

SiGe 表面での水素を用いた Si サイト選択的脱離の第一原理計算解析

Si-site Selective Removal from SiGe using Hydrogen Plasma via Ab-initio Calculations

日立研開¹, 日立ハイテクアメリカ², 日立ハイテク³ ○菅野 量子¹, 石井 洋平², 三浦 真³,

桑原 謙一³

Hitachi R&D Group¹, Hitachi HTA², Hitachi HT³, [○]Ryoko Sugano¹, Yohei Ishii², Makoto Miura³,
Kenichi Kuwahara³

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

高移動度 SiGe を用いたデバイスの作製プロセスでは、Si と SiGe の同時加工技術が必要となる。Si と SiGe との選択性を制御するためには、従来のハロゲン系エッチャントを用いた SiGe 選択エッチングプロセスに加えて、Si 選択エッチングを実現するプロセスを検討する必要がある。最近、水素プラズマを用いた実験から Si 選択エッチングが報告され、SiGe 表面における Si サイトの選択的なエッチングがその要因と考えられている。さらに、水素プラズマエッチング後の SiGe 表面で Si 偏析が観測され、Si サイトの選択的エッチングとの関連性が指摘されている[1]。

そこで本研究では、水素プラズマによる Si サイトの選択的なエッチングメカニズムを明らかにするために第一原理計算を用いた解析を行った。Fig. 1 のように Si_{0.5}Ge_{0.5} 表面の水素によるエッチング過程を水素吸着によるエッチング前駆体の生成過程とエッチング前駆体の脱離過程に分けてモデル化した。まず、水素吸着過程の安定性を生成エネルギー E_{gen} から解析した。また、エッチング前駆体の脱離過程の始状態と終状態を用いて 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、Si サイトの表面偏析の可能性をサイト置換モデルを用いてその安定性から解析した。

Fig. 2 に水素吸着過程の各段階での生成エネルギー E_{gen} を示す。全段階で Ge サイトの方が Si サイトより E_{gen} は小さくなり、かつ、GeH₂ では E_{gen} の符号は SiH₂ と異なり負となる。Si サイトのほう Ge サイトよりも水素が吸着し易く、かつ、GeH₂ 段階では吸着水素の脱離が起こりやすい。Fig. 3 はエッチング前駆体の脱離過程のエネルギーバリア E_{bar} を示す。Si サイトの E_{bar} は Ge サイトより低く脱離し易い。Si サイトの選択的脱離が起こる原因は(1) Si サイトの方が Ge サイトよりエッチング前駆体が形成され易くかつ (2) Si サイトのほう脱離し易いためであることが分かった。

また、サイト置換モデルによる安定性解析より、表面 Ge サイトが水素で終端されると、その直下の Si サイトと置換した方が安定となることが判った。水素プラズマ照射下の SiGe 表面では Si サイトの選択エッチングにより表面に Ge サイトが新たに現れる。この Ge サイトが水素終端されると Si サイトとの置換、つまり Si 偏析が起こりやすく、Si サイトの選択エッチングが促進されると考えられる。

[1] Y. Ishii et al., Jpn. J. Appl. Phys. 57,06JC04 (2018).

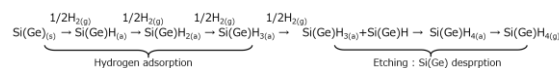


Fig. 1 Reaction sequence with hydrogen adsorption and etching.

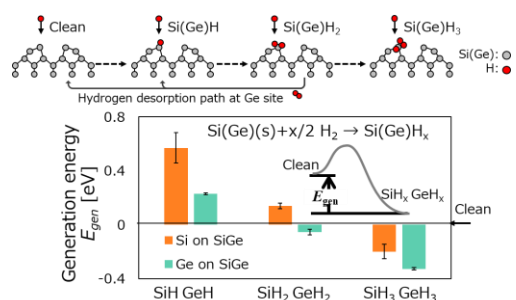


Fig. 2 Generation energy of each stage for SiGe(001)surface of H-adsorption process.

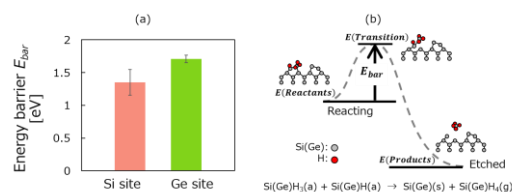


Fig. 3 Energy barrier of desorption.