Si トレンチ構造への巨大フッ素クラスター衝突の MD シミュレーション

MD simulations of huge fluorine cluster impacts on silicon trench structure

京大工 ⁰青木 学聡, 瀬木 利夫, 松尾 二郎

Kyoto Univ., [°]Takaaki Aoki, Toshio Seki, Jiro Matsuo

E-mail: aoki@sakura.nucleng.kyoto-u.ac.jp

多数の原子または分子の集合体であるクラスターをビームとして衝突させるクラスタービーム 法は、高いスパッタ率が得られることから、LSIやMEMSに代表されるナノ構造作成のためのエッ チング手法として期待されている[1]. 発表者らはこれまで、種々の実験、及び計算機シミュレー ションにより、巨大反応性クラスターによる衝突過程の解析を行ってきた[2]. これらはおもに平 坦な基板表面に対する解析であり、微小ナノ構造を有する表面形状に対する、反応性クラスター 衝突が及ぼす物理的、化学的効果についてはほとんど議論がされていない. そこで今回トレンチ 構造をもったシリコン基板上に衝突させる分子動力学シミュレーションを実施した.

1辺約43nmの立方体状のSi(100)基板に、直径10.8nm、深さ21.6nmの円筒状のトレンチ構造を 予め作成し、これに5,000または50,000個のF2分子より構成されるクラスター(すなわち(F2)skと (F2)sok)を衝突させた.トレンチ構造の角にクラスターの中心が衝突するよう配置し、クラスター の総加速エネルギーが10keVとなるように運動エネルギーを与えた.図に初期状態、及び衝突後 7.7ps後の様子を示す.図より、総加速エネルギーが等しい条件であっても、クラスター構成原子 数の違いにより、クラスターの衝突過程、そして基板に与える影響が異なることが分かる.クラ スターサイズが大きく、1原子当たりのエネルギーが低い場合((F2)sok,0.1eV/atom)、トレンチ構造 に変形は見られない.この時、図中においておよそ右半分に当たる部分のフッ素分子は基板表面 に対し鉛直方向の運動を保持し、これらの多くはトレンチ構造の底面部に衝突する.また左半分 のフッ素分子は、平坦な基板への衝突と同様に、基板水平方向に散乱される.一方、クラスターサ イズが小さく、1原子当たりの運動エネルギーが高い場合((F2)sk、1eV/atom)、衝突箇所を中心とし た、半径10nm、深さ2nm程度の半円状の領域が変形を受ける.この時、トレンチ角部での変形と の複合的な効果により、入射したクラスター構成原子の多くは、図中における右下方向、すなわ

ちトレンチ内部かつ衝突箇所からみ て対向面へ向かって偏向を受ける.ま た,この衝突条件ではトレンチ角部の 変形部に加え,トレンチの右側面,ト レンチ底部の Si 原子がフッ化物を構 成し,基板から脱離する様子が観察さ れた.発表では,種々のクラスター衝 突条件についても,表面形状変形,表 面脱離過程の解析を実施し,巨大反応 性クラスター衝突による微細構造作 成プロセスへの適応可能性を検討す る.



図: トレンケ形状を持った Si 基値に対するノウ系クラスクーの 衝突

[1] K. Koike et al., Applied Physics Express 3 (2010) 126501.
[2] T. Aoki et al., Nucl. Instr. Meth. B 269 (2011) 1582–1585.