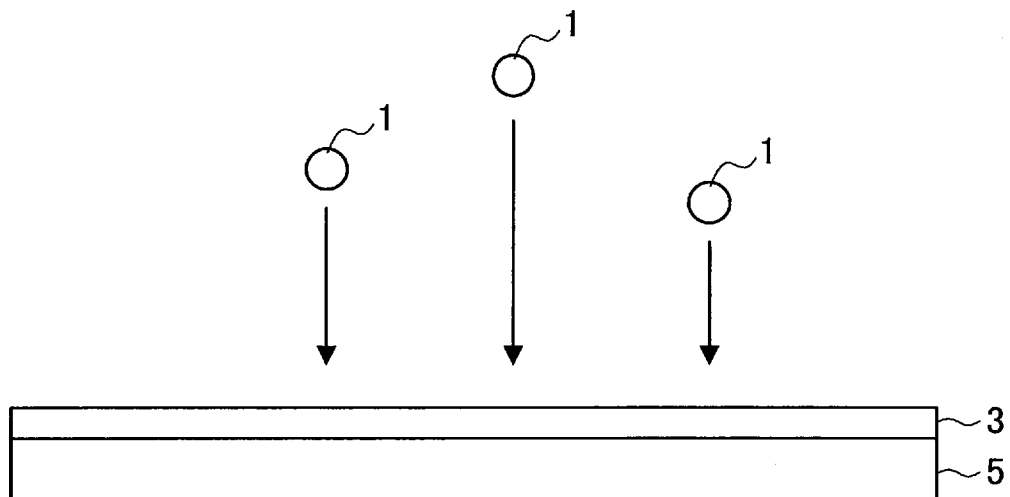
[図8B]



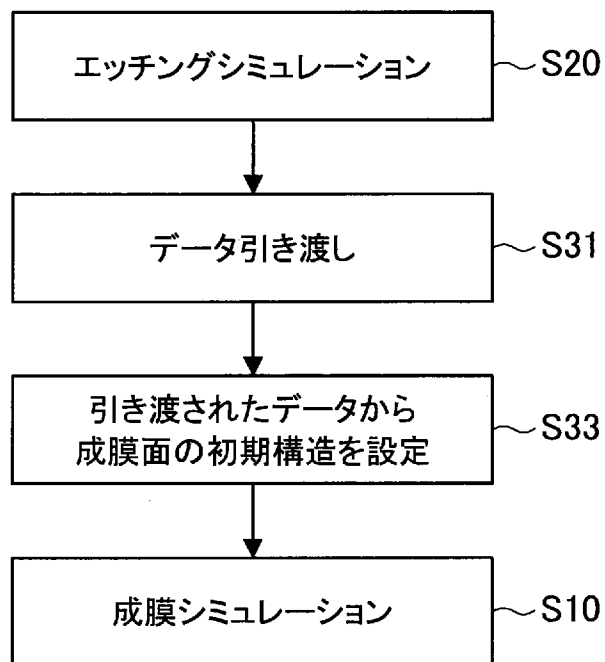
[図9]



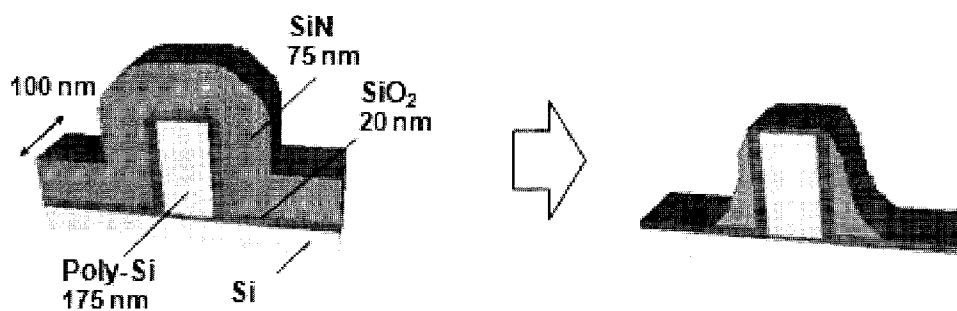
[図10]



