

第一原理理論計算による中性粒子ビーム生成メカニズムの定量的予測

Quantitative prediction of neutral beam generation by first-principle calculation

東北大流体研¹、みずほ情報総研(株)²、東北大 WPI-AIMR³

久保田智広¹、渡辺尚貴²、大塚晋吾²、岩崎拓也²、小野耕平²、入江康郎²、寒川誠二^{1,3}

Inst. Fluid Sci., Tohoku Univ.¹, Mizuho Information & Res. Inst., Inc.², WPI-AIMR, Tohoku Univ.³

T. Kubota¹, N. Watanabe², S. Ohtsuka², T. Iwasaki², K. Ono², Y. Iriye², and S. Samukawa^{1,3}

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

[はじめに] プラズマプロセスは半導体微細加工（エッチング、成膜、表面改質等）に広く用いられているが、半導体デバイスの微細化に伴いプラズマ照射ダメージが問題となっている。中性粒子ビーム[1]は、プラズマ中のイオンを加速・コリメートしグラファイト製の高アスペクト比アパーチャに通すことでグラファイトとイオンとの衝突によりイオンを中性化し加工対象物に照射するものであり、次世代デバイスや新規デバイスを実現するためのダメージフリープロセスとして期待されている。ここで、パルスプラズマ中で生じる負イオンを使うことで、正イオンを使った場合と比較し高い中性化率（ほぼ 100%）を得ることが可能である[1]。より高効率な中性粒子ビームの実現のためには、そのメカニズムの解明が必要である。そこで、本研究では第一原理理論計算により、中性粒子生成のメカニズムを検討した。

[計算] グラファイトに塩素粒子（原子、分子、原子イオン、分子イオン）を衝突させ跳ね返って元の位置に戻る過程を、時間依存密度汎関数理論(TD-DFT)に基づいて計算した。従来の我々の検討[2]と比較し大きな系（0.851 nm × 0.737 nm × 3.386 nm）を用いた。

[結果] 衝突後のグラファイトおよび塩素粒子の近傍に存在する電子密度を空間積分することで、それぞれに帰属する電子数を求めた。このとき、大きな系を用いることで、電子密度の空間中への飛び散りが抑制され、定量的な解釈が可能となったことが分かる。さらに、グラファイト表面への入射角度や複数回衝突を考慮し、最終的に正・負イオンの中性化率を入射エネルギーの関数として求めることができた。この結果は実験結果[3]と定量的に一致し、中性粒子生成プロセスを適切にモデリングし計算することができたと考えられる。

[1] S. Samukawa et al., J. Vac. Sci. Technol. A **20**, 1566 (2002).

[2] T. Kubota et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **45**, 095202 (2012).

[3] S. Samukawa, Appl. Surf. Sci. **253**, 6681 (2007).

[謝辞] この成果の一部は(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託業務の結果得られたものである。

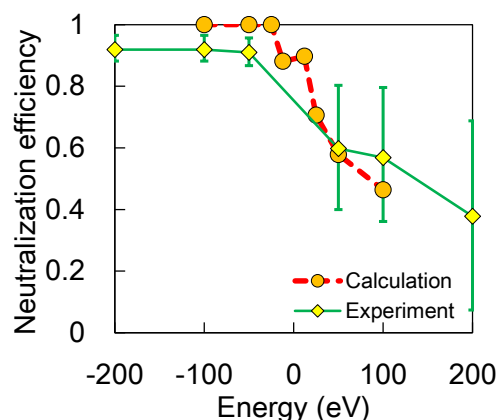


Fig. 1. Neutralization efficiency of positive and negative ions.