

酸素中性粒子ビームによる酸化及び錯体反応を用いた遷移金属エッチングメカニズム (3)

Mechanism of transition metal etching process using neutral beam oxidation and complex reaction (3)

東北大学流体研¹、東京エレクトロン(株)²、東北大学金研³、東北大学 WPI-AIMR⁴

○久保田智広¹、菊地良幸²、野沢俊久²、伊藤寿³、久保百司³、寒川誠二^{1,4}

Inst. Fluid Sci., Tohoku Univ.¹, Tokyo Electron Ltd.², Inst. Mater. Res., Tohoku Univ.³, WPI-AIMR, Tohoku Univ.⁴,

○Tomohiro Kubota¹, Yoshiyuki Kikuchi², Toshihisa Nozawa², Hiroshi Ito³, Momoji Kubo³, and Seiji Samukawa^{1,4}

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。最近、谷・寒川らにより、中性粒子ビームによる酸化錯体反応を用いることにより遷移金属や磁性体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）や磁性体の表面にプラズマを通さず直接エタノールを吸着させ、その表面に酸素・アルゴン混合中性粒子ビームを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、従来にない全く新しいエッチング反応である。我々はそのエッチングメカニズムの理解を目指し、Ta エッチングを例に、第一原理理論計算を用いた理論的アプローチを試みている[2]。この反応は遷移金属の酸化・エタノールの吸着・錯体の形成と脱離、というプロセスで進行すると予想される。今回はエタノールが吸着した遷移金属酸化物表面に対して比較的低エネルギーのアルゴン原子を照射することで金属酸化物における金属-酸素結合が切断されることを計算的に見出したので報告する。

【計算】本検討においては、東北大学流体科学研究所の SGI UV1000/2000 システムを用い、Gaussian09 を用いて密度汎関数法に基づく計算を行った。Ta 酸化物表面にエタノールが吸着した構造のクラスターモデルを構築し計算を行うことで、エタノールの吸着構造について検討した。さらにそのモデルに運動エネルギーを持つアルゴン原子を衝突させる計算を行った。

【結果】計算の結果、Ta 酸化物表面にエタノールが吸着し、Ar 中性粒子ビームの運動エネルギーが供給されることで、エタノール中の H 原子が移動し酸化膜中の O 原子に結合することが分かった。これに伴い、酸化膜中の Ta-O 結合長は約 1.9 Å から約 2.1 Å へと変化し、それに伴いその結合は 0.4 eV 程度不安定化することが分かった（図 1）。これにより Ta-O 結合切断が促進され、最終的にタンタルのエトキシ錯体が形成しエッチングが進行すると考えられる。

[1] X. Gu, Y. Kikuchi, T. Nozawa, and S. Samukawa, J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 322002 (2014).

[2] 久保田ら、2014 年 第 75 回応用物理学会秋季学術講演会 19a-S10-14

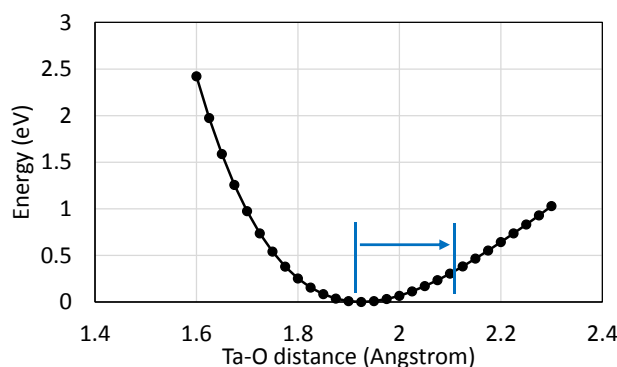


Fig. 1. Calculated dependence of energy on Ta-O distance in tantalum oxide.