

V-3 ② 3次元ナノ構造形成プロセス技術の開発

② 3次元ナノ構造形成プロセス技術の開発

(1) 超低損傷・高密度3次元ナノ構造形成技術の開発

(1)-1 超低損傷エッチングによる高密度3次元ナノ構造形成技術の開発

(1)-1-1 シリコン用8インチ装置開発

昨年度に導入した8インチ対応低損傷ドライエッチング装置について、ビームの挙動を理解し、超低損傷エッチングの実現と形状制御の指針を得るため、ビームの測定およびエッチングの検討を行った。

(1)-1-1-1 大口径中性粒子ビームの測定

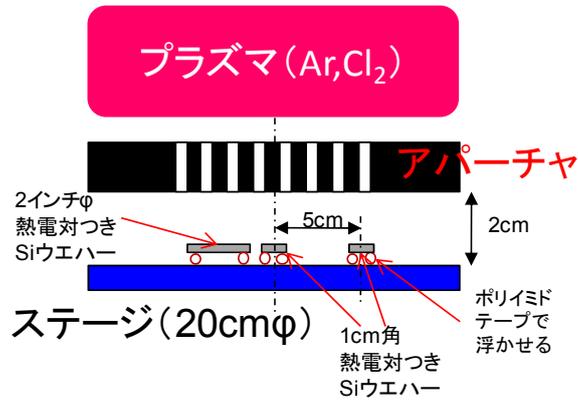
中性粒子ビーム源から出力される中性粒子、わずかな残留イオンおよびわずかな光照射のフラックス・エネルギーやエネルギーフラックスを測定するための方法は、基本的に昨年度に確立した。本年度はさらに面内分布の測定精度の向上を試みた。また、ビームの角度分布の測定を行った。これらの結果は、超低損傷エッチングシミュレーションの構築にも役立つ情報となる。

a. 面内分布の測定精度の向上

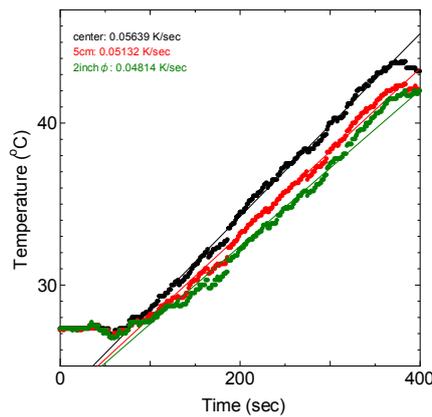
昨年度に確立された方法では、中性粒子ビーム源からの全エネルギーフラックスを、照射されたシリコンウエハーの温度上昇として熱電対の温度上昇で測定した。昨年度はそのシリコンウエハーのサイズとして直径2インチ(約5cm)のものを用いたが、ステージ上のエネルギーフラックス分布を測定するため、1cm角のシリコンウエハーに熱電対を埋め込んだものを用意し、ステージ上の分布測定を行った。図②-(1)-1.1に、実験セットアップの概略図を示す。ステージ中心位置と中心から5cm位置に1cm角の熱電対つきシリコンウエハーを設置し、比較のため、直径2インチの熱電対つきシリコンウエハーも導入した。図②-(1)-1.2に、その測定結果を示す。ウエハーの大きさによらず、温度上昇速度がほぼ一定であることから、1cm角のウエハーを用いた場合でも正しく測定できていることが分かる。なお、中心位置と5cm位置で温度上昇速度がほぼ同じであることから、面内均一性が高いことが分かる。

アルゴンおよび塩素中性粒子ビームについて、上記ウエハーを用いた測定を行った。条件は以下の通りである。アルゴン中性粒子ビーム：Ar 80sccm、アパーチャ上/下圧力 1.88Pa/0.27Pa、ソースパワー500~2000W(連続放電)、アパーチャ接地。塩素中性粒子ビーム：Cl₂ 80sccm、アパーチャ上/下圧力 2.43Pa/0.28Pa、ソースパワー500~2000W(連続放電)、アパーチャ接地、併せてファラデーカ

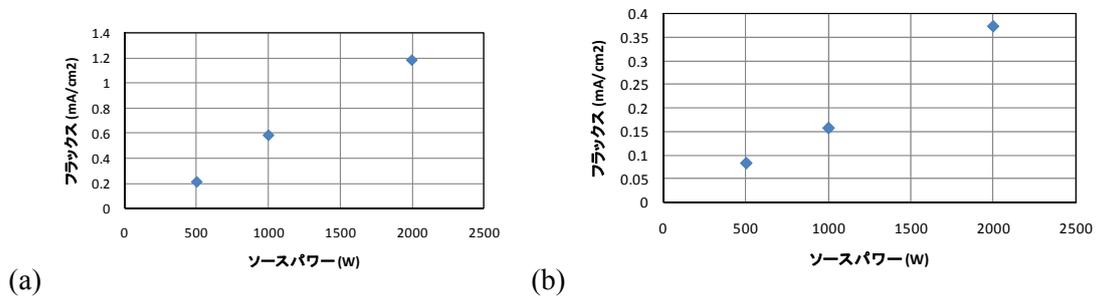
アップ測定も行い、中性粒子ビームフラックスの導出を行った。その結果、図②-(1)-1.3 に示すような結果が得られた。Ar 中性粒子ビームについて $1\text{mA}/\text{cm}^2$ 以上の十分なフラックスが得られ、また面内均一性も良いことが分かった。



図②-(1)-1.1 熱電対つき Si ウエハーによるエネルギーフラックス測定実験



図②-(1)-1.2 熱電対つき Si ウエハーの温度上昇

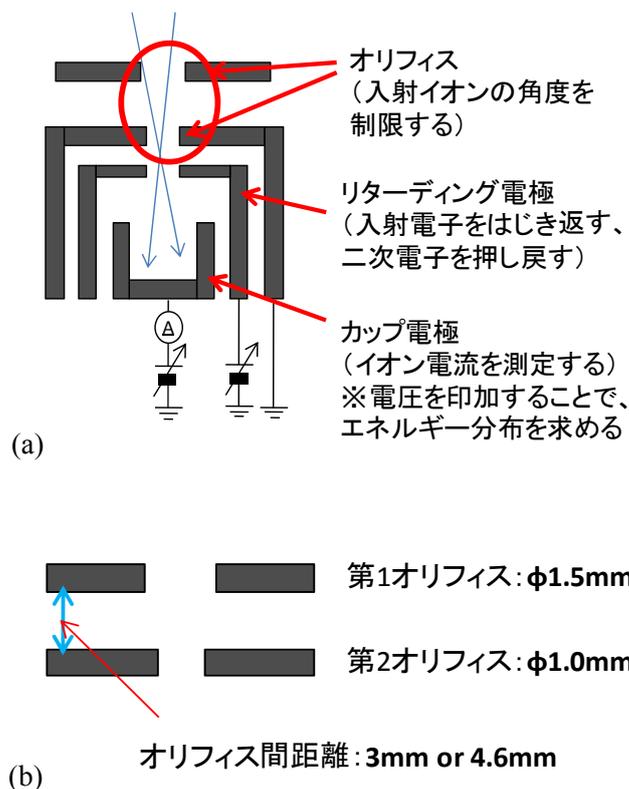


図②-(1)-1.3 中性粒子ビームフラックス計算結果

b. ビーム角度分布の測定

アパーチャ通過時の粒子の挙動をシミュレーションと組み合わせて理解するために、アパーチャに入射するイオンおよびアパーチャから出射する中性粒子の角度分布を求めた。

測定のための装置としては図②-(1)-1.4 に示すリタード電極付きの回転可能なファラデーカップを用いた。ファラデーカップはチャンバー側壁を貫通するロッドにより支持されており、そのロッドを回転させることで角度分布を測定可能である。また、ファラデーカップの先端には二重のオリフィスをとりつけ、入射角を制限することで角度依存性の測定を可能とした。アパーチャから出射する中性粒子の角度分布については、中性粒子とイオンの角度分布はほぼ等しいと仮定し、イオンの角度分布を以て中性粒子の角度分布とみなすこととした。

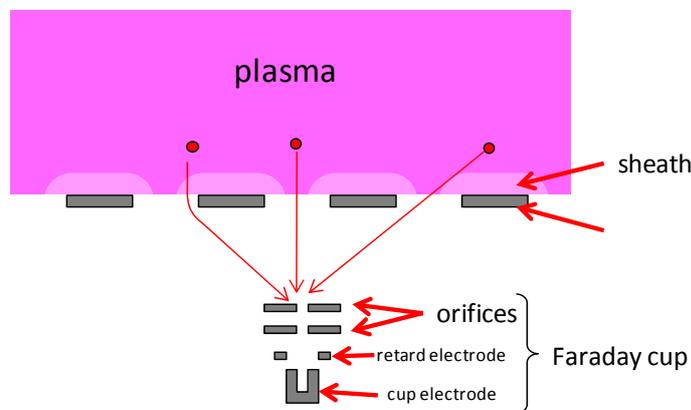


図②-(1)-1.4 角度分解測定用ファラデーカップ

(a)全体図、(b)オリフィス部

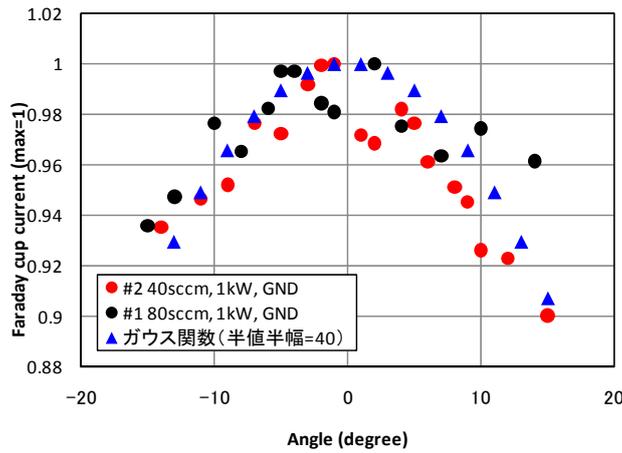
プラズマ中のイオンは、プラズマバルク中では等方的に飛び交っているが、アパーチャに入射する際にはアパーチャ近傍のシースによって軌道が影響されていると考えられる。すなわち、アパーチャに入射するイオンの角度分布は、

