

分子動力学法を用いた塩素系プラズマによる Si エッチング表面反応解析：エッチング副生成物イオン入射の効果

Molecular Dynamics Analysis of Surface Reaction Kinetics

during Si Etching in Cl-based Plasmas: Effects of Etch By-Products Ion Incidence

京大院工 中崎 暢也, 鷹尾 祥典, 江利口 浩二, 斧 高一

Kyoto Univ., Nobuya Nakazaki, Yoshinori Takao, Koji Eriguchi, Kouichi Ono

E-mail: nakazaki.nobuya.58x@st.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

近年の半導体デバイスの微細化により、プラズマプロセスにおける原子スケールの形状異常や表面ラフネスがデバイスの性能を左右する重要な問題となっている。これらの発現は、プラズマから基板表面へ入射するイオンやラジカルの挙動だけでなく、基板表面から脱離する粒子の微細構造内およびプラズマ内での挙動など、様々な要因が関係する複雑な物理現象である。本研究は、古典的分子動力学法^[1-3]を用いて基板表面でのプラズマ・固体表面相互作用を原子スケールで再現し、表面ラフネス発生メカニズム解明の一助とすることを目的としている。

2. 計算条件

基板を縦横 32.58 Å、初期厚さ 26.0 Å (初期 Si 原子数 1,440 個) の Si(100) とし、底部の Si 原子層を固定、水平方向に周期境界条件を設定している。今回は、プラズマから基板へのエッチング副生成物イオンの入射を模擬するために、 SiCl_x^+ イオン ($x=1-4$) を高エネルギー ($E_i=20-500$ eV) で垂直入射 ($\theta_i=0^\circ$) させ、その際のエッチング収量や基板の表面状態について解析を行った。

3. 結果と考察

Fig. 1 に、 Cl^+ イオンおよび SiCl^+ イオンを $E_i=20-500$ eV で入射した場合の Si 収量を示す。 SiCl^+ イオン入射時は、 $E_i \leq 300$ eV において Si 原子の堆積が生じている (Si 収量が負である) のに対し、 $E_i > 300$ eV ではエッチングが起こっている (収量が正) ことがわかる。また、Fig. 2 に表面反応層 (SiCl_x 層) の厚みのイオン入射数 ($E_i=100, 500$ eV) に対する変化を示す。 Cl^+ イオン入射時は SiCl_x 層の厚みがイオン入射数に対してほぼ一定になるのに対し、 SiCl^+ イオン入射時は $E_i=100$ eV において厚みが単調に増加し、堆積が生じていることが確かめられる。さらに、Fig. 3 にエッチング中の SiCl_x 層の状態 (原子分布、Cl 原子の面密度) を示す。 Cl^+ イオン入射時は、 E_i の上昇とともに SiCl_x 層の厚みが増大し、Cl 原子の面密度が増加する。一方、 SiCl^+ イオン入射時は、堆積の効果が大きい低 E_i 条件下で Cl 原子の面密度が大きく、 E_i の増加とともに減少することがわかる。以上から、副生成物イオン入射時の表面反応は、 Cl^+ イオン入射時の反応と異なることが確かめられる。

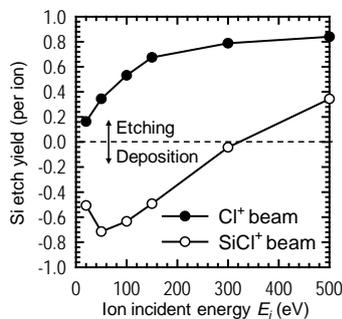


Fig. 1. Si etch yield per ion, simulated for Si/Cl and Si/SiCl systems of $\theta_i = 0^\circ$ with different $E_i = 20-500$ eV.

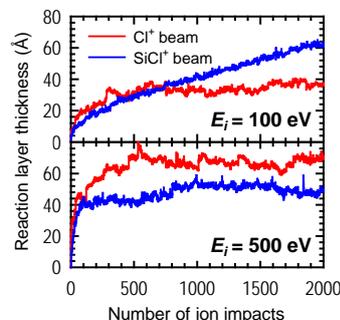


Fig. 2. Surface reaction layer (SiCl_x) thickness, simulated for Si/Cl and Si/SiCl systems of $\theta_i = 0^\circ$ with different $E_i = 100$ and 500 eV.

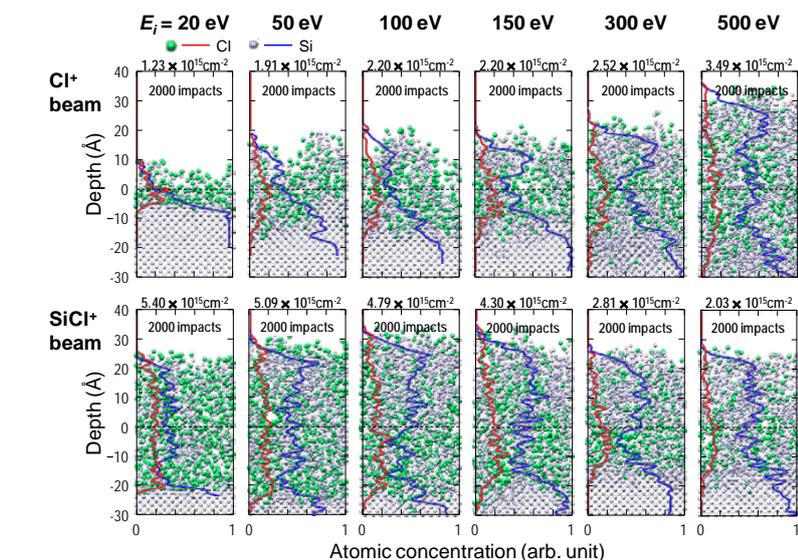


Fig. 3. Side views of Si(100) surface, together with the depth profile of Cl and Si atoms and the coverage or concentration of Cl atoms therein, simulated for Si/Cl and Si/SiCl systems of $\theta_i = 0^\circ$ with different $E_i = 20-500$ eV.

Reference: [1] A. Iwakawa *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 8560 (2008). [2] T. Nagaoka *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **105**, 023302 (2009). [3] H. Ohta *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **48**, 020225 (2009).