

量子分子動力学シミュレーションを用いた CF_x ラジカルによる SiO_2 エッチングメカニズムの解明○伊藤 寿¹、桑原 卓哉¹、樋口 祐次¹、尾澤 伸樹¹、寒川 誠二²、久保 百司¹¹ 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)² 東北大学流体科学研究所(〒980-8577 仙台市青葉区片平 2-1-1)

【緒言】

MEMS 及び半導体デバイスのさらなる高集積化のため、ナノメートルオーダーでの超微細加工技術の実現が求められている。しかし、フルオロカーボンガスを用いたシリコン酸化膜 SiO_2 のプラズマエッチングにおいては、加工スケールの微細化に伴うサイドエッチや副生成物の過剰堆積による形状欠陥の発生が大きな課題となっている。従って、高精度な超微細加工の実現のため、エッチングプロセスにおける SiO_2 表面での化学反応ダイナミクス解明が急務となっている。特に、実験や従来なされてきた古典分子動力学法では、基板表面反応における電子の移動を含む化学反応過程が未解明である。そこで、量子分子動力学法を用い、 CF_x ラジカルによる SiO_2 エッチングプロセスについて化学反応過程の解析を行った。

【方法】

本研究では Tight-Binding 近似に基づく量子分子動力学法を用い、 SiO_2 基板に任意の照射エネルギーを持った CF_x ラジカルを照射させるエッチングシミュレーションを行った[1]。照射ラジカルには CF_2 及び CF_3 を選択し、ラジカル種によるエッチングメカニズムの違いについて考察した。

【結果】

CF_2 及び CF_3 の照射エネルギーを 10 eV としエッチングシミュレーションを行った結果、 CF_2 、 CF_3 が SiO_2 基板へ衝突した際に、ラジカル中の C-F 結合及び SiO_2 基板中の Si-O 結合が切断され、新たに C-O、Si-F 結合が生成する挙動が観察された。その後、ラジカルの連続照射による反応により CO、 CO_2 、COF、 COF_2 分子の生成が確認された。これらの生成した分子の種類は、実験結果とも合致している[2]。シミュレーション中の Si-O 結合数の推移から、10 eV におけるエッチングではジラジカルである CF_2 が高い化学反応性によって、 CF_3 よりも多くの Si-O 結合を切断し、エッチングを促進させることが分かった。次に 150 eV にてエッチングシミュレーションを行った結果、10 eV の場合と同様に C-O、Si-F 結合や、CO、 CO_2 分子の生成が観察された(図 1)。 CF_3 照射の場合には、新たに SiF_4 分子の生成が観察され、 SiO_2 基板内の Si 原子の脱離過程が確認された。また、図 2 に示した Si-O 結合数の推移より、 CF_3 の方が CF_2 よりも多くの Si-O 結合を切断していることが分かる。これは、 CF_2 よりも F 原子を多く持つ CF_3 の方が、化学反応を多く起こし、多くの Si-F 結合を生成することで、エッチングを促進しているためであると考えられる。以上から、ラジカル種によって異なる化学反応過程が明らかとなり、エッチングメカニズムの解明に成功した。

【参考文献】

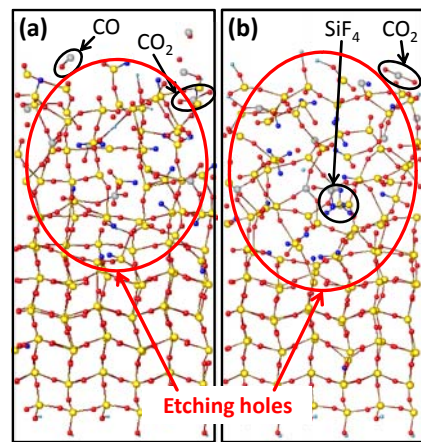
[1] H. Ito et al., *Jpn. J. Appl. Phys.*, **52**, 026502 (2013).[2] J. W. Coburn et al., *J. Vac. Sci. Technol.*, **16**, 391 (1979).

図 1. 照射エネルギーを 150 eV とした場合の(a) CF_2 、(b) CF_3 ラジカル照射による SiO_2 エッチングシミュレーション結果

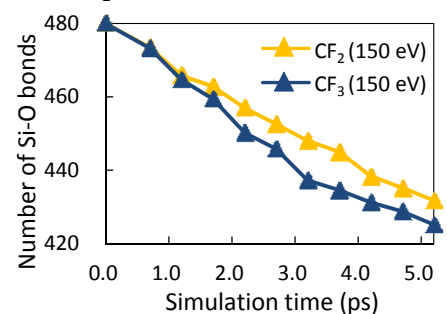


図 2. 照射エネルギーを 150 eV とした場合の SiO_2 エッチングシミュレーションにおける Si-O 結合数の推移