



Title	Molecular Dynamics Simulation of SiO ₂ and SiN Etching for 3D NAND Memory Device Applications
Author(s)	Cagomoc, Donato Charisse Marie
Citation	大阪大学, 2023, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/91922
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (CAGOMOC CHARISSE MARIE DONATO)

Title

Molecular Dynamics Simulation of SiO₂ and SiN Etching for 3D NAND Memory Device Applications(3次元NANDメモリデバイスへの応用を目指したSiO₂およびSiNエッチングの分子動力学シミュレーション)

The three-dimensional (3D) NAND flash memory technology has been the primary solution for any platforms requiring data storage. In 3D NAND device fabrication, a stack of alternating SiO₂ and SiN layers (which we refer to as ONON multilayers) is used to form the foundation of the memory cells. The number of stacked layers determines the memory capacity of the 3D NAND. After the film stack deposition, hole channels with a high aspect ratio (HAR) must be etched through all these layers. This HAR etching step has become the main roadblock to the further scaling of 3D NAND devices. In HAR etching, deviations from a straight profile such as twisting, bending, and bowing, become more difficult to manage as the aspect ratio is further increased. Therefore, it is the goal of this study to provide insights into the HAR etching process of SiO₂ and SiN by fluorocarbon (FC) plasma through molecular dynamics (MD) simulation and ion beam experiments.

For a better understanding of how energetic ions interact with the sidewalls of HAR channels during reactive ion etching (RIE), MD simulations for the scattering of Ne, Ar, and Xe ions on Si and SiO₂ surfaces were performed. The simulations were performed at grazing-angle ion incidence (70° - 85°) to examine how the angular distribution of reflected ions deviates from that of the ideal specular reflection, depending on the ion mass, incident angle, and surface material and its roughness. It is found that, the higher the ion mass is, the less grazing the ion incident angle is, or the rougher the surface is, the larger the angular distribution of reflected ions becomes around the corresponding specular reflection angles. Quantitative information on such reflected ions can be used to predict the profile evolution of HAR channels in RIE processes.

Several different types of MD simulations were performed in this research, including simulations of the etching of SiO₂ and SiN by CF₃⁺ ions and Cl⁺ ions. The etching yields obtained in the simulations were compared to experimentally obtained etching yields, wherein relatively good agreements were observed. The reasonable agreement between the simulation and experiments led to the understanding that MD simulation could provide good insights into the HAR etching process. In line with this, MD simulations of the etching of a SiO₂ - SiN bilayer by CF₃⁺ ions, which represented typical reactive ions from FC plasma, were performed. Based on the results, it was concluded that the etch rate of an ONON multilayer was dependent on the thickness of the mixing layer, which in turn depended on the ion energy and the thickness of each SiO₂ or SiN layer. If the ion energy was high enough such that the thickness of the mixing layer was much higher than the layer thicknesses, a single etch rate was attained. MD simulations of the etching of SiO₂ and SiN by simultaneous injections of energetic Cl⁺ and CF₃⁺ ions, which represented ion irradiation from Cl-containing fluorocarbon plasmas, were also performed. The effects of adding Cl⁺ ions to CF₃⁺ ions were studied. The results showed that an increase in the etch rate was only observed when Cl⁺ ions were added at oblique angles. Based on the results, a possible mechanism for smoothing a tapered HAR channel was proposed.

This study also aims to understand the mechanisms of RIE processes to form nanometer-scale holes into a SiO₂ surface region with carbon masks by FC plasmas, using MD simulation. The results showed that, in the case of ion beam etching by CF₃⁺ ions, the etching yield generally increased with increasing ion energy, and etching at high ion incident energies was dominated by physical sputtering. Preferential removal of oxygen was also observed, which resulted in Si-rich inner walls of the etched hole channel. Tapered etched hole channels were formed due to the re-deposition of sputtered atoms. The effects of the simultaneous irradiation of CF₃ radicals with CF₃⁺ ion injection on the etching process were also investigated. It was shown that there was an optimum ratio of the radical to ion fluxes to maximize the etching yields.

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (CAGOMOC CHARISSE MARIE DONATO)		
	(職)	氏 名
論文審査担当者	主 査	教授 浜口 智志
	副 査	教授 森川 良忠
	副 査	教授 桑原 裕司
	副 査	准教授 濱田 幾太郎

論文審査の結果の要旨

本論文は、3次元(3D)NANDフラッシュメモリの製造過程に用いられる高アスペクト比(HAR)深孔エッチングプロセスにおけるプラズマ表面相互作用を数値シミュレーションを用いて解明したものである。近年の急速な情報化社会の発展を支える半導体デバイスのなかでも、特に、大量の情報の効率的な入出力と安定した保存を可能とする技術の主役が、3D NANDフラッシュメモリであり、世界的なデータ解析需要の急速な増大に応じて、フラッシュメモリチップ一つあたりの容量も、近年、急速に増大している。3D NANDフラッシュメモリでは、微細で深い孔の内部面にメモリ・セルを配置してデータを保存するため、この微細孔が深ければ深いほど、大量のデータが保存できる。現在、直径が50 nm以下、アスペクト比(深孔の深さと、直径との比)が200を超える深孔の効率的な製造法の早急な確立が求められているが、半導体製造技術の中でも、この深孔の作成は、最も達成の難しいボトルネック技術である。こうした背景のもと、本論文では、HAR深孔エッチングに用いられる最先端技術であるプラズマエッチングに対して、プラズマと物質表面の相互作用を原子レベルの精度で解析し、その結果を、既存の実験データを詳しく比較することにより、深孔エッチング製造時の表面反応機構を解明している。

HAR深孔エッチングを実現するためには、これまでの半導体用プラズマプロセスに比べて、極めて高い入射エネルギー(数 keV から 10 keV 以上)をもつ高速化学反応性イオンとともに、反応性ラジカルを活用する。一方、エッチング対象となる材料は、厚さが数 nm のシリコン酸化膜(SiO₂)およびシリコン窒化膜(SiN)を交互に多数積層した膜であり、この積層膜を貫通する深孔を形成する必要がある。しかしながら、狭い開口部から入射するイオンやラジカルは、形成される孔が深くなるにつれ、壁面における反射や吸着により、孔底まで届かず、深孔の形成が不可能となったり、あるいは、可能であっても、深孔が曲がったり、断面形状がゆがんだりして、デバイスの製造が不可能となる問題が生じる。このため、申請者は、新たな化学反応系のシミュレーションを可能とする分子動力学シミュレーション技術(具体的には、関連する原子間ポテンシャルモデルを)開発することで、SiO₂/SiN多層膜の高エネルギー入射イオンによる表面反応機構を解明し、また、高エネルギー入射イオンの壁面における、表面粗さと反射角度を明らかにし、更に、通常用いられるフッ化炭素系プラズマに塩素を混入した場合の、SiO₂とSiN膜の反応性イオンエッチングの変化とその表面反応機構を解明した。これらの理論的解析は、既存の実験結果と比較できるものはすべて比較されており、その理論解析の有効性が常に確認されている。また、深孔エッチング技術の将来への応用として、直径4nmのSiO₂超微細孔エッチングを分子動力学シミュレーションのみを用いて実行し、エッチング用炭素膜マスクのSiO₂エッチングへの影響も、本論文で、明らかにした。

以上のように、本論文は、現在、産業界の最先端で大きな問題となっている工学的課題に対して、その基礎的な物理機構を原子レベルで解明することにより、最先端技術開発支援に大きく貢献したという点で、極めて意義の大きいものである。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。