図②-(1)-1.5 に示すように、アパーチャ上方にできるシースの構造によって決定されると考えられる。そこで、アパーチャに入射するイオンの角度分布を測定するために、非常に薄いアパーチャを用いることを考えた。すなわち、アパーチャ上方に生成するシースの構造はアパーチャの厚さに影響されないため、非常に薄いアパーチャを用いた場合でも通常のアパーチャと同じシースが形成される。また、アパーチャ上方のシースにより軌道を曲げられたイオンは、非常に薄いアパーチャを用いることで、アパーチャ内壁に衝突することなくそのままファラデーカップに入射する。このように、非常に薄いアパーチャを用い、そのアパーチャを通過してくるイオンの角度分布をもって、アパーチャに入射するイオンの角度分布を測定することができる。実験は、Ar ガス流量40~80sccm、ICP パワー1000~2000W（連続放電）、アパーチャ接地、の条件で行った。図②-(1)-1.4(b)に示したオリフィス間距離は、4.6mm を基本としたが、一部の実験において3mm の条件で実験を行った。なお、アパーチャは穴径1mm 厚さ0.2mm のアパーチャを用いた。アパーチャ上下の圧力を、厚さ10mm のアパーチャを用いた場合と同一にするため、下部電極のうちアパーチャがあげられた範囲を直径45mm とした。

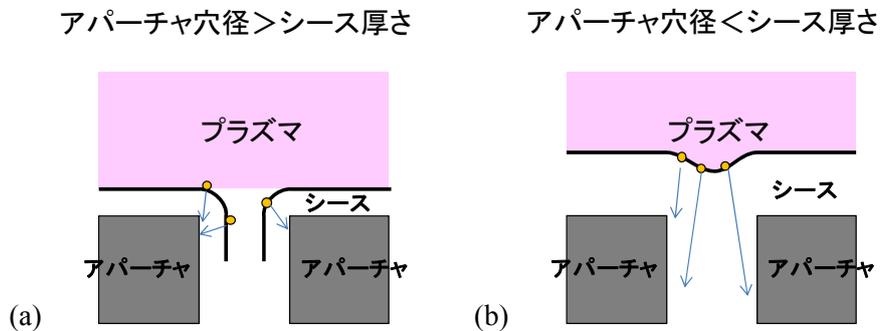


図②-(1)-1.5 非常に薄いアパーチャを用いた場合の、アパーチャに入射するイオン角度分布測定概念図

その結果を図②-(1)-1.6 に示す。得られた角度分布は非常にブロードなものであった。ガウス関数でフィッティングしたところ、半値半幅はおよそ 40° となった。このように広い角度分布からは、図②-(1)-1.7(a)に示すように、アパーチャ穴径よりもシース厚さのほうが小さいことが予想される。



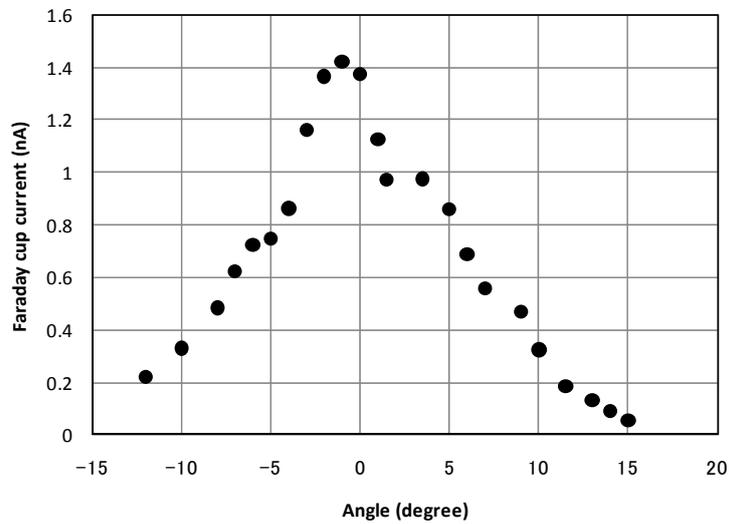
図②-(1)-1.6 アパーチャに入射するイオンの角度分布の測定結果



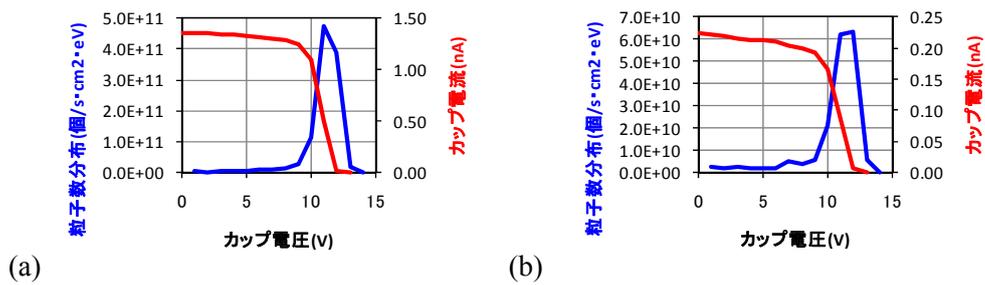
図②-(1)-1.7 アパーチャ穴径とシース厚さの関係図

次に、同じファラデーカップを通常のアパーチャの下側に設置することで、アパーチャから出射する中性粒子の角度分布を測定した。アパーチャとしては標準的な穴径 1mm 厚さ 10mm (アスペクト比 10) のものと、穴径 1mm 厚さ 30mm (アスペクト比 30) のものを用いた。まず、アスペクト比 10 のアパーチャを用いた場合の結果を図②-(1)-1.8 に示す。角度分布が測定できていることが分かる。また、測定範囲の中央である 0° と測定範囲の端付近である 12° において、エネルギー分布を測定した結果を図②-(1)-1.9 に示す。両方の角度において、ほぼ同じエネルギー分布となっていることが分かる。 0° の角度で出射する粒子はアパーチャ内壁とほとんど衝突してこなかったと考えられ、一方 12° の粒子はアパーチャ内壁と何度か衝突したと考えられる (5° 以上の角度を持つ粒子は、アスペクト比 10 のアパーチャを衝突なしに通り抜けられない) が、この結果は、アパーチャ内壁との衝突によって粒子のエネルギーはほとんど変化しないことを示していると考えられる。さらに、ガス流量 (圧力) 依存性および ICP パワー依存性を図②-(1)-1.10 に示す。角度分布は、ガス流量 (圧力)

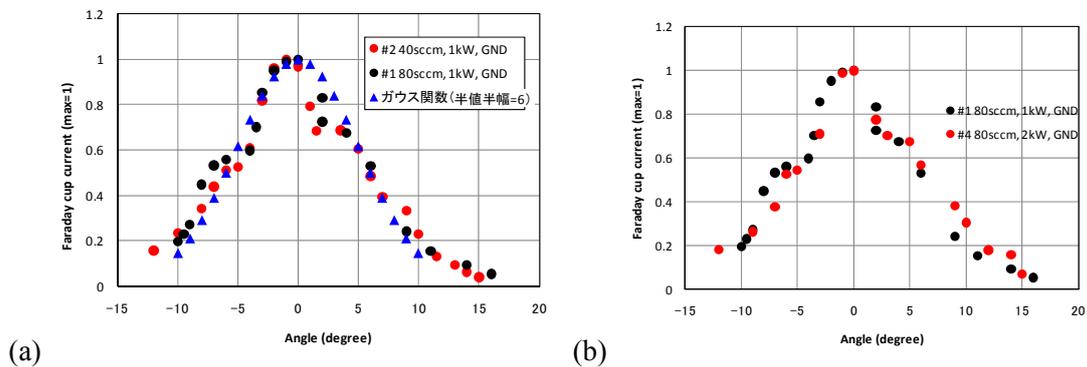
および ICP パワーには依存しないことが分かる。



図②-(1)-1.8 Ar 中性粒子ビームの角度分解測定の結果



図②-(1)-1.9 (a)0° と(b)12° における中性粒子ビーム(残留イオン)のエネルギー分布

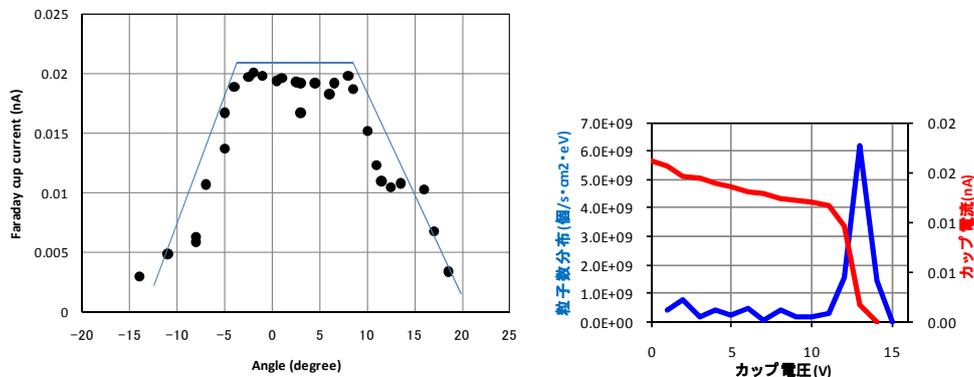


図②-(1)-1.10 中性粒子ビーム(残留イオン)の角度分布

(a)ガス流量依存性と(b)ソースパワー依存性

次に、アスペクト比 30 のアパーチャを用いて同様の測定を行った。その結

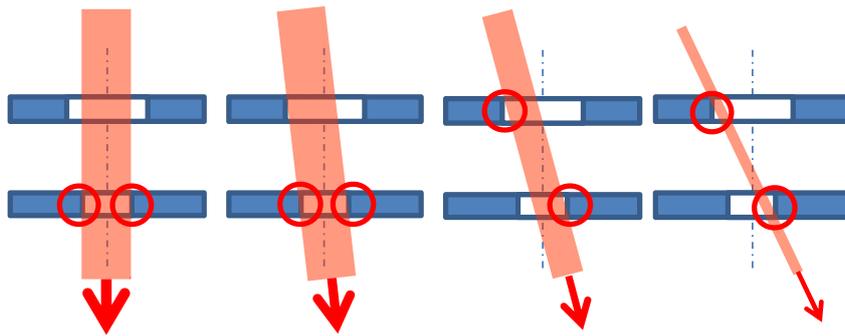
果を図②-(1)-1.11 に示す。ビームの角度依存性は、台形をしているという結果となった。



