

量子分子動力学法に基づくシリコン酸化膜のエッチングプロセスにおける エッチャントの堆積メカニズムの解明

Theoretical Investigation of Deposition Mechanisms of Etchant Species in SiO₂ Etching Process using Quantum Chemical Molecular Dynamics Method

東北大院工¹, 東北大流体研², [○]伊藤 寿¹, 桑原 卓哉¹, 樋口 祐次¹, 尾澤 伸樹¹,
寒川 誠二², 久保 百司¹

Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.¹, Institute of Fluid Science, Tohoku Univ.²,
[○]Hiroshi Ito¹, Takuya Kuwahara¹, Yuji Higuchi¹, Nobuki Ozawa¹, Seiji Samukawa², Momoji Kubo¹

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

MEMS や半導体デバイスのさらなる小型, 高密度化の実現には, エッチングプロセスにおける形状欠陥の低減及び副生成物の生成・エッチャントの堆積過程の解明が必須となっている. エッチングにおける化学反応過程の解明のため, これまでに Tight-Binding 量子分子動力学法を用いた CF₂, CF₃ ラジカルによる SiO₂ エッチングシミュレーションにより, ラジカルの照射エネルギーに応じてエッチングメカニズムが異なることなどを明らかにした[1]. しかし, エッチングにおける堆積物の成長過程の詳細は, 未だ明らかになっていない. CF_x を用いたエッチングでは, 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プロセス停止の要因として働くため, CF 膜の堆積過程の制御性の向上が急務である. 本研究ではエッチャントの堆積機構を明らかにするため, SiO₂ エッチングシミュレーションを行い, CF 膜の堆積メカニズムの解明を試みた.

Fig. 1 に, CF₂ 及び CF₃ を照射エネルギー 150 eV にて SiO₂ 表面に 30 回照射したエッチングシミュレーション結果を示す. CF₂ 照射では, SiO₂ 表面上及び内部に C-C 結合が生成し, CF 堆積プロセスの初期過程が観察された(Fig. 1a). CF₃ 照射でも, C-C 結合の生成が見られたものの(Fig. 1b), 生成した C-C 結合は CF₂ の場合よりも少なかった. また, CF 堆積の発端部分について, C-C 結合が SiO₂ 内の Si 原子から成長した Si-C-C 結合の数を比較したところ, CF₂ の場合の方が CF₃ の場合よりも多くの Si-C-C 結合を生成していた(Fig. 2). これより, CF₂ によるプロセスでは, エッチングされて露出した SiO₂ 表面の Si 原子から CF 堆積が進行しやすいと考えられる. 一方で, CF₃ によるプロセスでは, F 原子が多いために SiO₂ 表面の露出した Si 原子が多く終端され, Si 原子を起点として生じる C-C 結合の成長が抑制されたと考えられる. 結果及び考察の詳細は当日発表する.

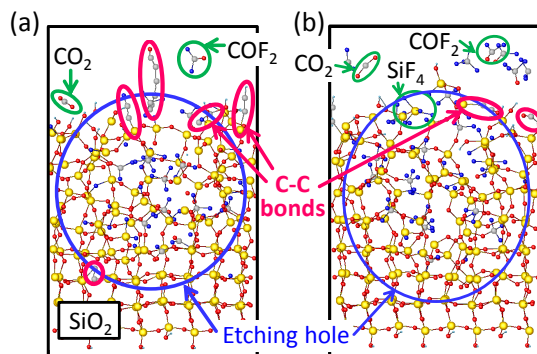


Fig. 1. Snapshots of the SiO₂ etching simulations after 30 (a) CF₂ and (b) CF₃ radical irradiations.

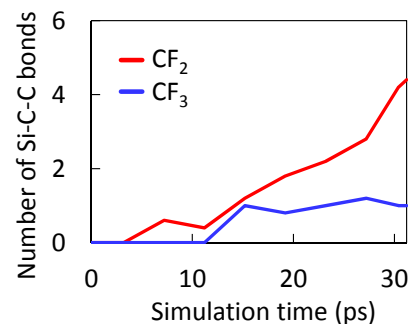


Fig. 2. Time evolution of number of Si-C-C bonds in the SiO₂ etching simulation by CF₂ and CF₃.

【参考文献】[1] H. Ito et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **52**, 026502 (2013).