

分子動力学計算による α -SiO₂(シリカ)膜のHF(フッ酸)エッチングシミュレーション

エッチングプロセスにおける原子レベルでの表面反応の理解に有効

測定法 : 計算科学・AI・データ解析

製品分野 : LSI・メモリ、製造装置・部品

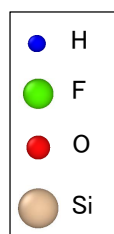
分析目的 : 組成分布評価、膜厚評価、構造評価、応力・歪み評価、その他(化学反応解析)

概要

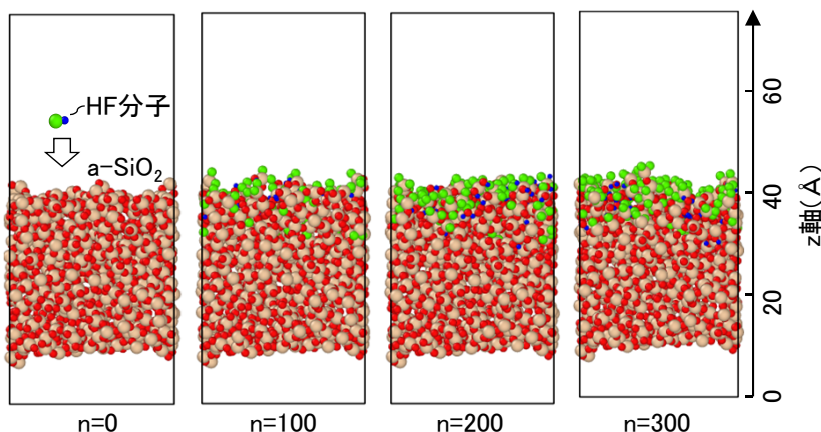
半導体プロセスの微細化に伴い、エッチングガス、ALD成膜におけるプリカーサ、プラズマ処理などによる表面反応の重要性が増しています。このようなエッチング、表面結合状態変化、欠陥生成などの複雑な化学反応が関与する系に対して、原子レベルでの現象の理解には分子動力学計算を用いた解析が有効です。本資料では、 α -SiO₂のHFエッチング反応について、分子動力学計算から評価しました。様々な反応、材料に対して同様のアプローチが適用可能です。

データ

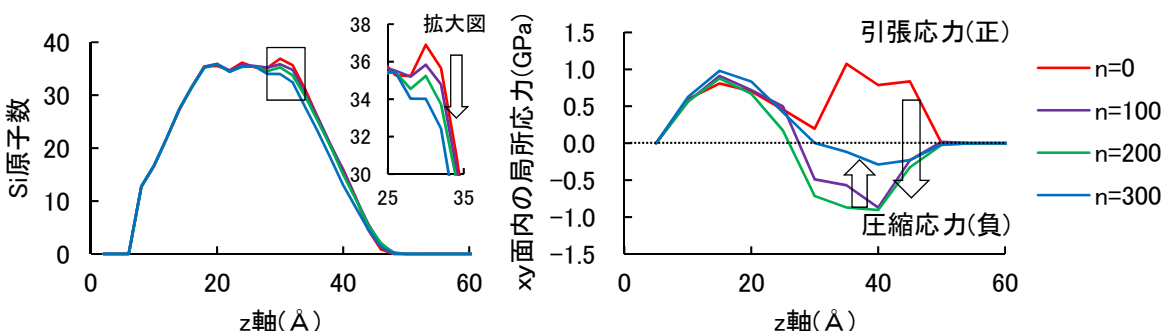
■ 計算モデル、HFエッチングシミュレーション結果



HF分子を順に α -SiO₂表面で反応させることで、エッチング反応をシミュレートしました。反応したHF分子数を n としています。($n=0\sim 300$)



■ エッチング時の膜のSi組成分布、xy面内の局所応力分布



- ・反応したHF分子数の増加に伴い、表面Si原子数が減り、膜のエッチングが進むことが分かります。
- ・フッ化により表面近傍で圧縮応力が強くなる傾向が見られました。圧縮応力の大きさは1GPa程度となり、エッチング時の膜の変形要因となることが示唆されます。
- ・エッチングが進むことにより、圧縮応力が緩和される様子が見られました。原子の再配置が起こり、応力が緩和したと考えられます。



✓ 基板上的様々な表面反応(エッチング、ALD成膜、プラズマ処理等)に対して適用可能です

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp

URL : <https://www.mst.or.jp/>