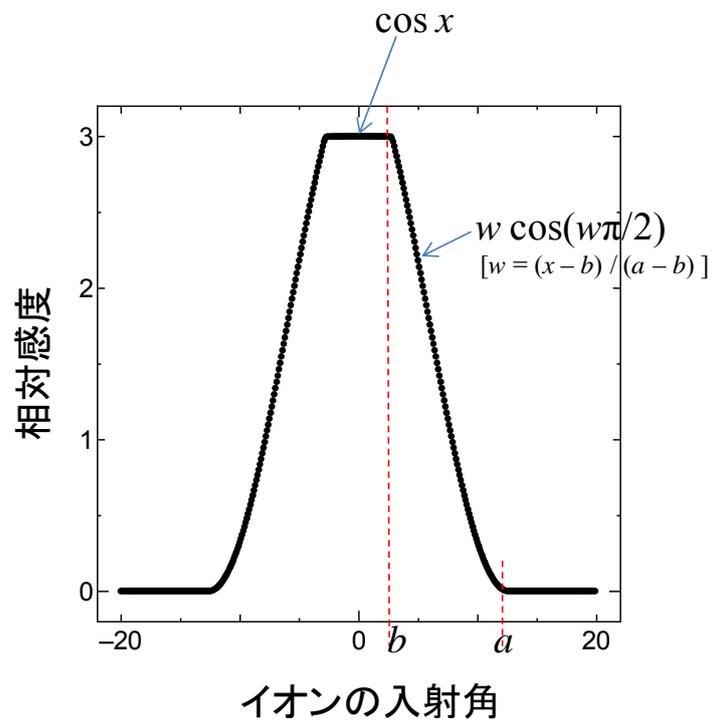
図②-(1)-1.11 アスペクト比 30 のアパーチャを用いた場合の Ar 中性粒子ビーム(残留イオン)の角度分布とエネルギー分布

この結果は、ファラデーカップ感度の角度依存性から説明することができる。ファラデーカップの先端には二重のオリフィスが備えられており、各々のオリフィスのサイズは異なる。そのため、ファラデーカップを入射側から見たとき、図②-(1)-1.12(a)に示すように、見込み角によってオリフィス開口部の見かけ上の面積が複雑に変化する。ファラデーカップの感度はこの面積に比例すると考えられる。オリフィス開口部の見かけ上の面積（ファラデーカップ感度）の角度依存性を計算すると図②-(1)-1.12(b)のような結果となる。およそ台形の形状をしていることが分かる。すなわち、実験で得られたデータは、真の角度分布ではなく、ファラデーカップ感度の角度依存性の影響を受けたものである。このことは、ファラデーカップのオリフィス間隔を 3mm として図②-(1)-1.8 と同じ条件で測定した結果（図②-(1)-1.13）、図②-(1)-1.8 の結果とは異なり半値半幅が約 9° の分布が得られている、つまり、アスペクト比 10 のアパーチャを用いた場合でも角度分布の測定結果はファラデーカップのオリフィス形状の影響を受けていることから分かる。

実験で得られたデータは、真の角度分布を $f(\theta)$ 、ファラデーカップ感度の角度依存性を $g(\theta)$ とすると両者のコンボリューション（畳み込み積分） $(f * g)(\theta) = \int f(t) g(\theta-t) dt$ で表される。この式を用いて実験結果を解析すると、アスペクト比 10 のアパーチャでは半値半幅が約 5° 、アスペクト比 30 のアパーチャでは半値半幅が 2° 以内と考えられることが分かった。

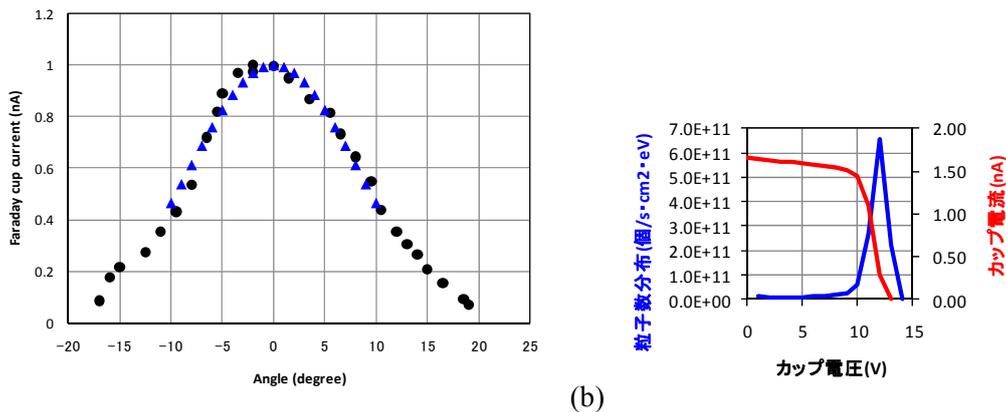


(a)



(b)

図②-(1)-1.12 ファラデーカップ見込み角による、オリフィス開口部の見かけ上の面積（ファラデーカップ感度）の変化の様子。模式図(a)と面積（感度）の角度依存性の計算結果(b)



図②-(1)-1.13 二重オリフィス間隔 3mm の場合の Ar 中性粒子ビーム
(残留イオン)角度分布とエネルギー分布

以上の結果をまとめると、アパーチャから出射する中性粒子の角度分布は、アパーチャのアスペクト比によって決定され、プラズマの条件には依存しないということが言える。つまり、ビームはアパーチャによってコリメートされているということが実験的に示された。今後、アパーチャに入射し通過する粒子の挙動をモンテカルロシミュレーションを用いて解析することで、定量的な評価が可能となり、粒子の挙動をよりよく理解できると期待される。

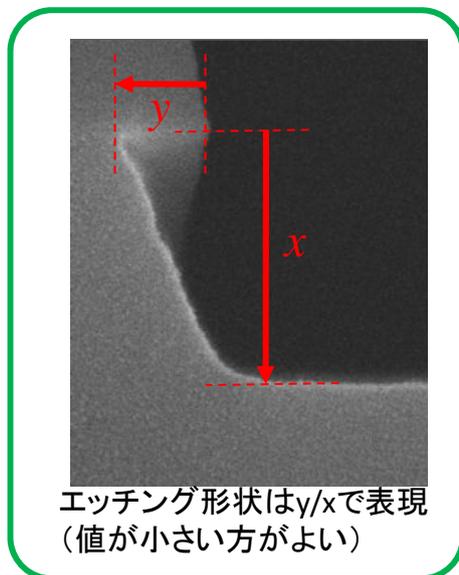
c. まとめ

中性粒子ビームの計測技術について、面内分布および角度分布の測定技術を確立した。その結果、ビームの面内均一性を実証するデータを得ることができた。この技術は、今後、中性粒子ビームの大口径化をさらに推し進めるに当たって必要不可欠な技術である。また、アパーチャに入射するイオンおよびアパーチャから出射する中性粒子について角度分布を測定することができた。ブロードな分布でもって入射する粒子がアパーチャでコリメートされる様子が観測できた。今後、モンテカルロシミュレーションを用いて解析することで、アパーチャ内部での粒子の挙動を理解し、さらには大口径対応アパーチャの設計指針を得ることができると期待される。

(1)-1-1-2 大口径中性粒子ビームによるシリコンエッチング

昨年度に導入した低損傷ドライエッチング装置を用い、シリコンエッチングの検討をおこなった。検討は主に SiO₂ ライン&スペースパターンマスクを持つ Si 基板を用いて行い、その断面を SEM で観察することでエッチング形状を評価した。

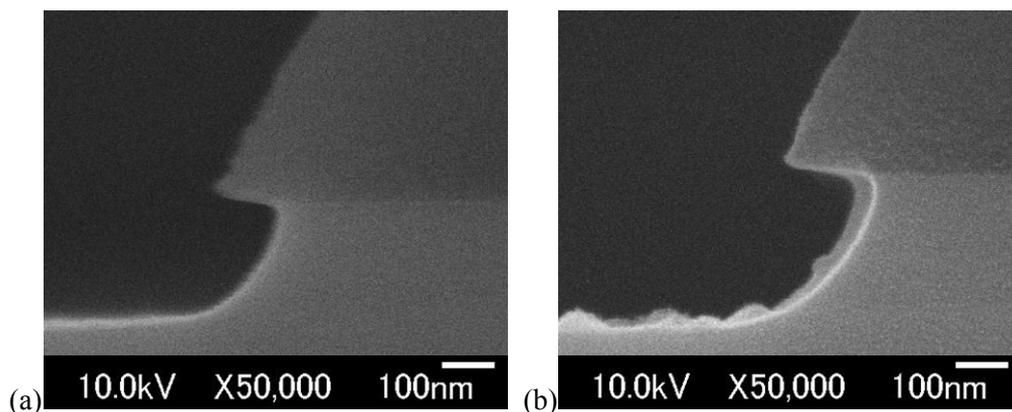
エッチング形状は、図②-(1)-1.14 に示すように、エッチング深さに対するサイドエッチ量により評価した。この値は、通常 0~1 の間の値を取り、0 の場合にサイドエッチのない形状、1 の場合に完全に等方性を意味する。



図②-(1)-1.14 エッチング形状の評価方法

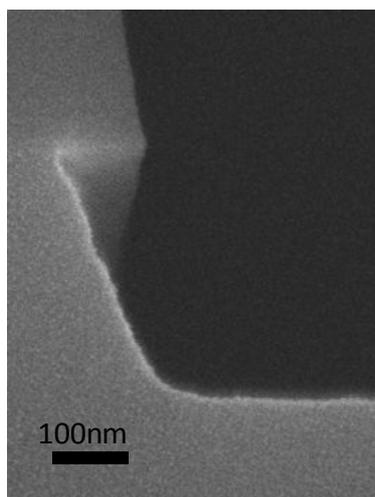
a. アパーチャの検討

まず最初に、中性化のためのアパーチャの検討を行った。穴径 1mm、厚さ 10mm のアパーチャを直径 20cm 範囲に開口率 50%で開けた場合について、フッ素中性粒子ビームエッチングを試みた。条件は、 F_2 50sccm、アパーチャ上/下圧力 1.56Pa/1.20Pa、ICP パワー 2000W (連続放電)、エッチング時間 10 分である。その結果、図②-(1)-1.15 に示すように、大きなサイドエッチが生じる結果となった。このサイドエッチは、アパーチャ下側 (プロセス室) の圧力が 1.2Pa と非常に高く、平均自由行程が約 6mm と短いためにビームが散乱するためと考えられる。エッチレートは、アパーチャを GND 電位にした場合は 22nm/min、RF バイアスを印加した場合は 30nm/min であった。RF バイアス印加によりエッチレートは若干向上しており、RF バイアスによりビームが加速される効果がある程度働いていると考えられる。