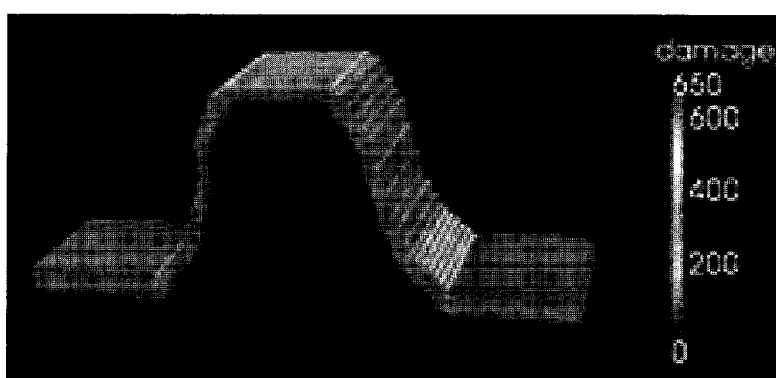
[図11]



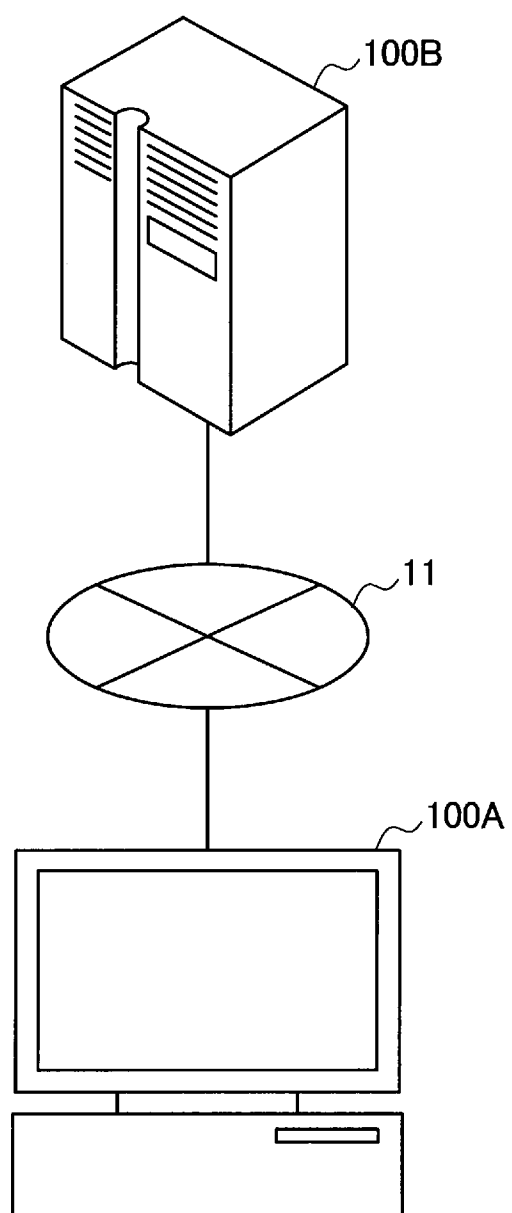
[図12A]



