

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 (2)

Mechanism of transition metal etching process using neutral beam oxidation and complex reaction (2)

東北大学流体研¹、東北大学 WPI-AIMR²

○久保田智広¹、菊地良幸¹、寒川誠二^{1,2}

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

○Tomohiro Kubota¹, Yoshiyuki Kikuchi¹, and Seiji Samukawa^{1,2}

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、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が、今回はエタノールが吸着した遷移金属酸化物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酸化物中の金属-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、Gaussian09 を用いて密度汎関数法に基づく計算を行った。タンタル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] 図 1(a),(b),(c)に、エタノールが吸着したタンタル酸化物表面に 7.6eV の運動エネルギーを持つアルゴン原子が衝突する反応の計算モデル（初期状態、中間状態、終状態）を示す。アルゴン原子の衝突によって、エタノールの OH 基の水素原子が移動してタンタル酸化物の酸素と結合し、それに伴ってタンタル酸化物のタンタル-酸素結合が切断したことが分かる。このような反応が順次起こることにより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

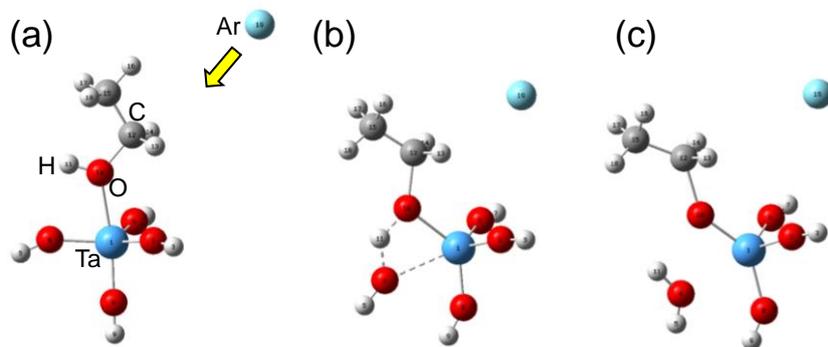


Fig. 1. Cluster model of Ar bombardment against tantalum oxide surface with adsorbed ethanol; (a) initial state, (b) intermediate state, and (c) final state.