

斜め堆積反応性蒸着の基板角度変化における堆積シミュレーション

Deposition Simulation in angular variation of glancing-angle reactive evaporation

○仲尾昌浩^{[院]¹}, 井上泰志¹, 高井 治² (1.千葉工大工, 2.関東学院大)

Akihiro Nakao¹, Yasushi Inoue¹, Osamu Takai²
(¹Chiba Inst. Technol., ²Kanto Gakuin Univ.)

E-mail : nakaoa123@gmail.com

1. はじめに

斜め堆積法は、自己遮蔽効果に基づく離散的ナノ柱状構造 (Isolated Nanocolumnar Structure : INS) を精密に制御した堆積膜を作製可能な手法である。斜め堆積法は、これまで真空蒸着法で主に利用されてきたが、筆者らは、反応性プラズマプロセスに斜め堆積法を適用し、窒化物の INS 形成に成功してきた。しかし、斜め堆積法による INS 形成の適正条件に関しては十分に明らかになっていない。本研究は、雰囲気ガス中での基板への原子堆積を、基板設置角度を変えシミュレートすることで、角度変化による薄膜の構造への影響を探ることを目的とする。

2. 研究方法

本研究で構築したプログラムは、蒸発する原料原子の初期条件として、Maxwell-Boltzmann 型のエネルギー (速度) 分布と cos 型蒸発角度分布を仮定し、坩堝から放射した原料原子が基板表面へ入射した際の原料原子の座標、入射角度成分、および速度成分等を記録する Unit 1 と、Unit 1 で得られた角度成分および速度成分から、基板表面での原子の Hopping マイグレーションとエネルギー移送を考慮した計算を行い、堆積膜構造をシミュレートする Unit 2 からなる。本研究では、In 原子と雰囲気 N₂ ガスとの散乱発生環境において、基板設置角度の変化が堆積構造へ及ぼす影響についてシミュレートした。Unit 1 の計算条件として、成膜圧力を 0.1 Pa、坩堝-基板距離を 150 mm、基板の設置角度を坩堝法線に対して 65°, 75°, 85°とした。Unit 2 では、堆積膜の表面吸着ポテンシャルを 0.2 eV、入射原子から近接原子へのエネルギー移送率を 0.1 meV/atom・step とし、入射原子は完全なランダムウォークの Hopping 機構によるマイグレーションを、エネルギーが基板温度程度まで熱化するまで行うと設定した。

3. 結果および考察

マトリクスサイズおよび高さ限界を 64 ピクセルとした薄膜堆積シミュレートの結果から、リニアグラフ 3D を用いて作成した堆積図を Fig.1~3 に示す。基板設置角度 65°, 75°の薄膜では、共に殆ど空隙が無いが、75°では表面近傍に自己遮蔽効果による窪みが現れて始めている。85°の薄膜では明確な深い空隙があり、この構造体は INS 形成の成長段階のものだと確認できる。従って、INS 形成には 75°以上の基板設置角度が必要となることがわかった。

各基板設置角度条件における、入射原子の平均 Hopping 回数および平均初期エネルギーを Table.1 に、また堆積膜の空隙率を Table.2 にそれぞれ示す。基板設置角度の増加に伴い、表面での Hopping 回数が増加している。これは、基板設置角度の増加に伴う表面凹凸構造の増大により、入射原子から見た近接原子が減少し、Hopping 中のエネルギー減衰率が低下したためであると考えられる。

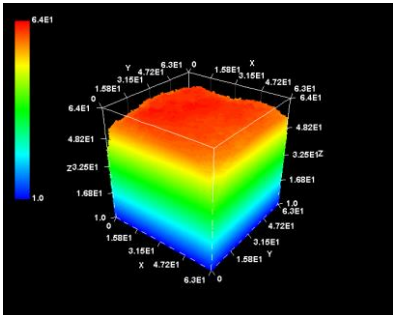


Fig.1 基板設置角度 65°における堆積膜の3Dグラフ。

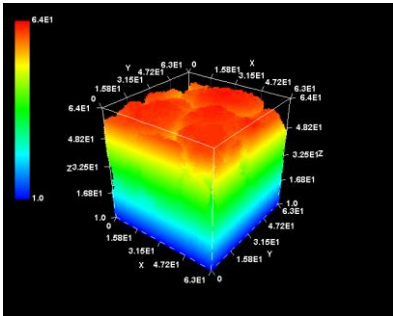


Fig.2 基板設置角度 75°における堆積膜の3Dグラフ。

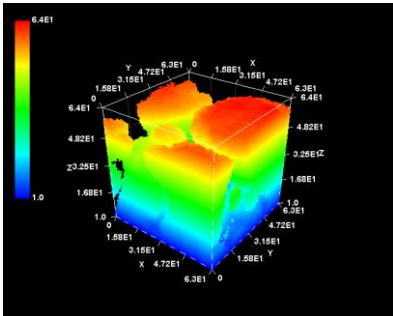


Fig.3 基板設置角度 85°における堆積膜の3Dグラフ。

Table.1 入射原子の平均 Hopping 回数および平均初期エネルギー

	65°	75°	85°
Hopping	20.9	21.4	21.7
Int eV	0.110	0.111	0.109

Table.2 堆積膜の空隙率

	65°	75°	85°
Porosity	7.7%	10.6%	31.9%