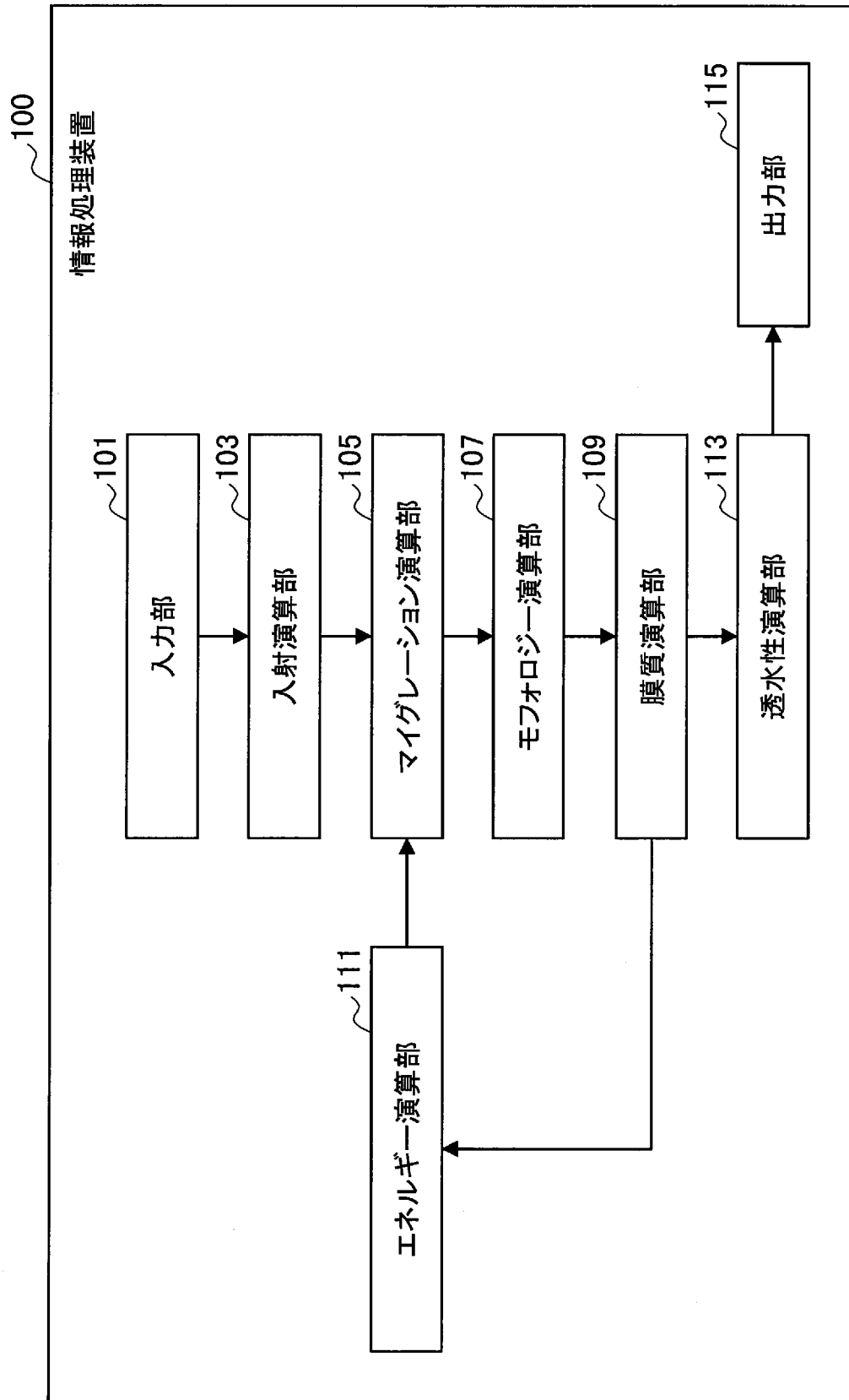
[図12B]



