

## 量子分子動力学法に基づくフルオロカーボンラジカルによる SiO<sub>2</sub> エッチングプロセスの解明

### Theoretical Analysis of SiO<sub>2</sub> Etching Processes by Fluorocarbon Radicals Based on Quantum Chemical Molecular Dynamics Method

東北大院工<sup>1</sup>, 東北大流体研<sup>2</sup>, <sup>○</sup>伊藤 寿<sup>1</sup>, 桑原 卓哉<sup>1</sup>, 樋口 祐次<sup>1</sup>, 尾澤 伸樹<sup>1</sup>,  
寒川 誠二<sup>2</sup>, 久保 百司<sup>1</sup>

Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.<sup>1</sup>, Institute of Fluid Science, Tohoku Univ.<sup>2</sup>,

<sup>○</sup>Hiroshi Ito<sup>1</sup>, Takuya Kuwahara<sup>1</sup>, Yuji Higuchi<sup>1</sup>, Nobuki Ozawa<sup>1</sup>, Seiji Samukawa<sup>2</sup>, Momoji Kubo<sup>1</sup>

E-mail: hiroshi.ito@rift.mech.tohoku.ac.jp

MEMS 及び半導体デバイスのさらなる高集積化の実現には、エッチングプロセスの課題である形状欠陥の生成や堆積物の過剰成長等の解決が必須である。これまでの研究では基板材料と反応性分子、イオン、ラジカルの化学反応過程の解明のため、Tight-binding 量子分子動力学法を用い、CF<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub> ラジカルを SiO<sub>2</sub> 表面に照射するエッチングシミュレーションを行った。照射エネルギー10 eV では、CF<sub>2</sub> が高い化学反応性により多くの Si-O 結合を切断し、150 eV では CF<sub>3</sub> が多くの Si-F 結合生成と Si-O 結合切断を起こすことで、プロセスをより進行させることを明らかにした[1, 2]。しかし、エッチングにおける堆積物の成長過程は未解明である。CF<sub>x</sub> ガスによるエッチングでは、C, F 原子の堆積がサイドエッチからのホール壁面の保護、及び過剰堆積によるエッチング停止の要因であり、CF 堆積の制御性向上が急務である。本研究では CF 堆積機構の解明のため、低い照射速度でのエッチングシミュレーションを行い、化学反応メカニズムの解明を試みた。

Fig. 1, 2 に CF<sub>2</sub>、CF<sub>3</sub> ラジカルを 1 eV の照射エネルギーで 20 回照射したシミュレーション結果を示す。CF<sub>2</sub> 照射では、SiO<sub>2</sub> 表面とラジカルとの化学反応により、SiO<sub>2</sub> 表面及び内部に多数 C-C 結合が生成し、C 原子の堆積プロセスの初期過程が観察された(Fig. 1)。CF<sub>3</sub> 照射では、プロセスの途中過程において、SiO<sub>2</sub> 表面に吸着

あるいは分子の状態で存在していた F 原子と CF<sub>3</sub> が結合を生成し、CF<sub>4</sub> として蒸発する様子が多く観察された。SiO<sub>2</sub> 表面での C-C 結合の生成は見られるものの、CF 堆積は CF<sub>2</sub> よりも見られなかった(Fig. 2)。以上から、CF<sub>2</sub> の方が C, F 原子の堆積性が高いことが明らかとなり、ラジカル種によって異なる化学反応過程の解明に成功した。

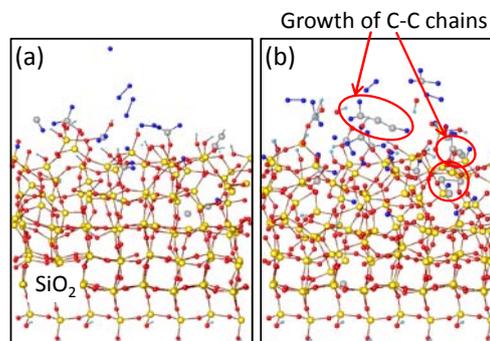


Fig. 1. Snapshots of the SiO<sub>2</sub> etching simulations after (a) 10 and (b) 20 CF<sub>2</sub> radical irradiations at 1 eV.

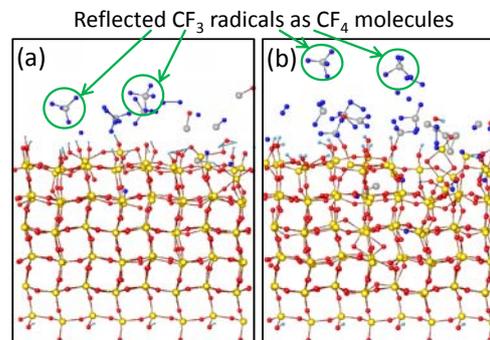


Fig. 2. Snapshots of the SiO<sub>2</sub> etching simulations after (a) 10 and (b) 20 CF<sub>3</sub> radical irradiations at 1 eV.

[1] H. Ito et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **52**, 026502 (2013).

[2] 伊藤寿 他, 第 60 回応用物理学会春季学術講演会, 講演予稿集 13-028 (2013).