

量子分子動力学法を用いた GaN 基板のエッチングにおける

Cl ラジカルとの反応機構の検討

○柳谷 一行, 伊藤 寿, 桑原 卓哉, 樋口 祐次, 尾澤 伸樹, 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 はバンドギャップが大きいことや, 広い光の透過波長域を持っているといった特徴から電子デバイスや光デバイスへ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という手法が広く用いられている. しかし, 微細スケールでの加工では, その加工過程において形状欠陥が生成することが問題となっている[1]. この問題を解決するためには, エッチングプロセスにおける原子, イオン, ラジカルの挙動や化学反応過程を電子・原子スケー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ることで, 塩素ガスによる GaN の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)面と GaN(000-1)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エッチングシミュレーションを行った.

【結果】

エッチングにおける GaN 表面と Cl ラジカルの素反応を明らかにするために, GaN(0001)面と GaN(000-1)面の表面上における 3つのサイトに対して 1個の Cl ラジカルを照射するシミュレーションを行った. 照射するラジカルには, 5 eV の運動エネルギーに相当する初速度を与えた. 計算結果より, GaN(0001)面では 1つのサイトでのみ Ga-N 結合の切断が見られたのに対し, GaN(000-1)面では, 全てのサイトで Ga-N 結合の切断が観察された. さらに, 化学反応過程の違いを明らかにするために GaN 両表面に 15 個の Cl ラジカルを連続的に照射するシミュレーションを行い(図 1), Ga-N 結合数の時間推移の比較を行った. その結果, GaN(0001)面と比較して, GaN(000-1)面ではより多くの Ga-N 結合の切断が起きていることが明らかとなった(図 2). これらの結果から, GaN(000-1)面におけるエッチングレートが高いことが示唆された. これは実験における傾向と一致している[2]. 以上から, GaN の面方位によって異なるエッチング挙動が明らかとなった.

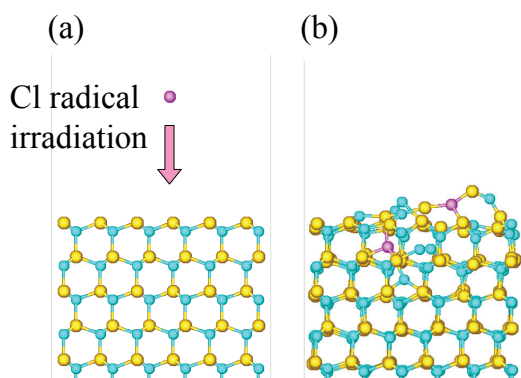


図 1. GaN(0001)面でのエッチングシミュレーション
(a) 0 ps, (b) 2.9 ps

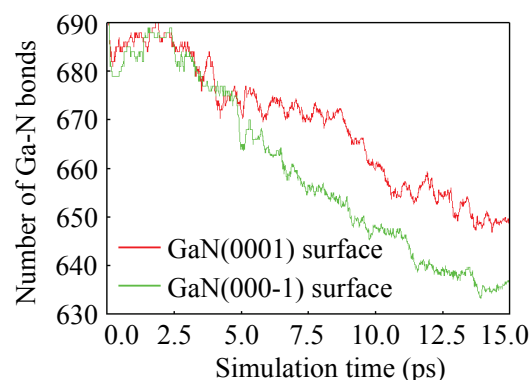


図 2. エッチングシミュレーションにおける Ga-N 結合数の推移

【参考文献】

- [1] J. Ladroue et al., *J. Vac. Sci. Technol. A*, **28**, 1226 (2010).
[2] F. Rizzi et al., *Phys. Stat. Sol. C*, **4**, 200 (2007).