

酸素・中性粒子ビームによる酸化・錯体反応を用いた遷移金属エッチングメカニズム

Mechanism of transition metal etching process using neutral beam oxidation and complex reaction

東北大学流体研¹、東京エレクトロン(株)²、東北大学 WPI-AIMR³○久保田智広¹、菊地良幸^{1,2}、谷 勲²、野沢俊久²、寒川誠二^{1,3}Inst. Fluid Sci., Tohoku Univ.¹, Tokyo Electron Ltd.², WPI-AIMR, Tohoku Univ.³○Tomohiro Kubota¹, Yoshiyuki Kikuchi^{1,2}, Xun Gu², Toshihisa Nozawa², and Seiji Samukawa^{1,3}

E-mail: samukawa@ifs.tohoku.ac.jp

【背景】遷移金属（特に磁性材料）の異方性エッチングプロセスは、高速な不揮発性メモリである磁気抵抗メモリ（Magnetoresistive RAM, MRAM）の実用化のために極めて重要である。しかし多くの遷移金属元素において、揮発性の高い化合物をハロゲン等のプラズマを用いて生成することによるエッチングが困難であり、アルゴンイオンミリングなどが主に用いられてきた。アルゴンイオンミリングでは①高エネルギーイオンを用いることによるダメージ②十分に垂直な形状が得られない③スパッタされた物質の再付着、が問題となっていた。最近、著者らにより、錯体反応と中性粒子ビームを用いることにより遷移金属の異方性ダメージフリーエッチングが可能であるという報告がなされた[1]。これは遷移金属（Ta、Pt など）に酸素・アルゴン混合中性粒子ビームとエタノールガスを同時に照射することによりエッチングが進行するというものであり、従来にはない全く新しいエッチング方法である。本研究ではこのエッチングメカニズムの理解を目指し、第一原理理論計算を用いた理論的アプローチを試みた。

【計算】タンタル酸化物とエタノールとの反応を想定したクラスターモデルを構築し、その電子状態計算を、密度汎関数法に基づいて行った。タンタル酸化物は三方両錐構造で 5 個の酸素と結合し、表面では酸素が失われダングリングボンドがあるものとした。そのダングリングボンドにエタノールの酸素原子が攻撃し結合を生成したと想定したモデルを構築し計算を行った。

【結果】図 1 に、タンタル酸化物表面にエタノールが結合したモデルおよびその電子軌道の一例を示す。このタンタル原子とエタノールの酸素原子の間に σ 結合性の軌道（図 1 (b)）と π 結合性の軌道（図 1 (c)）が生成していることがわかる。ひきつづきエタノールの酸素原子がタンタル原子を攻撃することで、タンタルのエタノール錯体が生成しエッチングが進行すると思われる。

[1] X. Gu, Y. Kikuchi, T. Nozawa, and S. Samukawa, 2014 VLSI Technology Symposium

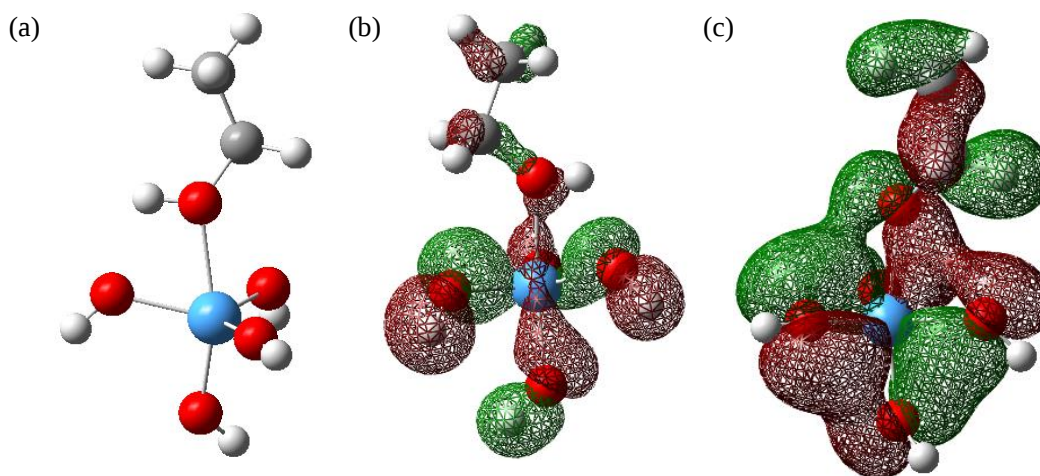


Fig. 1. Cluster model of ethanol-tantalum oxide surface (a) and its molecular orbitals (b)(c).