図②-(1)-1.15 200mm φ アパーチャ使用時のフッ素中性粒子ビームによるエッチング結果。(a)アパーチャを GND 電位にした場合
(b)アパーチャに 100W の RF バイアスを印加した場合

アパーチャ上側（プラズマ室）の圧力を高く保ち、かつアパーチャ下側（プロセス室）の圧力を低くするためには、アパーチャのコンダクタンスを下げる必要がある。アパーチャ上下の圧力比を 10 とするため、下部電極のうちアパーチャがあけられた範囲の直径を 200mm から 120mm に変更した。その結果を図②-(1)-1.16 に示す。垂直性が改善され、コリメートされたビームによるエッチングが起こっていることが分かる。レートは 28nm/min、垂直性 $y/x=0.34$ であった。

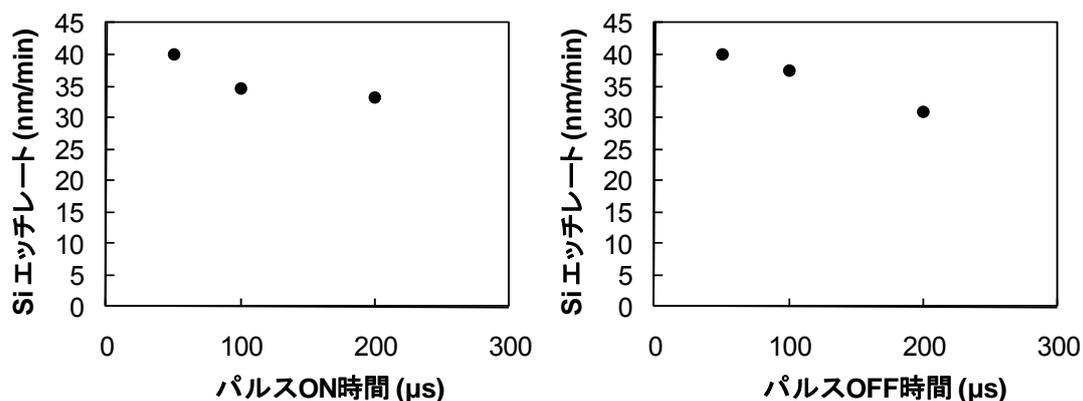


図②-(1)-1.16 120mm φ アパーチャ使用時のエッチング結果

b. フッ素中性粒子ビームにおける各種条件に対するエッチング特性

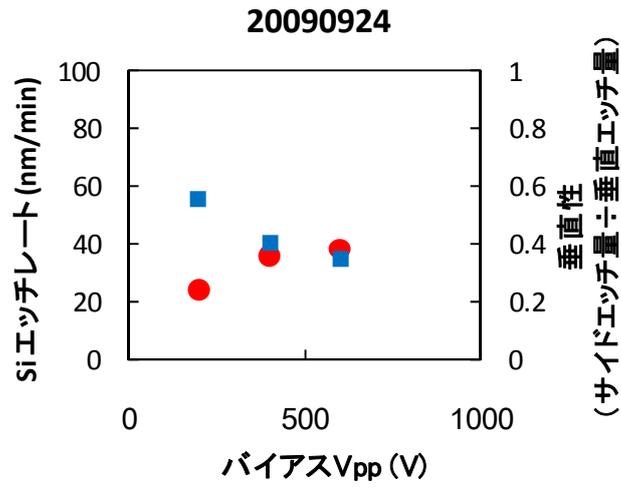
120mm φ アパーチャを用いて、エッチング特性を調べた。まず、ICP ソース

パワーのパルス時間変調について、ON 時間および OFF 時間を変化させた。その結果を図②-(1)-1.17 に示す。ON 時間および OFF 時間共に 50 μ s 以上に長くすると、エッチレートは低下する傾向がある。これは、パルス変調プラズマ中の負イオンの生成量に対応しており、ON および OFF 時間共に 50 μ s 程度で負イオン生成量が最も多いことを意味している。

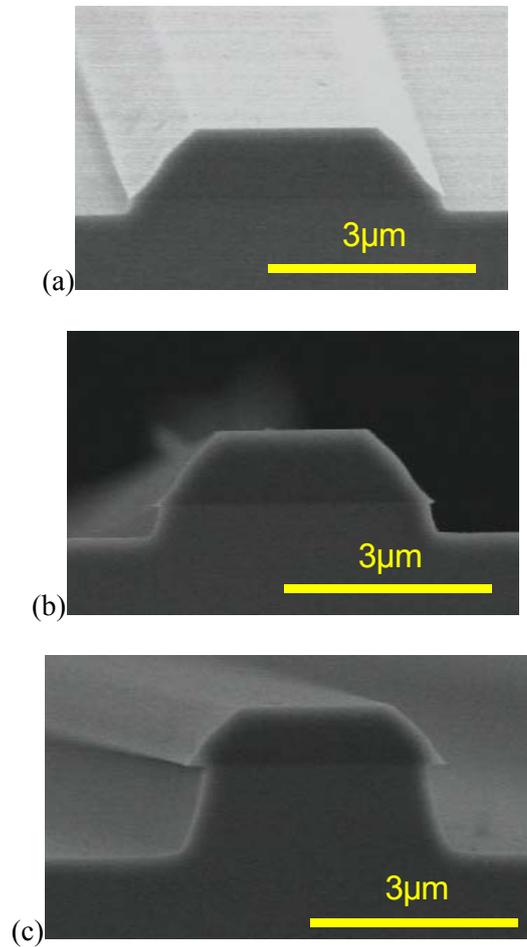


図②-(1)-1.17 Si エッチレートのパルス ON 時間・OFF 時間依存性

次に、アパーチャへの RF バイアスに対する依存性を調べた。図②(1)-1.18 では、マッチングボックス位置における RF 波形のピーク-ピーク電圧 V_{pp} (バイアスパワーに対して単調増加の関係にある) を横軸にとり、Si エッチレートと垂直性をプロットした。RF バイアスを増加させると、レートは増加し、垂直性の値は低下 (サイドエッチが減少し、形状が改善) する傾向がある。これは、RF バイアスによってプラズマ中のイオンが加速されることで、より高エネルギーの中性粒子ビームが得られていることを意味し、アパーチャへの RF バイアスによって中性粒子ビームエネルギーが制御可能であることを示している。これらの検討結果から最適条件を抽出した。F₂ 80sccm、アパーチャ上/下圧力 1.81Pa/0.24Pa、ICP パワー 2000W (パルス時間変調 50 μ s/50 μ s)、RF バイアス 98W (V_{pp} =600V) の条件で 5 分、10 分、30 分のエッチングを行った結果を図②-(1)-1.19 に示す。エッチレート 40nm/min、垂直性 0.2 が得られた。



図②-(1)-1.18 Si エッチレートと垂直性の、アパーチャへの RF バイアス依存性



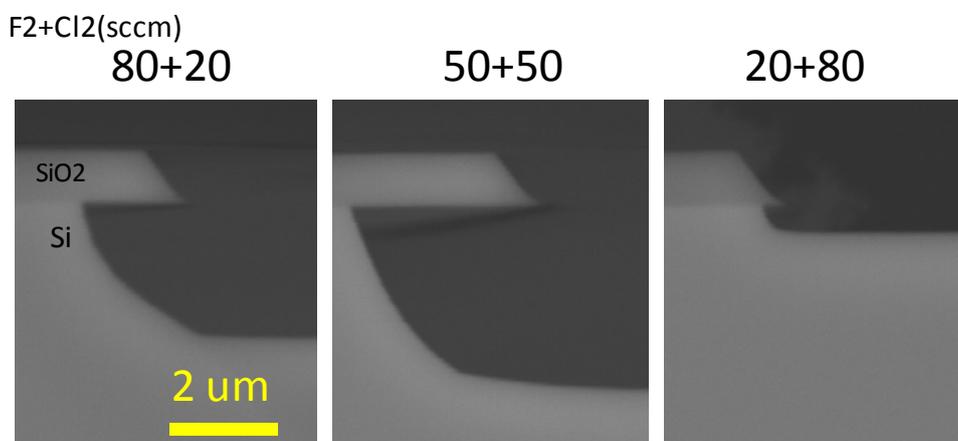
図②-(1)-1.19 フッ素中性粒子ビームによるエッチング結果。
エッチング時間は(a)5分、(b)10分、(c)30分である。

c. ガスケミストリの検討

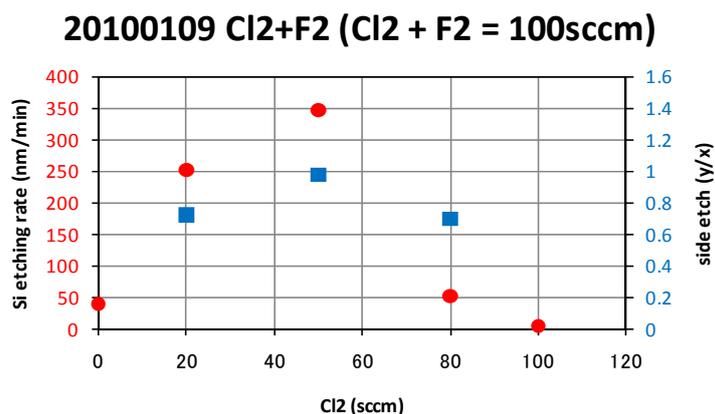
エッチングレートおよび垂直性をさらに改善するため、塩素および酸素ガスの添加を試みた。

