

F, N, および CF ラジカルを用いた SiGe/Si 選択エッチの第一原理計算解析

SiGe/Si Selective Etching using F, N and CF radicals via Ab-initio Calculations

日立研開¹, 日立ハイテク², ○菅野 量子¹, 岩瀬 拓¹, 桑原 謙一²

Hitachi R&D Group¹, Hitachi High-tech², ○Ryoko Sugano¹, Taku Iwase¹, Kenichi Kuwahara²

E-mail: ryoko.sugano.qq@hitachi.com

GAA-FET 加工プロセスにおいては SiGe/Si 高選択性加工が要求される。等方性 SiGe/Si 選択エッチング技術はハロゲン系ラジカルを用いることが知られており, F ラジカルでは Cl, Br と比較して顕著に高い選択比が得られている[1]。また, CF ラジカルがあると CF デポが課題となるが, SiN, SiC 表面上では N をラジカルにより CF デポが抑制されることが報告されている[2]。C, N, F ラジカルを用いて Si および SiGe 表面に形成される CF デポ膜を制御できれば SiGe/Si 選択性を制御できる可能性がある。

そこで本研究では, F, CF および N ラジカルを用いた等方性 SiGe/Si 選択的エッチングに対する知見を得るため第一原理計算を用いた解析を行った。まず, Fig. 1 のように Si_{0.75}Ge_{0.25} 表面の F によるエッチングが F 吸着によるエッチング前駆体 SiF₃(GeF₃) 構造が遷移状態を経て SiF₄(GeF₄) で脱離すると仮定し, Si_{0.75}Ge_{0.25} 表面の安定性を生成エネルギー E_{gen} から解析した。次に, エッチング前駆体の脱離過程に Nudged-Elastic Band 法による解析を行い, エネルギーバリア E_{bar} を計算した。さらに, CF デポに着目した表面モデルを構築し CF の表面吸着および脱離に対する安定性解析を行った。

Fig. 2 は F 供給サイトの違いによる脱離エネルギーバリア E_{bar} を比較したものである。SiGe 表面上では GeF-Si(Ge)F₃ 構造の E_{bar} は SiF-Si(Ge)F₃ 構造と比較して約 1/2 に低下し, Si 表面での E_{bar} のより顕著に下がる。

Fig. 3 は GeF-Si(Ge)F₃ 構造の E_{gen} と SiF₄(GeF₄) 脱離の E_{bar} との関係を示す。 E_{gen} が高かつ E_{bar} が低いほど脱離が起こり易い。SiGe 表面では E_{bar} が低い Ge と結合した Si サイトの選択的脱離による表面 Ge 組成の増加と Ge サイトの脱離が交互に繰り返されエッチングが進行すると推測する。従って SiGe 表面では Si 表面より低い E_{bar} でエッチングが進行し, SiGe/Si 選択性が発現すると考えられる。

また, 揮発性 CN_xF_y の吸着脱離の安定性解析より, CN_xF_y の吸着状態は Si サイトの方が安定となる一方, 脱離後状態は Ge サイトの方が安定となることが判った。Ge サイトへは CN_xF_y が吸着し難く脱離し易いため, Si サイトへの選択的な CN_xF_y デポが促進され F による SiGe/Si 選択性を向上させると考えられる。

[1] G. S. Oehrlein, et al., Appl. Phys. Lett. 58, 2252 (1990).

[2] Xuefeng Hua et al., J. Vac. Sci. Technol. A 21, 1708 (2003).

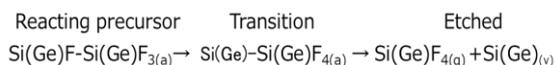


Fig. 1 Reaction sequence of Si(Ge)F₄ desorption.

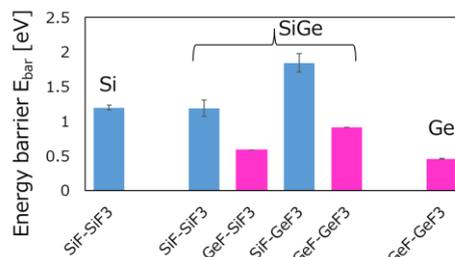


Fig. 2 Desorption energy barrier classified by source site of F.

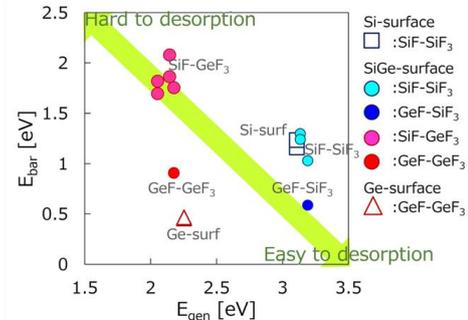


Fig. 3 Energy profile of desorption process.