

Title	フッ素および塩素によるSi(001)表面原子のエッチング機構に関する研究
Author(s)	岡田, 浩巳
Citation	大阪大学, 2000, 博士論文
Version Type	
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/42101">https://hdl.handle.net/11094/42101</a>
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉</a> 大阪大学の博士論文について <a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">〈/a〉</a> をご参照ください。

***Osaka University Knowledge Archive : OUKA***

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏 名	岡 田 浩 巳
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)
学 位 記 番 号	第 1 5 4 1 7 号
学 位 授 与 年 月 日	平成12年3月24日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科精密科学専攻
学 位 論 文 名	フッ素および塩素による Si (001) 表面原子のエッチング機構に関する研究
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 森 勇 藏
	(副査) 教 授 芳 井 熊 安    教 授 片 岡 俊 彦    教 授 広 瀬 喜 久 治 助 教 授 遠 藤 勝 義    教 授 森 田 瑞 穂    教 授 青 野 正 和 教 授 梅 野 正 隆

### 論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、フッ素および塩素によるSi (001) 表面原子のエッチング機構を原子レベルの計測ならびに第一原理分子動力学による理論計算によって研究した成果をまとめたものであり、8章より構成されている。

第1章では、本研究の背景と目的を述べ、フッ素および塩素とSi (001) 表面との反応に関する過去の基礎的研究について総括している。

第2章では、本研究で用いたプラズマCVM (Chemical Vaporization Machining) 装置ならびにSi (001) 表面の表面状態を計測するために用いた走査トンネル顕微鏡 (STM)、低速電子回析 (LEED)、昇温脱離分析 (TDS) について述べている。

第3章では、固体表面における反応素過程や電子状態・原子構造を理論的に解析するために用いた第一原理分子動力学シミュレーションの手法について説明している。

第4章では、STMによるSi (001)  $2 \times 1$  清浄表面の非対称ダイマーの観察と量子力学の第一原理に基づくSTM像のシミュレーションを行っている。STM観察時の試料バイアス電圧ならびにトンネル電流 (探針-試料間距離) によるSTM像の変化をシミュレーションにより再現している。さらに、STM像と表面準位やバルク準位との関係やSTM像と表面原子構造との関係について明らかにし、STM観察像を解釈する上で第一原理計算が非常に有効であることを示している。

第5章では、Si (001) 表面原子に対するフッ素と塩素の影響を明らかにするため、フッ素および塩素を吸着させたSi (001)  $2 \times 1$  表面のSTM観察ならびにそれぞれのSi (001) 表面への反応素過程シミュレーションを行っている。その結果、 $F_2$  と  $Cl_2$  分子はSi (001)  $2 \times 1$  表面の非対称ダイマーに解離吸着し、その非対称ダイマーは幾何学的に水平になり対称ダイマーとなることをSTM観察およびシミュレーションから明らかにしている。

第6章では、フッ素、塩素を反応ガスとしてプラズマCVM加工したSi (001) 表面をSTM、LEED、TDSを用いて観察している。その結果、STMでは、フッ素、塩素それぞれに特有の原子構造を観察している。LEEDからは、フッ素では4~5原子層の表面構造に乱れが生じ、塩素ではそれが無いことを明らかにしている。また、TDSにより、フッ素ではSiを含む脱離種が検出されたが、塩素では検出されなかったことを示している。これらの結果から、フッ素および塩素によりSi (001) 表面を加工した場合、それらの表面状態が異なることから、それぞれの加工特性に違いがあることを見いだしている。

第7章では、プラズマCVMを含めたドライエッチングにおけるフッ素と塩素とのSi(001)表面原子への反応性の違いを第一原理分子動力学シミュレーションにより検討している。その結果、塩素に比べフッ素の方が、1個のSi表面原子に複数個吸着しやすいことを明らかにし、第6章の結果と合わせて考察することにより、フッ素と塩素の原子半径の違いが、加工現象の相違を生む一つの要因であると結論づけている。さらに、フッ素と塩素によるSi(001)表面原子のエッチング機構について論じている。

第8章では、本研究で得られた成果についてまとめ、本論文の総括としている。

## 論文審査の結果の要旨

ハロゲンを用いたドライエッチングは、半導体デバイス製造において必要不可欠な技術であり、そのエッチング機構を解明することはエッチング後の表面状態やエッチング条件などの最適化を行う上で重要である。本論文は、フッ素および塩素によるSi(001)表面原子のエッチング機構を明らかにすることを目的とし、STM、LEED、TDSならびに第一原理計算を合わせた原子レベルの研究結果をまとめたものであり、その主な成果を要約すると次のとおりである。

- (1) Si(001)  $2 \times 1$  表面の非対称ダイマーについて、STM観察時の試料バイアス電圧ならびに制御するトンネル電流(探針-試料間距離)によるSTM像の変化を量子力学の第一原理に基づくシミュレーションにより再現している。さらに、表面単位ならびにバルク単位の状態密度の空間分布が、STM像にどのように関与しているかを明らかにしている。
- (2)  $F_2$  および  $Cl_2$  分子はSi(001)  $2 \times 1$  表面の非対称ダイマーに解離吸着し、その非対称ダイマーは幾何学的に水平になり対称ダイマーとなることをシミュレーションから明らかにし、STM観察結果を理論的に実証している。
- (3) フッ素、塩素を反応ガスとしてプラズマCVM加工したSi(001)表面をSTM、LEED、TDSにより観察し、フッ素では最表面から4、5原子層程度にF原子が潜り込むと同時にエッチングが進行するが、一方、塩素ではCl原子が潜り込むことなく最表面付近でのみエッチングが進行するという加工特性の違いを明らかにしている。
- (4) フッ素と塩素とのSi(001)表面原子への反応性の違いを第一原理分子動力学シミュレーションにより調べ、塩素に比べフッ素の方が、1個のSi表面原子に複数個吸着しやすいことを明らかにしている。この吸着の相違は、フッ素と塩素の原子半径が異なることが原因であり、プラズマCVMにおけるフッ素と塩素のSi(001)表面の加工現象の違いを生じさせる一つの要因であると結論づけている。

以上のように、本論文は原子レベルの表面計測と理論計算とを合わせて評価することが試料表面の状態や反応素過程の解明に非常に有効であることを示し、それによりフッ素および塩素によるSi(001)表面原子のエッチング機構に関して有益な基礎的知見を与えており、表面科学および半導体工学の分野に貢献するところが大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。