まず、フッ素に対して塩素で置き換えた条件で、エッチングを行った結果を図②-(1)-1.20 および図②-(1)-1.21 に示す。エッチング条件は、 $F_2 + Cl_2$ 合計 100sccm、アパーチャ上/下圧力 3~4Pa/0.32~0.35Pa、ICP パワー 3000W (パルス 50 μ s/50 μ s)、バイアス 12~34W (V_{pp} =198~266V)、時間 10 分である。フッ素 100%ではおよそ 40nm/min であったエッチレートが塩素添加により劇的に向上し、フッ素:塩素=50:50 では約 350nm/min に達した。さらに塩素を添加するとエッチレートは急速に低下し、塩素 100%では数 nm/min 程度となった。また、垂直性はフッ素:塩素=50:50 のときに y/x がほぼ 1 (等方性) となり、フッ素:塩素の比率が 1:1 から外れるほど小さな値となった。

塩素およびフッ素混合ガスによるプラズマエッチング促進効果については、少数の研究例がある¹⁾³⁾。CIF や CIF_3 のような活性種に起因する可能性が挙げられているが、メカニズムは必ずしも明らかになっていない。いずれにせよ、方向性を持たないラジカルなどの活性種による自発的な反応であると考えられる。

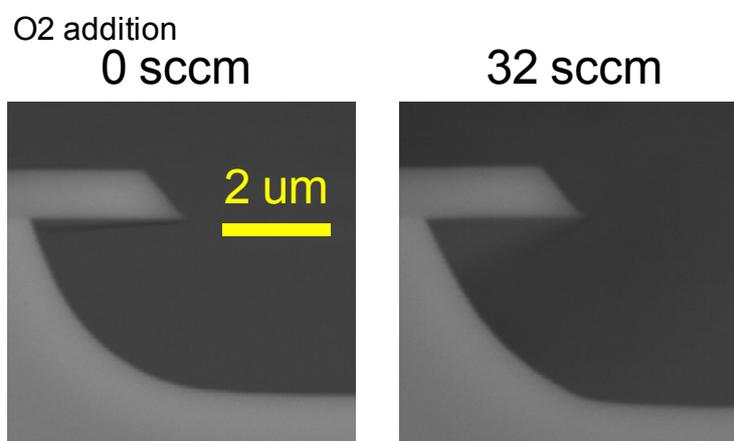


図②-(1)-1.20 フッ素+塩素中性粒子ビームによるエッチング結果の SEM 写真

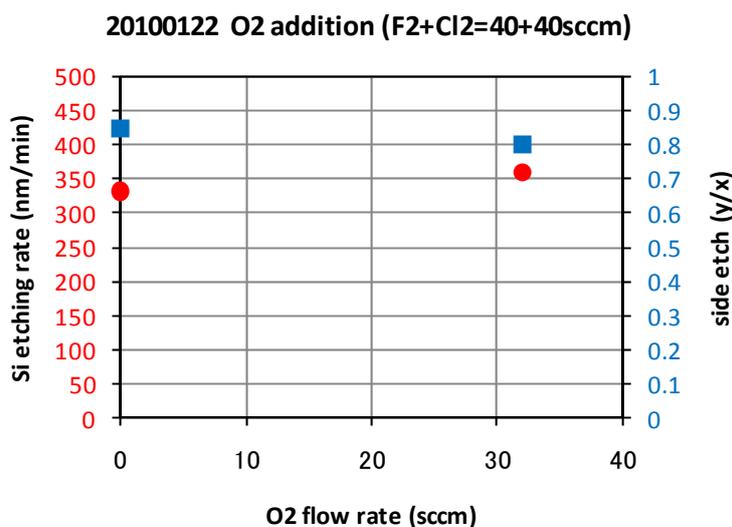


図②-(1)-1.21 フッ素+塩素中性粒子ビームによるエッチングレートと垂直性

次に、垂直性を改善するため、酸素添加を試みた。まず、塩素混合比 50%の場合について、酸素を添加した結果を図②-(1)-1.22 および図②-(1)-1.23 に示す。32sccm の酸素添加をおこなったが、エッチング特性はほとんど変化がなかった。塩素混合比 50%の条件では自発的エッチングを起こす化学種が大量に存在するため、32sccm の酸素を導入することでは自発的エッチングをほとんど阻止できないためと考えられる。

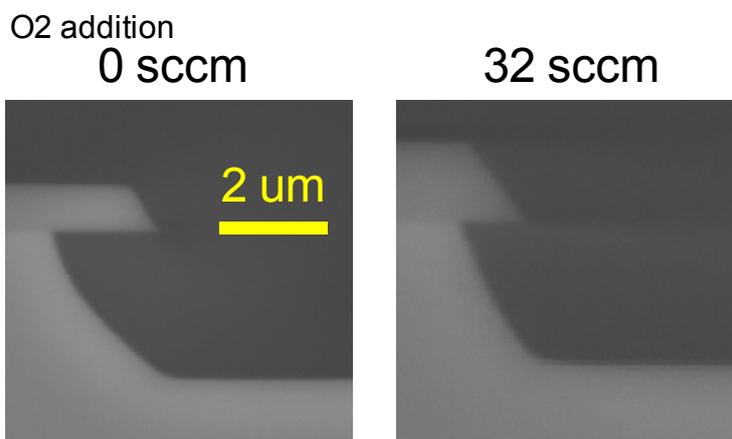


図②-(1)-1.22 フッ素:塩素=50%:50%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチング結果の SEM 写真

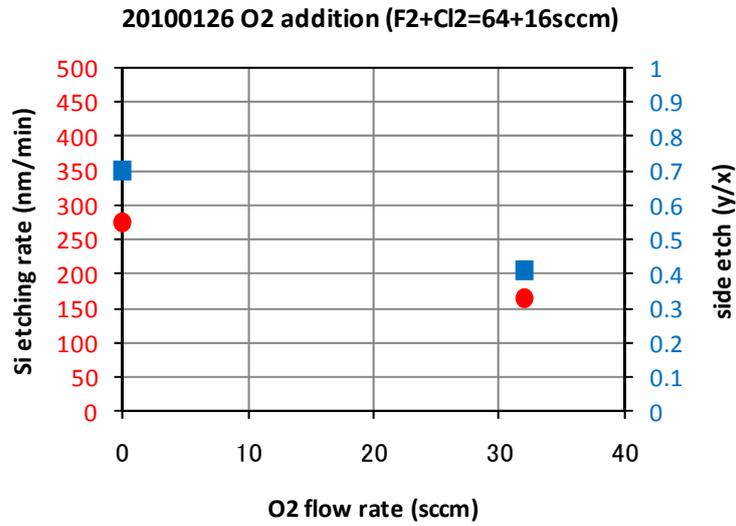


図②-(1)-1.23 フッ素:塩素=50%:50%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチングレートと垂直性

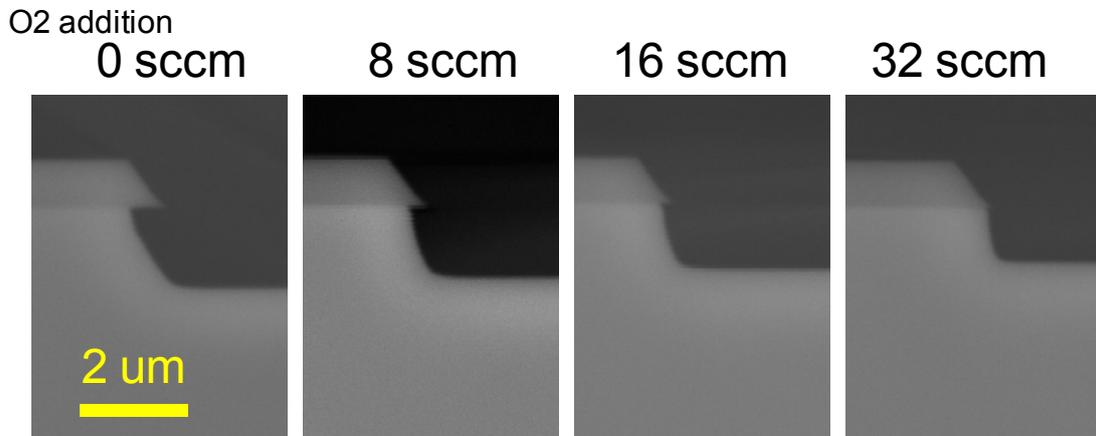
一方、塩素混合比 20%の場合は、図②-(1)-1.24 および図②-(1)-1.25 に示すように、酸素添加によりエッチレートは低下するが垂直性が改善された。さらに、塩素混合比 10%の場合、図②-(1)-1.26 および図②-(1)-1.27 に示すように、酸素添加による効果はさらに大きくなり、32sccm の酸素添加の場合には約 100sccm のレートで垂直性 $y/x=0$ が達成された。これは、フッ素に対する塩素混合比を下げることで自発的エッチングを起こす化学種が減少し、酸素による側壁保護と自発的エッチングとの競争において、側壁保護が自発的エッチングに対抗できるようになったためと考えられる。



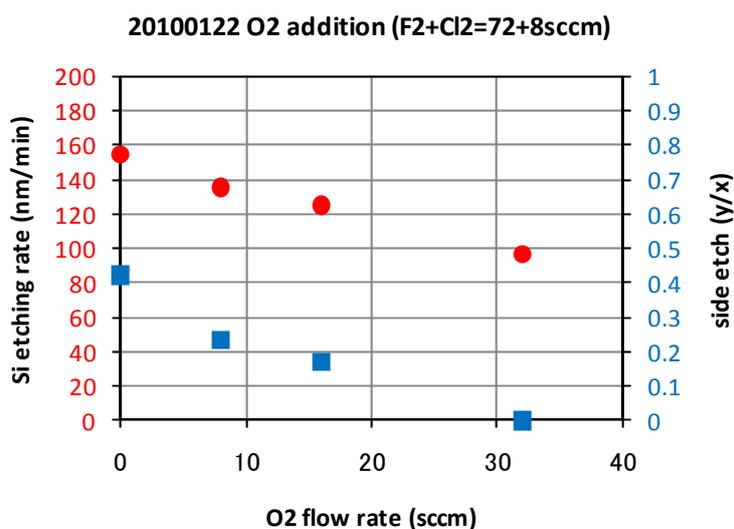
図②-(1)-1.24 フッ素:塩素=80%:20%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチング結果の SEM 写真



図②-(1)-1.25 フッ素:塩素=80%:20%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチング結果（レート、垂直性）



図②-(1)-1.26 フッ素:塩素=90%:10%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチング結果の SEM 写真



