

Title	低ダメージ半導体微細加工のためのプラズマ表面相互作用分子動力学シミュレーション解析
Author(s)	溝谷, 浩平
Citation	大阪大学, 2015, 博士論文
Version Type	VoR
URL	<a href="https://doi.org/10.18910/53966">https://doi.org/10.18910/53966</a>
rights	
Note	

*Osaka University Knowledge Archive : OUKA*

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

Osaka University

## 論文内容の要旨

氏名 ( 溝谷 浩平 )

論文題名

低ダメージ半導体微細加工のためのプラズマ表面相互作用分子動力学シミュレーション解析

## 論文内容の要旨

以下本文

近年の半導体デバイスの微細化に伴って、プラズマ加工プロセスの際に生じる表面ダメージがデバイスの品質に直接的に影響を及ぼすようになってきている。そこで本研究では、プラズマエッチングプロセスにおける表面ダメージ層形成メカニズムの解明のため、分子動力学シミュレーションを用いてプラズマと半導体ナノ界面との相互作用の解析を行った。分子動力学シミュレーションには、表面反応の再現性を向上させるため本研究室で独自に原子間ポテンシャル関数に改良を加えた計算コードを用いた。また、プラズマ加工における各粒子種の役割を明確化させるため特定のイオンやラジカルを半導体基板に入射したときの基板の様子を観察した。

本論文は、全7章で構成されている。第1章では、プラズマプロセスによって生じるダメージ問題の背景について説明した。

第2章では本研究で使用した分子動力学シミュレーションの理論を説明した。限られた計算能力で精度の高いシミュレーションを行うために加えた計算上の工夫や、ベースとした Stillinger-Weber ポテンシャルモデルに加えた改良点の解説を行った。

第3章では平面型 Si 半導体デバイスのエッチングプロセスの際に Si 基板の表面荒れが起こる Si リセス現象の発生メカニズム解明を進めた結果を示した。シミュレーションの結果、高エネルギーで入射された H<sup>+</sup>イオンが O 原子を Si 基板内部に物理的に弾き飛ばしていく事が原因となりゲート酸化膜厚の増加が起こることが確かめられた。Si リセスはこの酸化膜がウェットプロセスで除去されることで発生すると考えられる。

第4章では第3章で得られたデータのより詳細な解析を行った。その結果、本プロセスによる酸化が熱酸化プロセスよりも急速な酸化を引き起こす事などが明らかになった。

第5章では斜入射された H<sup>+</sup>イオンが Si 基板表面に形成するダメージ層について調べた。その結果、H<sup>+</sup>イオン入射の場合は入射角度が大きい場合にも基板表面 50nm 程度までの領域にダメージを与えることが明らかにされた。従来のプラズマプロセスでは斜入射イオンによるダメージは大きな問題とされていなかったが、半導体の微細化によりこのオーダーのダメージ層を制御する必要性も増している。

第6章では低ダメージの新たな半導体加工プロセスの実現を目標として極低入射エネルギーでの O<sub>2</sub> ガスクラスタービームプロセスによる Si 最表面酸化シミュレーションを行った結果を示した。ガスクラスターは数千、数万といった多数の粒子が凝集した巨大粒子で、従来のプラズマプロセスでは実現できないような低ダメージのプロセスが期待されている。

そして第7章で全体のまとめを示した。

## 論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 ( 溝 谷 浩 平 )	
論文審査担当者	(職) 氏 名
	主 査 教授 浜口 智志
	副 査 教授 平田 好則
	副 査 教授 田中 学
論文審査の結果の要旨	
<p>近年の半導体デバイスの微細化に伴って、プラズマ加工プロセスの際に生じる表面ダメージがデバイスの品質に直接的に影響を及ぼすようになってきている。そこで本研究では、プラズマエッチングプロセスにおける表面ダメージ層形成メカニズムを解明するため、分子動力学シミュレーションを用いてプラズマと半導体のナノスケールオーダーの空間サイズをもつ界面との相互作用の解析が行われている。分子動力学シミュレーションには、表面反応の再現性を向上させるため学位申請者の研究室で独自に原子間ポテンシャル関数に改良を加えた計算コードが用いられた。学位申請者は、様々な条件下において、当該シミュレーションを用いて、プラズマ加工における各粒子種の役割を明確化させるため、特定のイオンやラジカルを半導体基板に入射させることにより、基板の構造的・化学的変化を解析した。</p> <p>本論文は、全 7 章で構成されている。第 1 章では、プラズマプロセスによって生じるダメージ問題の背景について説明されている。第 2 章では本研究で使用した分子動力学シミュレーションの理論が説明されている。限られた計算能力で精度の高いシミュレーションを行うために加えた計算上の工夫や、ベースとした <b>Stillinger-Weber</b> ポテンシャルモデルに加えた改良点に関して、詳細に議論されている。第 3 章では平面型 <b>Si</b> 半導体デバイスのエッチングプロセスの際に <b>Si</b> 基板の表面荒れが起こる <b>Si</b> リセス現象の発生メカニズムが、上記 MD シミュレーションを用いて、詳細に解析されている。具体的には、高エネルギーで入射された <b>H<sup>+</sup></b> イオンが <b>O</b> 原子を <b>Si</b> 基板内部に物理的に弾き飛ばしていく現象が原因となり、ゲート酸化膜厚の増加が起こることが、本研究により、初めて明らかにされた。第 4 章では、第 3 章で得られたデータを用いて、基板物質内での拡散現象の詳細な解析が行われている。こうした解析により、同プロセスによる酸化が熱酸化プロセスよりも急速な酸化を引き起こす事が明らかにされている。第 5 章では、斜入射された <b>H<sup>+</sup></b> イオンが <b>Si</b> 基板表面に形成するダメージ層について議論されている。本研究で用いられたシミュレーションによると、<b>H<sup>+</sup></b> イオン入射の場合は入射角度が大きい場合にも基板表面から、比較的深い領域まで、ほぼ一様にダメージが層が生成されることが明らかにされた。従来のプラズマプロセスでは斜入射イオンによるダメージは大きな問題とされていなかったが、新しい構造を持つ半導体デバイスの実用化にともない、このオーダーのダメージ層を制御する必要性に関しても、議論されている。第 6 章では、低ダメージの新たな半導体加工プロセスの実現を目標として極低入射エネルギーでの <b>O<sub>2</sub></b> ガスクラスタービームプロセスによる <b>Si</b> 最表面酸化シミュレーションを行った結果が示されている。ガスクラスターは数千、数万といった多数の粒子が凝集した巨大粒子で、従来のプラズマプロセスでは実現できないような低ダメージのプロセスが期待されている。第 7 章は、古典的 MD シミュレーションを活用に基づく、半導体エッチングプロセス解析全体のまとめが示されている。</p> <p>以上のように、本研究の成果は、学術的に新規で奥が深く、また、産業応用としての価値も極めて高い。よって本論文は博士論文として十分に価値あるものと認める。</p>	