17a-C2-2

酸素ガスクラスタービーム照射による

シリコン表面酸化プロセスの分子動力学シミュレーションⅡ

Molecular Dynamics Simulation of Si Surface Oxidation Processes by Oxygen Gas cluster Ion Beams Ⅱ.

阪大工　○溝谷　浩平，礒部　倫郎，浜口　智志

Center for Atomic and Molecular Technologies, Graduate School of engineering, Osaka Univ

○Kohei Mizotani, Michiro Isobe, Satoshi Hamaguchi

E-mail: mizotani@ppl.eng.osaka-u.ac.jp

近年の半導体デバイスの微細化の進行により、プラズマによる表面改質プロセスの際に加工表面から数 nm の領域に生じるダメージがデバイスの性能に直接的に影響するようになってきている。我々は、従来のプラズマプロセスと比べて基板へのダメージを低減でき、かつ高効率な加工が可能な表面改質プロセスであるガスクラスターイオンビーム（GCIB）に注目し、分子動力学（MD）シミュレーションを用いたクラスター・表面相互作用の解析を進めている。前回の報告では、1 原子あたりの運動エネルギーが酸素分子の結合エネルギー以下、室温に近い低エネルギーの酸素分子ガスクラスタービームを Si 基板に入射し、このような低入射エネルギーにおいても高密度のクラスター分子と基板表面原子が多体衝突を繰り返すことにより、Si 表面酸化が実現されることを明らかにしてきたが、今回は、クラスターサイズが Si 表面酸化プロセスに与える影響についてより詳細に調べた結果について述べる。本研究では、Si, O 原子の古典ポテンシャルモデルを用い、結晶シリコンのモデル基板に分子数を変えた酸素分子クラスターを入射した。図 1 は 1 原子あたりの運動エネルギーと、十分な時間が経過した後の入射 1 原子あたりの Si – O 結合の本数との関係を表している。本研究では、クラスターサイズの変化により表面酸化の効率が変化することを示し、その機構について議論する。

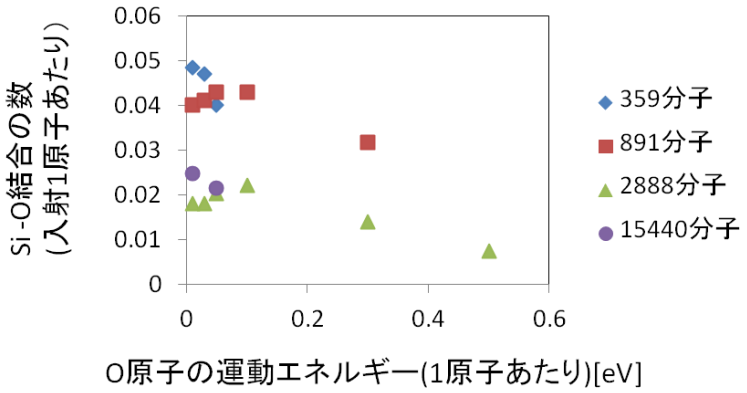

図 1：Si-O 結合の入射エネルギー、クラスターサイズ依存性

© 2013 年　応用物理学会