図②-(1)-1.27 フッ素:塩素=90%:10%に対して酸素を添加した場合の
中性粒子ビームによるエッチング結果（レート、垂直性）

d. まとめ

昨年度に導入した低損傷ドライエッチング設備を用いたシリコンエッチングを行った。フッ素単体では垂直性 0.2、レート 40nm/min のエッチングを行うことができた。塩素および酸素の導入により、レート 350nm/min 程度のエッチングや、ほぼ垂直でレート 100nm/min 程度のエッチングが可能となった。今後、この成果に基づき高アスペクト比構造のエッチングを検討する。

(1)-1-2 無損傷エッチングのMEMSにおける効果検証

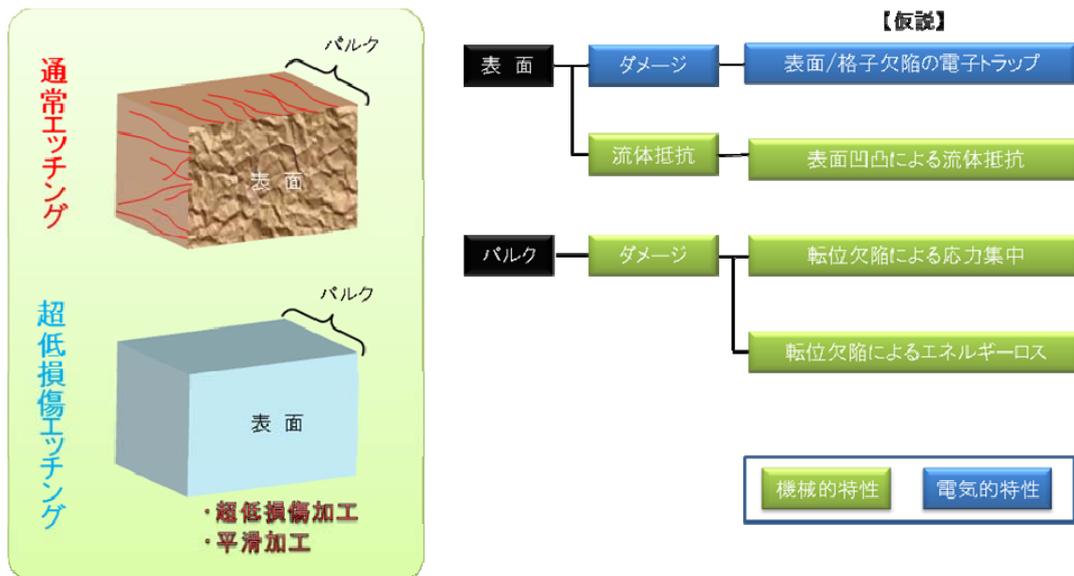
(1)-1-2-1 背景と目的

超低損傷エッチング技術は、試料にダメージを与えない超低損傷加工と原子レベルの平滑加工が特徴の加工技術である。これまで、東北大学の寒川らは超低損傷エッチング技術を用いて、トランジスタの電気的特性を向上させるなど様々な実験を通してその効果を検証してきた。一方、MEMS は電気と機械が相互作用することで機能を発現するものであり、電気的特性のみならず機械的特性も重要な評価項目となる。超低損傷エッチングがもたらす効果については、前述の通り電気的特性については検討がなされてきたが、機械的特性についてはまだ十分な検討がなされておらず、MEMS に適応した場合の具体的効果は未知である。しかしながら、超低損傷加工と原子レベルの平滑性の 2 つの特徴は、機械的特性においてエネルギーロスの低減、信頼性向上、流体抵抗の低減などの効果が期待できる。そこで、本研究では、それら機械的特性への具体的効果を検証し、超低損傷エッチング技術の MEMS への有効性を実証する。

(1)-1-2-2 実験内容

a. 実験概要

超低損傷エッチング技術の効果について、通常エッチング技術と比較し図②-(1)-1.28 のように考察した。まず、被エッチング材料を表面とバルクの 2 つの観点で大別し、超低損傷エッチング技術の特徴から更に分類分けを行い、仮説を立てた。その結果、電気的効果について 1 つ、機械的効果について 3 つの仮説を立てることができた。



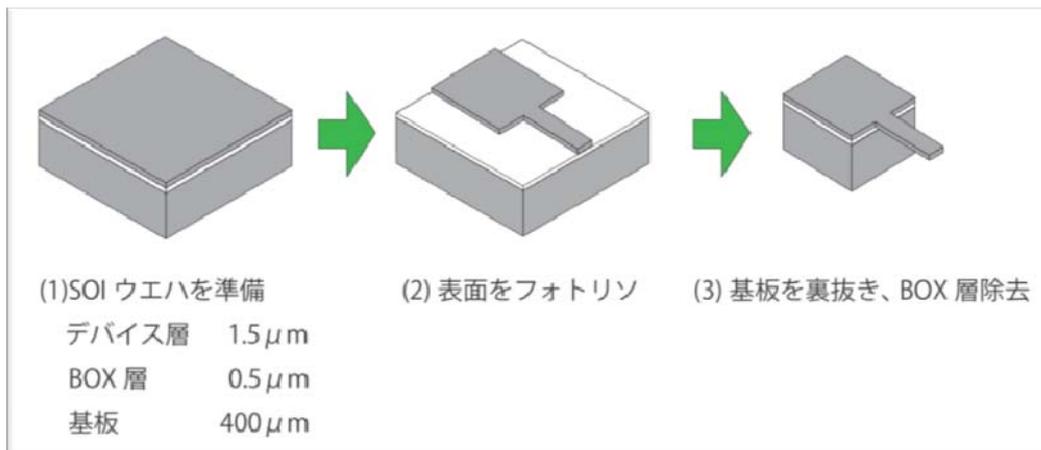
図②-(1)-1.28 超低損傷エッチングの効果の仮説一覧

まず、表面凹凸による流体抵抗は、平滑性の効果から従来エッチングと比較し、低減できることが予想されるが、通常エッチングの場合でもその凹凸サイズは $0.1\mu\text{m}$ 程度と非常に小さく、その効果は小さいと考えられる。また、転位欠陥による応力集中については、超低損傷の効果から低減できることが予想される。しかしながら、その効果を検証するには長期的な負荷試験が必要であり、その効果を容易に検証することは出来ないと考えられる。そこで、本研究では転位欠陥による機械的動作のエネルギーロスに対する効果について検証を実施する。転位欠陥によるエネルギーロスは、低損傷の効果であり MEMS 構造におけるエッチング面すべてにおいて効果が期待でき、また長期的な試験も必要としない。例えば、カンチレバー上面を超低損傷エッチングと従来エッチングで処理し、その振動特性を測定することで効果を容易に確認することができる。また、カンチレバーの構造も単純な片持ち梁構造であり、比較的作製が容易な MEMS 構造である。そこで、我々はこのカンチレバーによる評価方法を用いて、低損傷エッチングの機械的特性への効果検証を行った。まず我々は、カンチレバーを作製した。そして、カンチレバーの振動特性でありエネルギーロスの指標となる Q 値を測定し、その変化を観察することで低損傷エッチングの機械的特性の効果を検証した。

b. 振動特性測定用カンチレバー作製

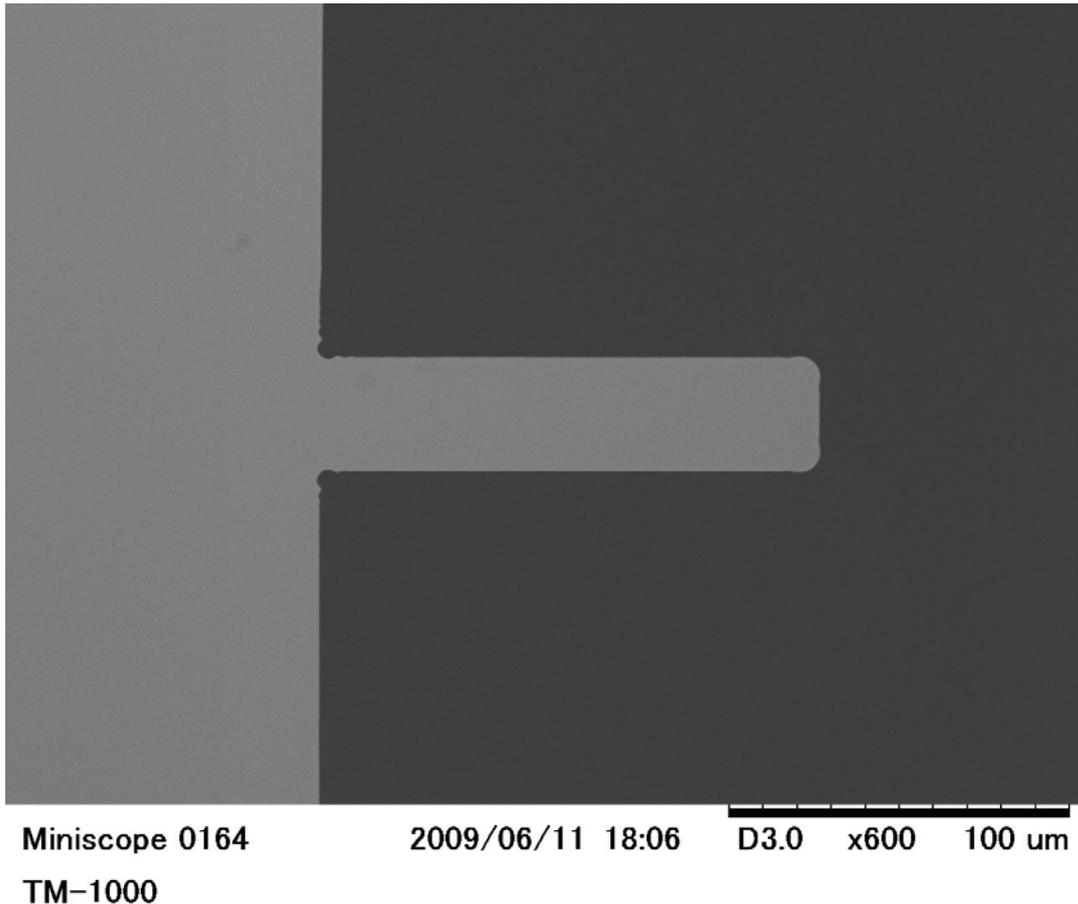
ここでは、振動特性測定用カンチレバーの作製方法について述べる。我々は、

カンチレバーを作製する方法としては、最もシンプルである SOI 基板を用いた作製工程（図②-(1)-1.29）を採用した。まず SOI 基板は、デバイス層 1.5 μm 、BOX 層 0.5 μm 、基板 400 μm のものを使用した。そして、SOI ウエハ表面にフォトリソによりカンチレバー形状を形成する。その後裏面よりカンチレバー土台部分のみを残すように深堀エッチング処理を行い、最後に BOX 層をフッ酸により除去した（図②-(1)-1.29）。



