

# 高指向性坩堝を用いた斜め堆積反応性蒸着のシミュレーション

## Simulation of Glancing-angle Reactive Deposition with High Directional Crucibles

○(B) 泉澤 宏樹<sup>1</sup>, 仲尾 昌浩<sup>1</sup>, 井上 泰志<sup>1</sup>, 高井 治<sup>2</sup>  
 ○Hiroki Izumisawa<sup>1</sup>, Akihiro Nakao<sup>2</sup>, Yasusi Inoue<sup>1</sup>, Osamu Takai<sup>2</sup>  
<sup>1</sup>Chiba Institute of Technology, <sup>2</sup>Kanto Gakuin University  
 E-mail: s1321029gk@s.chibakoudai.jp

### 1. 緒言

斜め堆積法 (Glancing-angle Deposition : GLAD) は, 離散的ナノ柱状構造 (Isolated Nanocolumnar Structure : INS) を有する薄膜をボトムアップ式に作製できる手法である. その原理は自己遮蔽効果に基づき, 狭い原料流束角度分布が必須であるため, 真空蒸着法により様々な材料で INS 形成が報告されている. 一方, 反応性ガスやプラズマ環境下では, 気相中の散乱により自己遮蔽効果が低下するため, 窒化物など反応性環境を必要とする材料ではほとんど INS 研究例がない. また, 原料流束に対して基板を大きく斜めに設置するため, 大面積への均一な INS 形成は困難である. これらの課題に対し, 高指向性坩堝を複数配列することにより, 反応性環境下でも大面積へ均一な INS 形成が可能であると予想される. 我々はこれまで, 高指向性坩堝を開発し, その INS 制御性を研究してきたが, 気相中の散乱効果を超える原料流束角度分布の広がりが見出された. 本研究では, 反応性蒸着プロセスにおいて, 高指向性坩堝の内壁における再蒸発を考慮したシミュレーションを行い, 原料流束角度分布の広がり要因を調査することを目的とする.

### 2. 研究方法

本研究で構築したシミュレーションプログラムは, 坩堝内の熔融原料から出射した原料原子が基板へ到達するまでの間に, 気相中でどのような散乱を受けるかをモンテカルロ法に基づいて計算する. 原料原子の初期条件として, 温度 0.1 eV の Maxwell-Boltzmann 型エネルギー分布と,  $\cos$  型角度分布を仮定した. 気相中の散乱発生確率は平均自由行程を減衰定数とする指数関数として算出した. 原料原子を In, 雰囲気ガス種を  $N_2$ , 成膜圧力は 0.1 Pa とした. 100 mm × 100 mm のサイズの基板を, 坩堝法線に対して 85° の角度で設置した. 原料原子が坩堝側壁に付着した場合, その位置からの再蒸発確率  $r$  を変化させてシミュレーションを行った.

### 3. 結果と考察

Fig. 1 に, 単一坩堝から基板に到達した原子の入射角度分布を示す.  $r=0$  (再蒸発なし) の場合, 気相中の散乱による低角度側への分布の広がりが見られるが, 基板角度の 85° 付近に鋭いピークが存在し, INS 形成が可能であることが示される. 一方,  $r=1.0$  の場合, 坩堝側壁によるコリメータ効果が消失するため, さらに大きい角度分布の広がりが見られる. Fig. 2 に, 基板面上の位置に対する堆積原子数の分布, すなわち膜厚分布を示す. 再蒸発ありの場合, 気相中の散乱効果を大きく超える原料流束の広がりにより, 高指向性蒸発源として機能せず, INS 形成が不可能であることがわかった. 以上の結果から, 反応性蒸着プロセスによる大面積基板への INS 形成には, 坩堝内壁からの再蒸発を防ぐことが必須であるといえる.

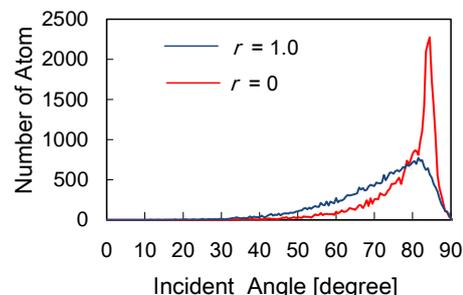


Fig. 1. Incident-angle distributions of the indium atoms on the substrate surface.

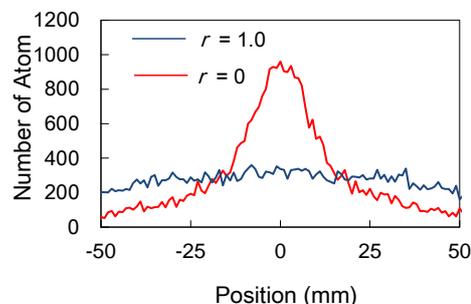


Fig. 2. Positional distributions of the indium atoms on the substrate surface.