

# 量子分子動力学法によるシリコン酸化膜の 高選択性フルオロカーボンラジカルエッチングプロセス

○伊藤 寿, 尾澤 伸樹, 島崎 智実, 久保 百司

東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター

(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11)

## 1. 緒言

電子機器の小型化・高性能化・多機能化により、半導体素子は数 10 ナノメートルの微細加工が必須となってきた。SiO<sub>2</sub> 基板をエッチングする場合、フルオロカーボンガスをプラズマ状態にし、得られたフッ素系ラジカルなどの粒子を照射する方法が多く用いられている[1]。しかし、ラジカルの照射時に表面との化学反応によって残留物が生成され、エッチングの異方性を損なうことなどが問題となっている[2,3]。そのため、微細加工において異方性を保つ高選択性エッチングプロセスの確立が急務であり、反応性ガス分子、イオン、ラジカルの挙動を電子・原子レベルで解析する必要がある。そこで、Tight-Binding 近似に基づく量子分子動力学法を用い、シリコン酸化膜 SiO<sub>2</sub> 表面のフルオロカーボンラジカルによるエッチングプロセスのダイナミクス解析を行った。

## 2. 計算方法

本研究では Tight-Binding 量子分子動力学法プログラム Colors を使用し、SiO<sub>2</sub> 基板モデルに対し任意の初速度を与えたフルオロカーボンラジカル CF<sub>2</sub> を照射させるエッチング過程のシミュレーション計算を行った。計算に用いた SiO<sub>2</sub> モデルは、表面を OH 終端した。

## 3. 結果と考察

反応時の様子を Fig.1 に示す。CF<sub>2</sub> は SiO<sub>2</sub> へ衝突、C と F は解離し、基板中の Si、O と化学反応を起こし始めた。F は Si-O 結合が切断された Si と結合し、Si-F 結合を形成した。C は O との結合を生成した。

次に、生成した結合に関連した原子について Atomic Bond Population を計算した(Fig.2)。Fig. 1 において、F<sub>A</sub> と

結合した Si 原子(Si<sub>A</sub>) に注目し計算した結果を Fig. 2 に示す。また、計算において選択した原子を Fig. 1 (b), (c) 上で示す。Fig. 2 から、300 fs 付近で Si<sub>A</sub>-F<sub>A</sub> 結合が生成し、それに伴い 400 fs までに Si<sub>A</sub>-O<sub>A</sub> 結合が切断されていることが分かる。さらに、複数の CF<sub>2</sub> を照射させた後の反応過程では、CO や CO<sub>2</sub> の蒸発、複数の Si-F 結合を持つ Si などが確認できた。この挙動は、CO、CO<sub>2</sub>、SiF<sub>4</sub> などが生成するという実験での結果[4,5]に合致している。

以上より、量子分子動力学法を用いることで、フルオロカーボンラジカルによる SiO<sub>2</sub> エッチングプロセスのシミュレーション解析に成功した。フルオロカーボンラジカルと SiO<sub>2</sub> との衝突により Si-O 結合が切断され、その後 F は基板中の Si と結合し、C は O との結合を生成する挙動が確認できた。

## 4. 参考文献

- [1] M. Sekine et al., J. Plasma Fusion Res. **83**, 319 (2007).
- [2] N. Negishi et al., J. Plasma Fusion Res. **85**, 193 (2009).
- [3] J. K. Lee et al., J. Electrochem. Soc. **156**, D269 (2007).
- [4] B. Zhou et al., J. Vacuum Sci. **A24**, 114 (2006).
- [5] K. Takahashi et al., Jpn. J. Appl. Phys. **35**, 3635 (1996).

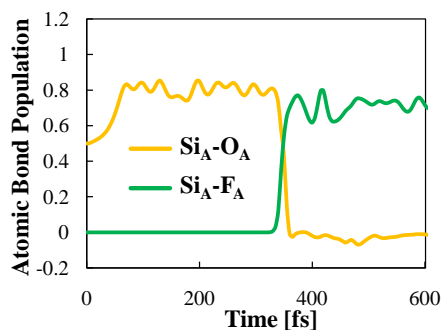


Fig. 2. Time evolution of Atomic Bond Population on Si<sub>A</sub> atom when CF<sub>2</sub> radical was bombarded onto a SiO<sub>2</sub> substrate

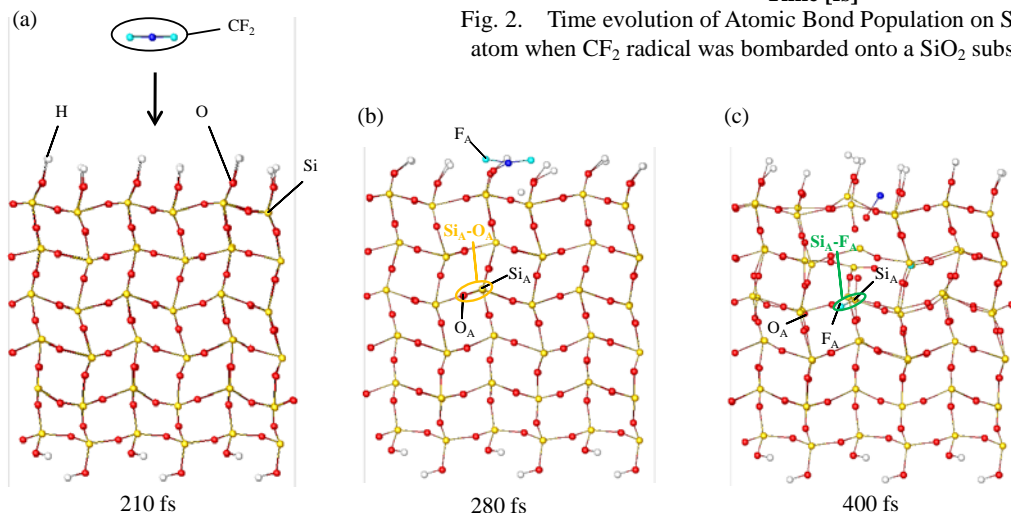


Fig. 1. Dynamic behavior of CF<sub>2</sub> bombardment onto SiO<sub>2</sub> surface