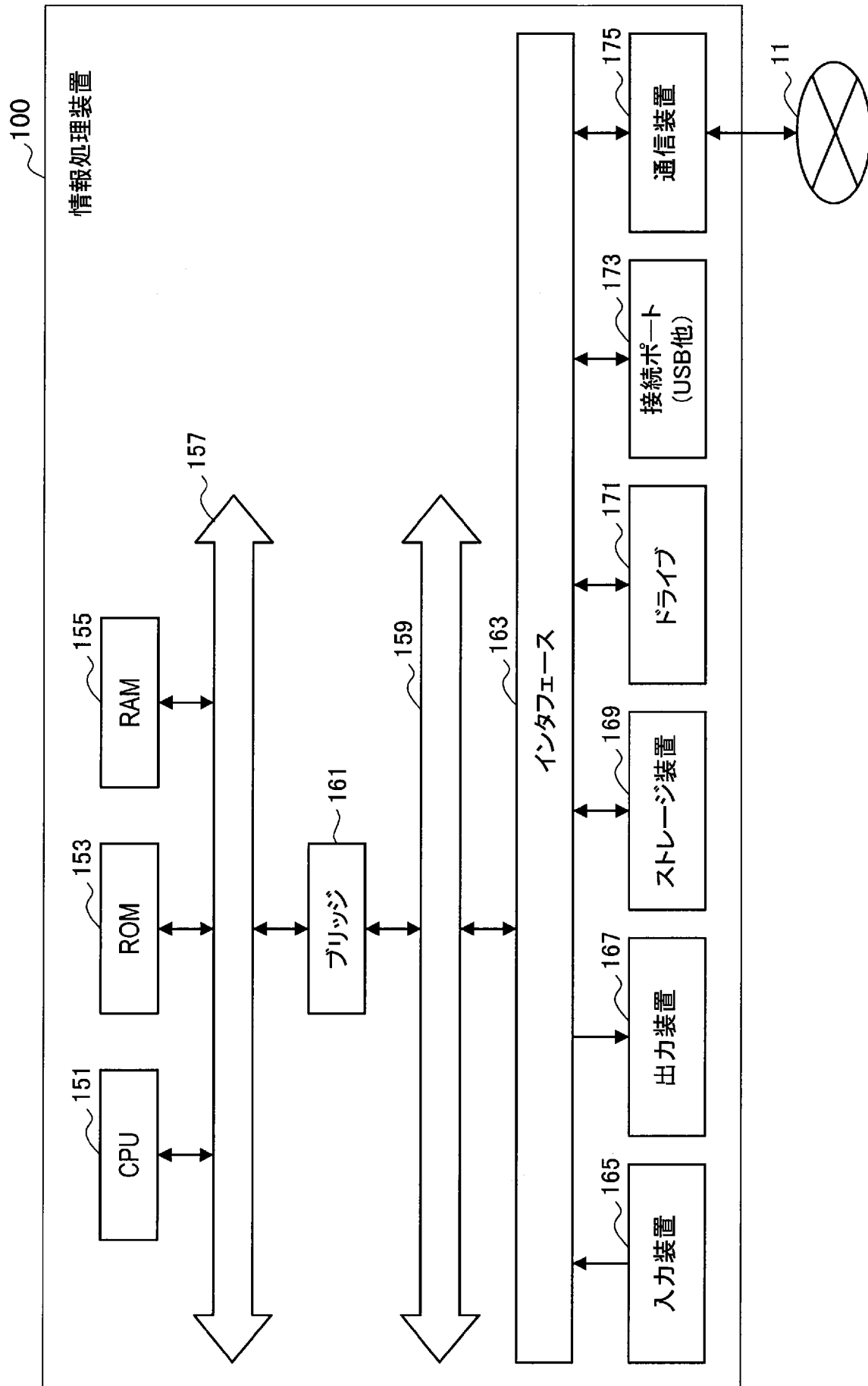
[図13]



