

量子分子動力学法による GaN の Cl ラジカル エッチングプロセスの解析

○ 柳谷 一行、樋口 祐次、尾澤 伸樹、島崎 智実、久保 百司

東北大学大学院工学研究科

(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

【緒言】 GaN は広い光の透過波長域を持っていることや、強い自発分極を有しているといった特徴から光デバイスとしての応用が期待されている材料である。GaN の加工にはプラズマエッチングが広く用いられているが、微細スケールにおいて形状欠陥が生じてしまうことが問題となっている[1]。微細加工実現のためには、エッチングプロセスにおける原子、イオン、ラジカルの挙動及び化学反応過程を電子・原子レベルで解析する必要がある。そこで、Tight-binding 量子分子動力学法を用いて、GaN の Cl ラジカルによるエッチングプロセスについて解析を行った。

【方法】本研究では Tight-binding 量子分子動力学法プログラム Colors を使用した。GaN(0001)面に対して任意の初速度を与えた Cl ラジカルを照射することで、エッチングシミュレーションを実現した。照射する Cl ラジカルは 10 個とし、温度は 300 K に設定した。

【結果】シミュレーションによって得られたエッチングプロセスの様子を図 1 に示す。一つ目に照射した Cl ラジカルは約 30 fs で基板に衝突し、その後、表面に留まっている。二つ目に照射した Cl ラジカル周辺の挙動に着目すると、Cl ラジカルは約 40 fs 過ぎに GaN 基板に衝突し、基板内に侵入する。約 60 fs では Ga-N 間の結合が一箇所切断され(図 1b, d)、約 80 fs で N との結合が切れた Ga と二つ目に照射された Cl ラジカルが結合している様子が観察された(図 1c, e)。9 個の Cl ラジカル照射後には、Ga-N 間の結合が切断されることで、N-N 間の結合が基板内に生成されている様子が見られた(図 2a)。10 個目に照射された Cl ラジカルによって図 2a に示した Ga-N 間の結合が切断されることで N₂ が生じ(図 2b)、その後、生成した N₂ が蒸発する様子が確認できた(図 2c)。GaN の Cl₂ を用いたエッチングでは主に N₂、GaCl₃ の生成が実験により示されており[2]、シミュレーションによって得られた N₂ の生成は上記の実験結果とよく一致する。また、確認された Ga-Cl 結合の生成は GaCl₃ が生じる反応素過程であると言える。以上より、Cl ラジカルによる GaN のエッチングプロセスのシミュレーションに成功した。

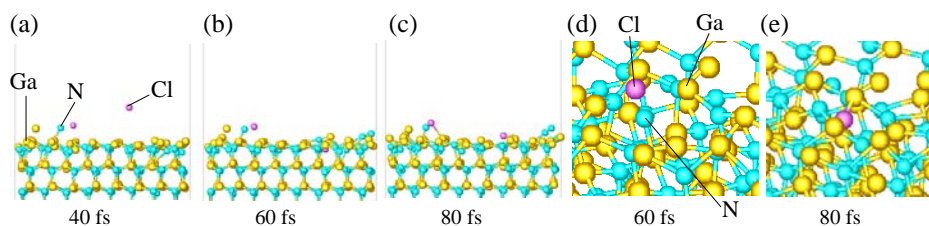


図 1 Cl ラジカルによる GaN のエッチング挙動 (d), (e)は(b), (c)の拡大図

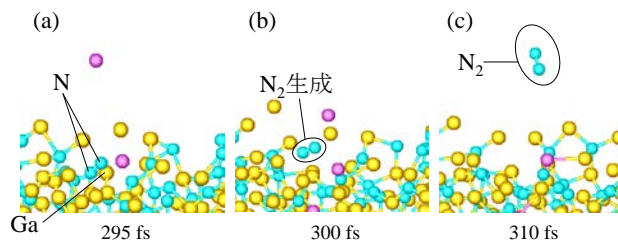


図 2 エッチング過程における N₂ の生成

【参考文献】 [1] J. Ladroue et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **28**, (2010) 1226.

[2] H. S. Kim et al., *Mater. Sci. Eng. B*, **50**, (1997) 82.