

3次元原子スケールセルモデルによるプラズマエッチングにおける 表面ラフネス形成機構の解明

Three-Dimensional Atomic-Scale Cellular Model Analysis for Surface Roughening during Plasma Etching

京大院工, °初瀬 巧, 園部 蒼馬, 中崎 暢也, 江利口 浩二, 斧 高一

Kyoto Univ., °Takumi Hatsuse, Soma Sonobe, Nobuya Nakazaki, Koji Eriguchi, and Kouichi Ono

E-mail: hatsuse.takumi.84w@st.kyoto-u.ac.jp

1. はじめに

近年、半導体デバイスの微細化に伴い、プラズマエッチングにおける高精度な加工形状制御の重要性がますます高まってきている。特に加工表面 (パターン側壁、底面) におけるラフネスの評価やその発現メカニズムについては、ナノスケールの計測とともに、シミュレーションによる予測が重要となっている。我々はこれまで、独自に開発した原子スケールセルモデル ASCeM (Atomic-Scale Cellular Model) を駆使して、ハロゲン混合プラズマにおける形状異常や表面ラフネスの発現メカニズム解明とその予測を行ってきた^[1-5]。本講演では3次元原子スケールセルモデル ASCeM-3D^[3-5] を用いて、Cl₂ プラズマによる Si エッチングにおけるナノスケールの表面ラフネス形成メカニズムについて考察する。

2. ASCeM-3D モデル

Fig. 1 に、ASCeM-3D モデルの概念図を示す。ASCeM-3D は、計算領域を1辺が Si 原子間距離に相当する 2.7 Å の立方格子に分割することにより、ナノスケールのラフネスを表現可能である。形状進展には、エッチング反応と堆積反応が競合する反応プロセスを表現するのに適したセル・リムーバル法を用いており、その表面反応プロセスの決定にはモンテカルロ法を用いている。

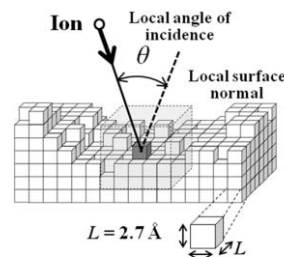


Fig. 1. Schematic of the ASCeM-3D model.

3. 計算結果

Fig. 2 に、Cl₂ プラズマによってエッチングされた Si 表面の形状について、基板表面温度 T_s 、反応生成物の表面吸着確率 S_q およびイオン表面散乱の有無による影響を示す。計算領域は $50 \times 50 \text{ nm}^2$ で、周期境界条件を課している。エッチング条件は、入射 Cl⁺ イオンエネルギー $E_i = 100 \text{ eV}$ 、Cl⁺ イオンフラックス $\Gamma_{\text{Cl}^+} = 1.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ 、中性 Cl 原子フラックス $\Gamma_{\text{Cl}} = 1.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ である。イオンの入射角度は $\theta_i = 45^\circ$ とし、基板表面温度を $T_s = 320 \text{ K}$ および 500 K 、反応生成物の表面吸着確率を $S_q = 0$ および 0.05 とした。図には、計算結果より算出したエッチング速度 ER 、表面ラフネスの平均二乗平方根 RMS をあわせて示す。

典型的条件 ($T_s = 320 \text{ K}$, $S_q = 0.05$ 、イオン表面散乱有り) では、イオン入射方向と直角にリップル (波状の周期構造) が形成される。 $S_q = 0$ とすると、 ER 、 RMS ともに微増し、同様にリップルが形成される。基板表面温度を $T_s = 500 \text{ K}$ に上げると、 ER は増大するが、 RMS は減少し、リップルも形成されない。またイオン表面散乱無しとすると、 ER は増大するが、 RMS は減少し、リップルも形成されない。これらの結果から、Si 基板表面温度およびイオン表面散乱は、エッチングにおける表面ラフネス/リップル形成に大きな影響を与える要素であると考えられる。

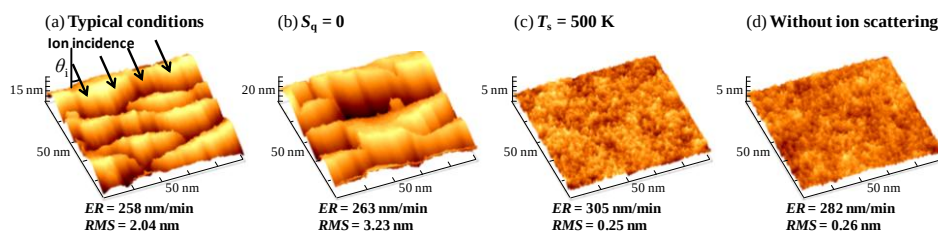


Fig. 2. Surface features of Si at $t = 60 \text{ s}$ after the start of etching in Cl₂ plasma, simulated using the ASCeM-3D for an ion incident energy $E_i = 100 \text{ eV}$ and ion incident angle $\theta_i = 45^\circ$ under different conditions: (a) Typical conditions, (b) sticking probability $S_q = 0$ of etch product species desorbed, (c) substrate surface temperature $T_s = 500 \text{ K}$, and (d) without ion scattering on microstructural feature surface. Note that typical conditions are: $S_q = 0.05$, $T_s = 320 \text{ K}$, and with ion scattering.

Reference

- [1] H. Tsuda, M. Mori, Y. Takao, K. Eriguchi, and K. Ono, Thin Solid Films **518** (2010) 3475.
- [2] H. Tsuda, M. Mori, Y. Takao, K. Eriguchi, and K. Ono, Jpn. J. Appl. Phys. **49** (2010) 08JE01.
- [3] H. Tsuda, H. Miyata, Y. Takao, K. Eriguchi, and K. Ono, Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 08JE06.
- [4] H. Tsuda, Y. Takao, K. Eriguchi, and K. Ono, Jpn. J. Appl. Phys. **51** (2012) 08HC01.
- [5] H. Tsuda, Y. Takao, K. Eriguchi, and K. Ono, J. Vac. Sci. Technol. B **32** (2014) 031212-1.