図②-(1)-1.29 カンチレバー作製工程図

このようにして作製したカンチレバーの SEM 写真を図②-(1)-1.30 に示す。カンチレバーのアーム部分の幅は 30 μm 、長さ 150 μm 、厚さ 1.5 μm である。また、カンチレバーの土台部分は 3.4 \times 1.6mm のサイズとし、ハンドリングするために十分なサイズとした。

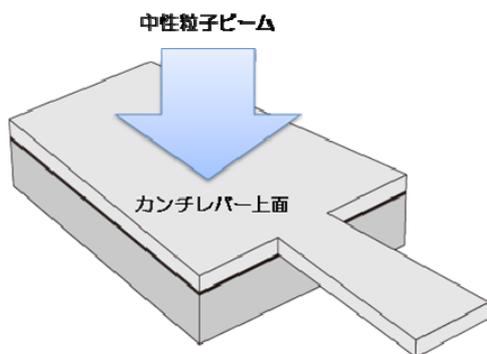


図②-(1)-1.30 作製したカンチレバーSEM 写真

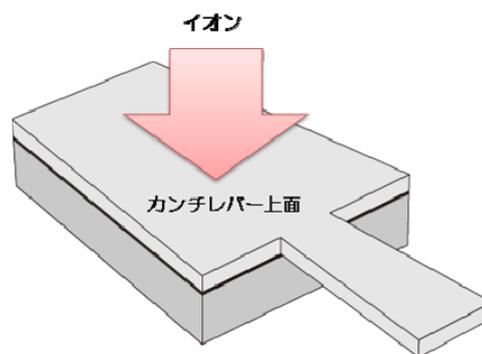
c. カンチレバーのエッチング処理

作製したカンチレバーを用いて機械的特性の効果を検証するために、超低損傷エッチングと通常エッチングを用いた加工処理を行う（図②-(1)-1.31）。各エッチング処理は、カンチレバー上部全面に対し行い、アーム部分を構成するデバイス層 $1.5\mu\text{m}$ 部分のシリコンを掘りこむ。このようにして、カンチレバーのアーム上面部分に意図的に転位欠陥を発生させる。そして、処理前後の違い・処理方法の違いによって表面の転位欠陥状態が異なるカンチレバーを作製し、その振動特性を評価することで、超低損傷エッチングの機械的特性への効果を検証する。

超低損傷エッチング処理



通常エッチング処理



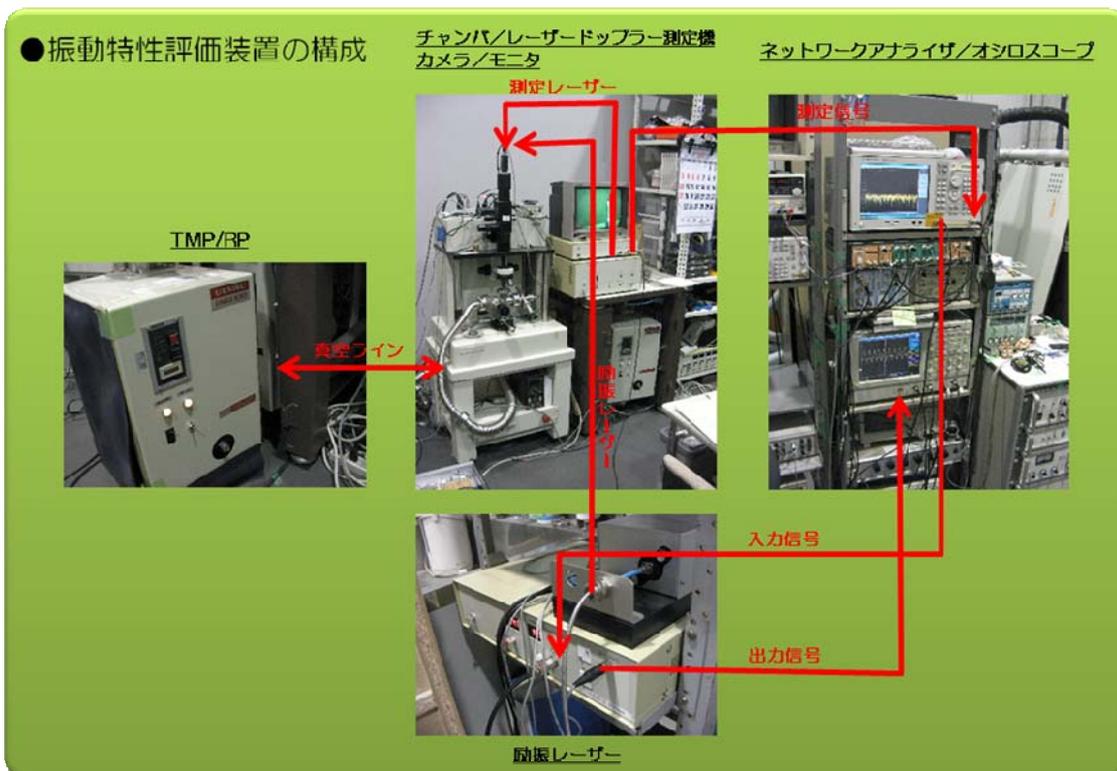
図②-(1)-1.31 エッチング処理の概要図

d. カンチレバー機械特性評価

ア. 振動特性評価手法

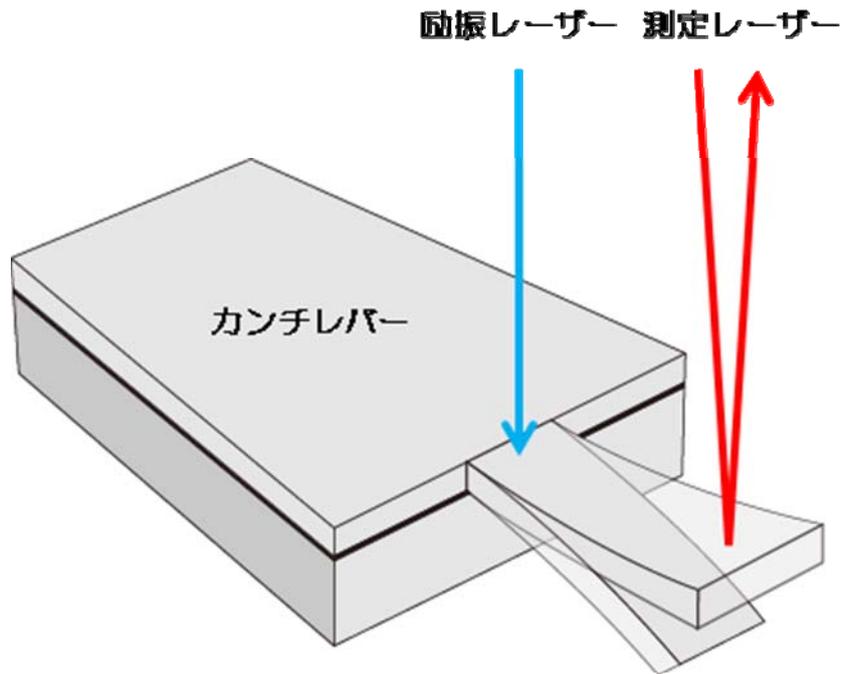
カンチレバーのエネルギーロスは、その振動特性における Q 値によって評価できる。 Q 値は、振動系の減衰を表す数値であり、減衰が小さければ Q 値が大きくなり共振ピークが高くなる。逆に減衰が大きければ Q 値が小さくなり共振ピークは低くなる。本研究では、真空中でレーザー励振法によってカンチレバーを振動させ、レーザードップラー測定機によって Q 値を計測した。

次にカンチレバーの Q 値を測定するための評価系 (図②-(1)-1.32) について述べる。評価系は、真空状態にするためのチャンバ・ロータリーポンプ (RP) ・ターボ分子ポンプ (TMP)、カンチレバーを振動させるための励振レーザー・オシロスコープ、 Q 値測定のためのレーザードップラー測定機・ネットワークアナライザ、サンプル確認用のカメラ、モニターで構成されている。それぞれの装置は、図に示す通り相互に接続されており、カンチレバーの振動特性を簡易に測定できる構成となっている。



図②-(1)-1.32 振動特性評価装置の構成

カンチレバーは、チャンバ内のステージに設置され、RP と TMP によって流体抵抗を十部は無視できる程度の真空状態にされる。そして、カンチレバーのアームの根元部分に励振レーザーを照射することでレーザーの熱エネルギーによってアームを微小振動させる。共振は、指定の範囲で励振レーザーの周波数をスイープさせることで発生させる（図②-(1)-1.33）。また、アームの先端部分に測定レーザーを照射し、その戻り信号を計測することで、レーザードップラーの原理により振動によるアームの速度変位を観測する。これらの信号をネットワークアナライザでデータ収集・解析する。このようにして、カンチレバーの共振周波数と Q 値を測定することができる。



図②-(1)-1.33 振動特性評価の概要図

イ. 振動特性Q値の取り扱い

これまでカンチレバーのエネルギーロスの評価として Q 値を測定することを述べてきた。しかし本実験では、カンチレバー上面をエッチング処理するために、カンチレバーアーム部の厚みが処理前後で変化する。Q 値は、アーム部の厚み変化による影響も受ける。そのため、Q 値の単純比較では、転位欠陥影響と厚み変化の影響の両方の変化を観測したことになる、低損傷エッチングだけの効果を検証することはできない。そこで我々は、Q 値と共振周波数 f によって、Q/f の値で規格化することで厚み変化の影響を除去した。Q 値と共振周波数 f はともに、カンチレバーの厚さ h に比例することが分かっている。そのため、式②-1)に表される通り、Q/f の値を計算すると厚み h の影響を除去することができる。

$$\frac{Q}{f} = \frac{2\pi m}{r_f} \propto \frac{h}{r_f} = \frac{h}{ah} \quad (②-1)$$