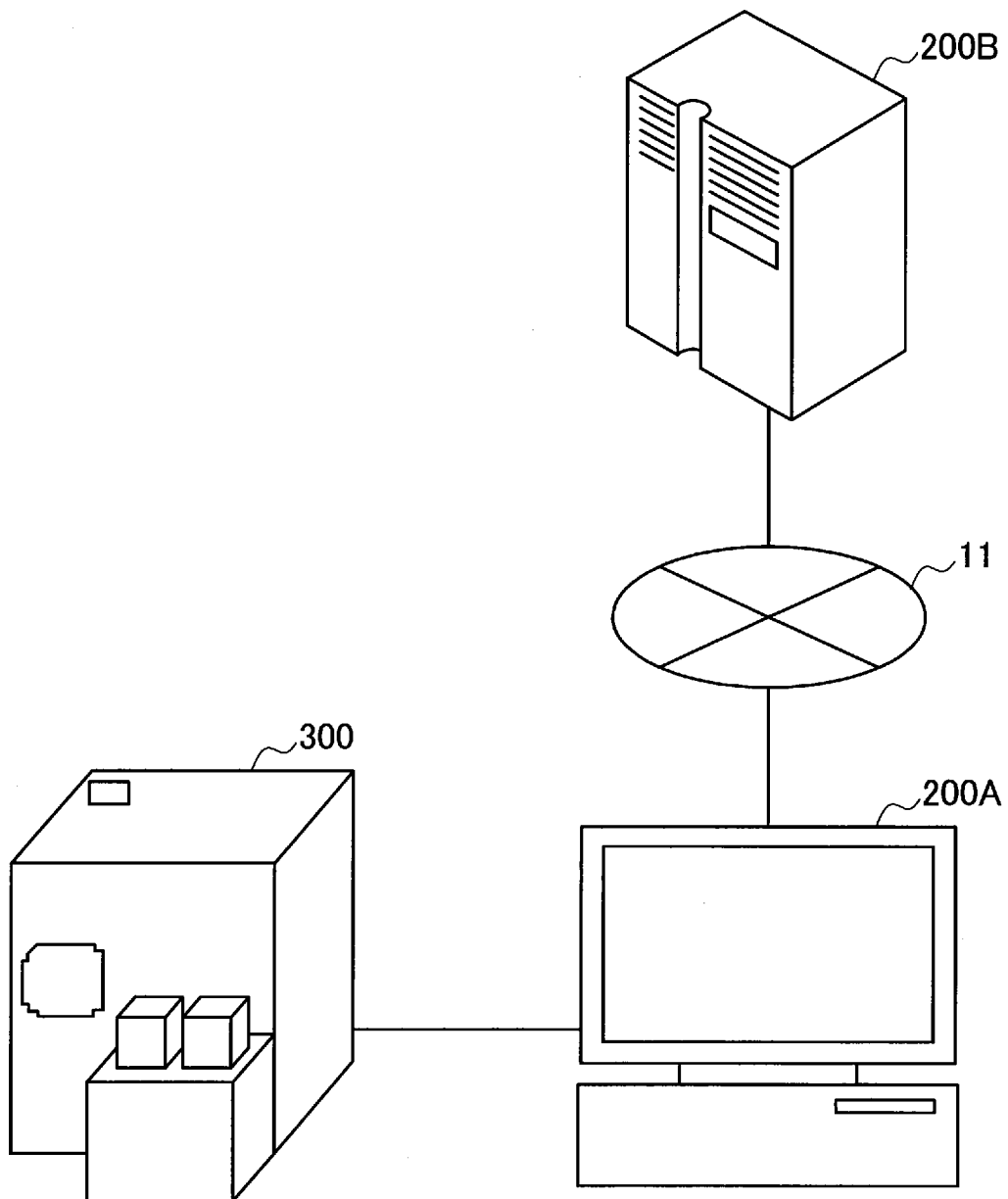
[図14]



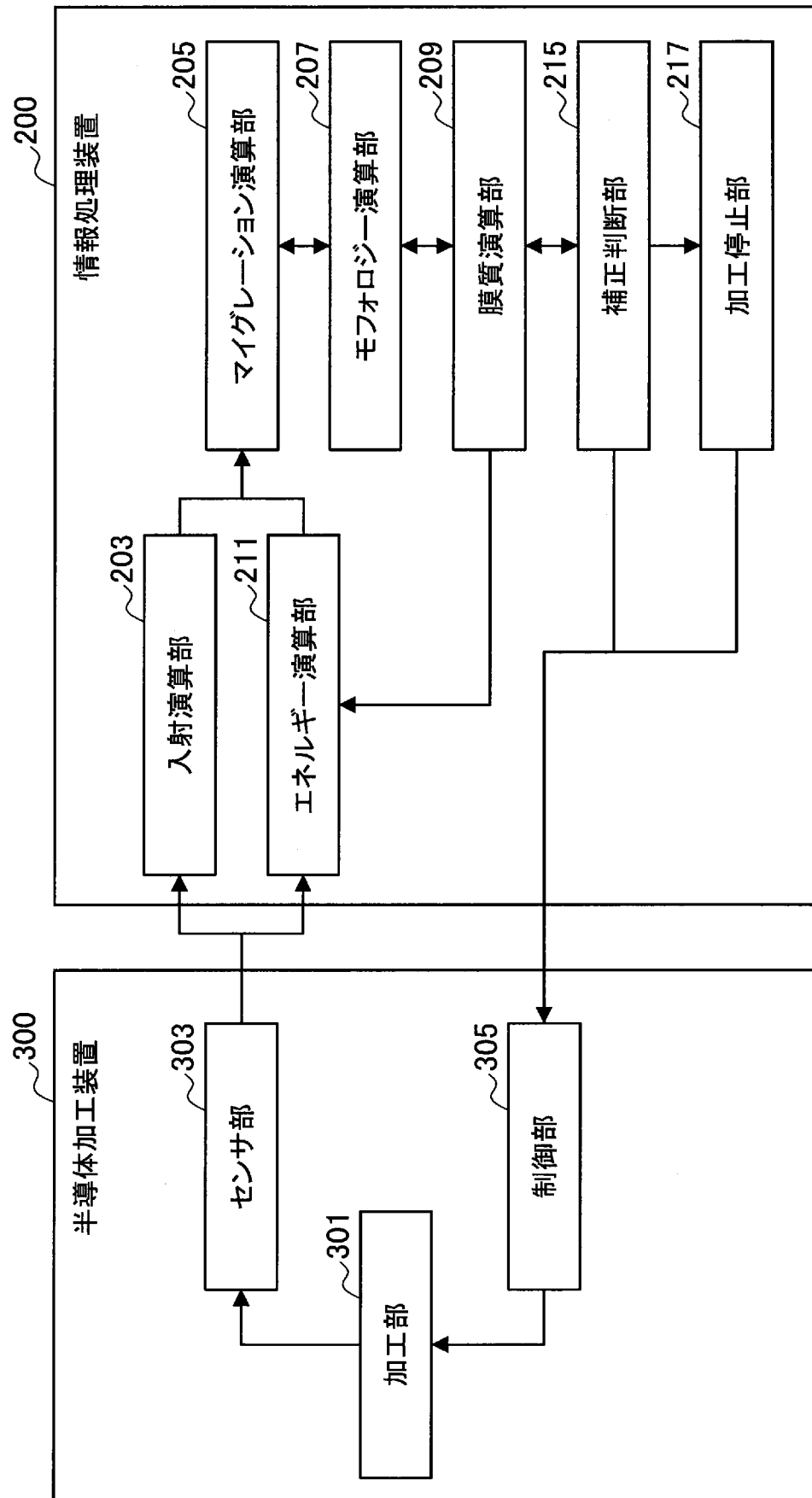
[図15]



