

# 量子分子動力学法を用いた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機構に関する研究

## Theoretical Study of Deposition of Etchant Species in Silicon-dioxide Etching Process via Quantum Chemical Molecular Dynamics Method

東北大院工<sup>1</sup>, 東北大流体研<sup>2</sup>, <sup>○</sup>伊藤 寿<sup>1</sup>, 桑原 卓哉<sup>1</sup>, 樋口 祐次<sup>1</sup>, 尾澤 伸樹<sup>1</sup>,  
寒川 誠二<sup>2</sup>, 久保 百司<sup>1</sup>

Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.<sup>1</sup>, Institute of Fluid Science, Tohoku Univ.<sup>2</sup>,

<sup>○</sup>Hiroshi Ito<sup>1</sup>, Takuya Kuwahara<sup>1</sup>, Yuji Higuchi<sup>1</sup>, Nobuki Ozawa<sup>1</sup>, Seiji Samukawa<sup>2</sup>, Momoji Kubo<sup>1</sup>

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

半導体デバイスや MEMS のさらなる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生成や堆積物の過剰成長等の課題の解決が急務である。これまでの我々の研究では基板表面における分子やラジカルの化学反応過程の解明のため、Tight-binding 量子分子動力学法を用い、 $CF_2$ 、 $CF_3$  ラジカルを  $SiO_2$  表面に照射するエッチングシミュレーションを行った[H. Ito et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **52**, 026502 (2013)]. 照射エネルギー10 eV では  $CF_2$  が高い化学反応性により多くの Si-O 結合を切断し、150 eV では  $CF_3$  が多くの Si-F 結合生成と Si-O 結合切断を起こすことで、エッチングに有利であることを明らかにした。しかし、プロセスにおける堆積物の成長過程の詳細は未だ分かっていない。 $CF_x$  ガスによるエッチングでは、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であり、CF 堆積の制御性向上が急務である。本研究では CF 堆積機構の解明のため、低照射エネルギーにて  $SiO_2$  エッチングシミュレーションを行った。

Fig. 1 に、 $CF_2$  及び  $CF_3$  を照射エネルギー1.0 eV にて  $SiO_2$  基板に 20 回照射したシミュレーションの結果を示す。 $CF_2$  照射では、 $SiO_2$  表面上の分子及び内部の Si や O 原子の周囲に 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)。  $CF_3$  照射では、 $SiO_2$  表面に吸着あるいは分子の状態が存在していた F 原子と  $CF_3$  が結合を生成し、 $CF_4$  として蒸発する様子が多く観察され、C-C 結合の生成はほとんど見られなかった(Fig. 1b)。これらのプロセスにおける C-C 結合数の推移を Fig. 2 に示す。Fig. 2 より、 $CF_2$  照射では連続的なラジカルの照射により C-C 結合数が増加している一方、 $CF_3$  照射ではほとんど C-C 結合が生成していないことがわかる。これは、 $CF_2$  の方が  $CF_3$  よりも多くの未結合手を持ち、C 原子の化学反応性が高いためであると考えられる。結果及び考察の詳細は当日発表する。

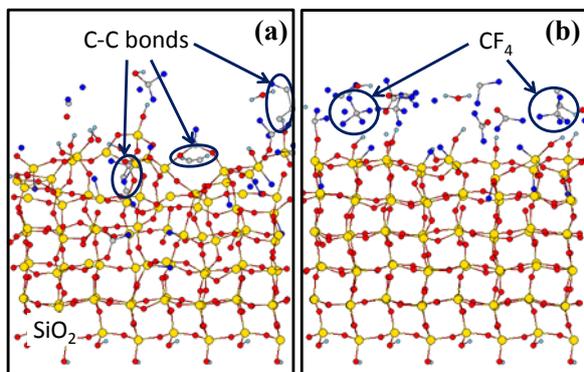


Fig. 1. Snapshots of the  $SiO_2$  etching simulations after 20 (a)  $CF_2$  and (b)  $CF_3$  radical irradiations.

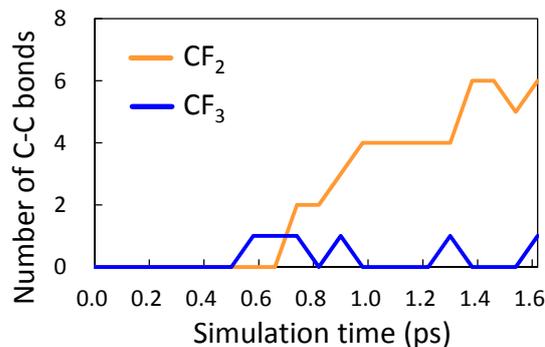


Fig. 2. Time evolution of Number of C-C bond in the  $SiO_2$  etching simulation by  $CF_2$  and  $CF_3$ .