[図16]



[図17]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2016/080993

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

H01L21/31(2006.01)i, C23C14/54(2006.01)i, C23C16/52(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

H01L21/31, C23C14/54, C23C16/52

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Jitsuyo Shinan Koho	1922-1996	Jitsuyo Shinan Toroku Koho	1996-2017
Kokai Jitsuyo Shinan Koho	1971-2017	Toroku Jitsuyo Shinan Koho	1994-2017

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580(JDreamIII)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	ZHU, Z. et al., Multilayer growth of BaTiO ₃ thin films via pulsed laser deposition: An energy-dependent kinetic Monte Carlo simulation, Applied Surface Science, 2010, Vol. 256, p. 5876-5881	1-8, 10-12 9, 13-15
Y	BOGICEVIC, Alexander, et al., Island migration caused by the motion of the atoms at the border: Size and temperature dependence of the diffusion coefficient, Physical Review B, 1998, Vol. 57, No. 16, p. R9459-R9462, particularly, FIG. 2	9
Y	JP 2000-195766 A (Toshiba Corp.), 14 July 2000 (14.07.2000), paragraphs [0071] to [0081]; fig. 13 (Family: none)	13-15

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.

☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
05 January 2017 (05.01.17)

Date of mailing of the international search report
17 January 2017 (17.01.17)

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/31(2006.01)i, C23C14/54(2006.01)i, C23C16/52(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/31, C23C14/54, C23C16/52

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2017年
日本国実用新案登録公報	1996-2017年
日本国登録実用新案公報	1994-2017年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

JSTPlus/JMEDPlus/JST7580 (JDreamIII)

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
X Y	ZHU, Z. et al., Multilayer growth of BaTiO ₃ thin films via pulsed laser deposition: An energy-dependent kinetic Monte Carlo simulation, Applied Surface Science, 2010, Vol. 256, p. 5876-5881	1-8, 10-12 9, 13-15
Y	BOGICEVIC, Alexander, et al., Island migration caused by the motion of the atoms at the border: Size and temperature dependence of the diffusion coefficient, Physical Review B, 1998, Vol. 57, No. 16, p. R9459-R9462, 特に FIG. 2	9

☒ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

05.01.2017

国際調査報告の発送日

17.01.2017

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

長谷川 直也

50

4549

電話番号 03-3581-1101 内線 3559

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
Y	JP 2000-195766 A (株式会社東芝) 2000.07.14, 段落[0071]-[0081], 図 13 (ファミリーなし)	13-15