よって、我々は本実験において、Q 値と共振周波数 f のそれぞれの値を計測し、Q/f の値を比較することで低損傷エッチングの効果を検証する。

(1)-1-2-3 実験条件

a. 検証実験概要

検証実験はこれまで述べたとおり作製したカンチレバーと条件で実施するが、エッチング処理の条件は、検証内容によって異なる。そのため、エッチング処理の条件は、次の2つの検証実験によってそれぞれ条件設定を行った。

実験1：MEMS用途を目的とした高レート条件での効果検証

実験2：転位欠陥の除去による機械特性向上の効果検証

実験1では、MEMS用途に開発された高レート条件を用いて低損傷エッチングと通常エッチングの比較をすることで機械的效果を確認する。実験2では、通常エッチング処理により多量の転位欠陥を発生させ振動特性が悪化したカンチレバーを追加で低損傷エッチングすることで、転位欠陥が除去され、特性が向上するかを検証する。

b. エッチングの詳細条件

ア. 実験1

実験1でのエッチング条件を表②-(1)-1.1に示す。超低損傷エッチングは、MEMS用途に開発されたF₂ガスとCl₂ガスの混合ガスを用いた高レート(250nm/min)条件を使用した。一方、通常エッチングは、デポ膜が形成されないようにするためSF₆ガスのみを使用した。エッチング処理時間は、各エッチング処理でのエッチング量が同じになるように3条件を設定した。

表②-(1)-1.1 実験1におけるエッチング条件

		超低損傷エッチング	通常エッチング
ガス1	ガス種	F ₂	SF ₆
	流量	40 sccm	140sccm
ガス2	ガス種	Cl ₂	-
	流量	40 sccm	-
RF Power		3000 W	1000 W
Bias Power		30W	60W
エッチング時間		77/112/152sec	10/20/40sec
サンプル数		3/3/3	1/1/1

イ. 実験 2

実験 2 でのエッチング条件を表②-(1)-1.2 に示す。超低損傷エッチングは、実験 1 と同様の条件を設定した。一方、本実験において通常エッチングは、転位欠陥を多く形成することを目的としているため、SF₆ ガスで実際に掘るのではなく、Ar ガスを使用しカンチレバーアーム部分の厚みを変化させることなく表面に転位欠陥を形成した。超低損傷エッチングの処理時間は、一般的な転位欠陥の深さとされる 100nm 以上を除去できる時間を設定した。一方通常エッチングは、転位欠陥が形成するために十分長い処理時間を設定した。

表②-(1)-1.2 実験 2 におけるエッチング条件

		超低損傷エッチング	通常エッチング
ガス 1	ガス種	F ₂	Ar
	流量	40 sccm	50sccm
ガス 2	ガス種	Cl ₂	-
	流量	40 sccm	-
RF Power		3000 W	2000 W
Bias Power		30W	0W
エッチング時間		77sec	1200sec
サンプル数		3	3

(1)-1-2-4 実験結果

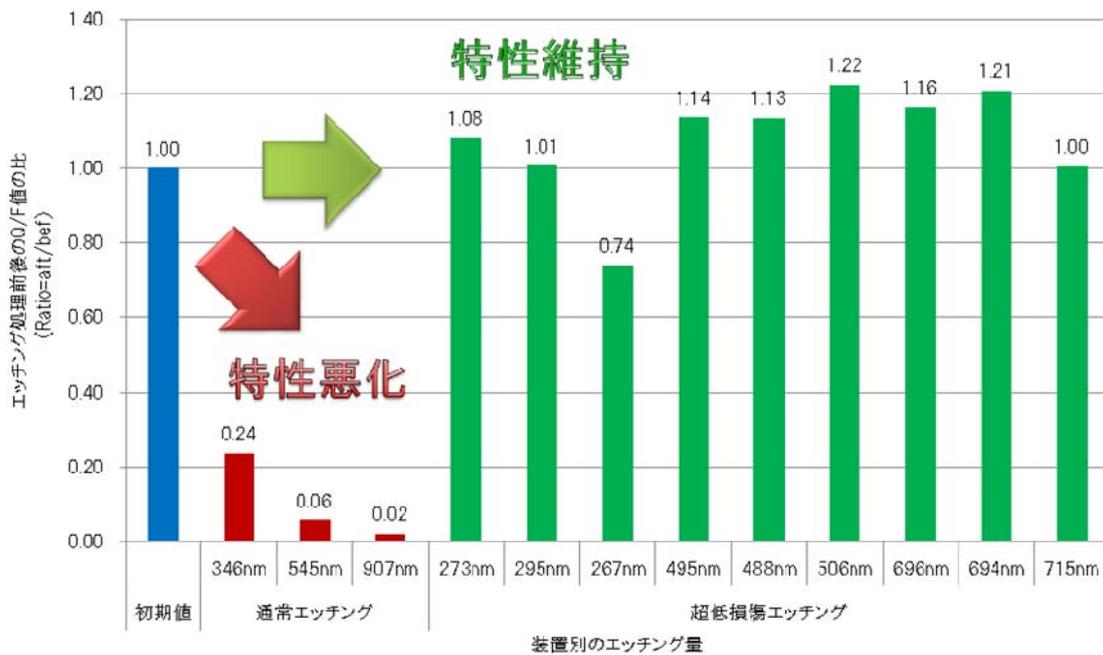
a. 実験 1 の結果

実験 1 により得られた結果を表②-(1)-1.3 に示す。そして、規格化された Q/f の処理前後の変化を図②-(1)-1.34 に示す。横軸はエッチング処理別のエッチング量を表し、縦軸は規格化した Q/f の値のエッチング処理前後の比を表す。よって、エッチング処理による転位欠陥によって振動特性が悪化しなければ、Q/f は維持され処理前後の変化が縦軸の値は 1 となり、その影響が表れれば低下する。図②-(1)-1.34 の結果より、超低損傷エッチングの Q/f の比は、エッチング量によらずほぼ 1 を維持し機械的特性を維持している。一方、通常エッチングの Q/f の比は、エッチング量の増加とともに大きく低下し、その機械的特性が悪化していることがわかる。これらの結果から、低損傷エッチングが通常エッチングと比較して、機械的特性においても有効であることが確認できた。また、

機械的特性を悪化させることなく加工できることも確認できた。

表②-(1)-1.3 実験 1 における Q/f の測定結果

	サンプル No.	処理時 間 [sec]	エッチン グ量 [nm]	Q/f		
				処理前	処理後	前後比
通常エッチング	1	10	346	0.60	0.14	0.24
	2	20	545	0.69	0.04	0.06
	3	40	907	0.43	0.01	0.02
超低損傷 エッチング	4	77	273.41	0.94	1.02	1.08
	5	77	294.68	0.95	0.96	1.01
	6	77	266.72	0.89	0.66	0.74
	7	112	495.32	0.91	1.03	1.14
	8	112	488.44	0.94	1.07	1.13
	9	112	506.2	0.89	1.09	1.22
	10	152	696.2	0.92	1.07	1.16
	11	152	693.87	0.89	1.07	1.21
	12	152	714.62	0.92	0.92	1.00



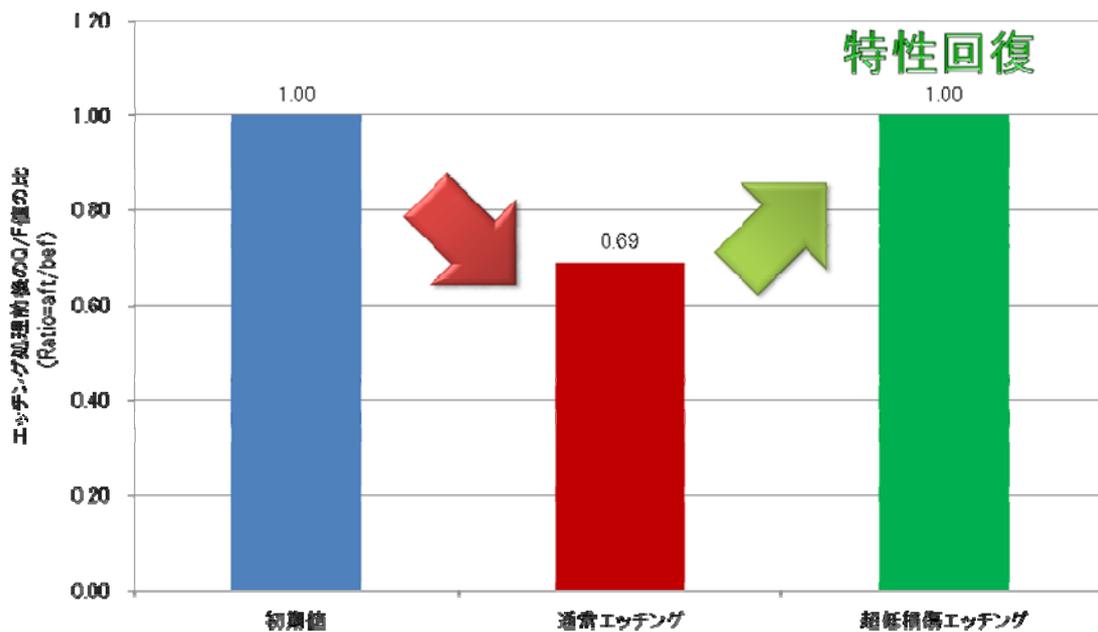
図②-(1)-1.34 実験 1 における Q/f の処理前後の変化

b. 実験 2 の結果

実験 2 により得られた結果を表②-(1)-1.4 に示す。そして、規格化された Q/f の処理前後の変化を図②-(1)-1.35 に示す。横軸はエッチング処理の工程を表し、縦軸は図②(1)-1.34 の場合と同様に Q/f の比を表す。図②-(1)-1.35 の結果より、通常エッチングで一度低下した特性が、超低損傷エッチングにより再び回復していることが確認できた。この結果から、低損傷エッチングを用いて、表面の転位欠陥を除去できることが確認できた。

表②-(1)-1.4 実験 2 における Q/f の測定結果

	サンプル No.	処理時 間 [sec]	エッチン グ量 [nm]	Q/f		
				処理前	処理後	前後比
通常エッチング	13	1200	0	0.90	0.47	0.52
	14	1200	0	0.80	0.64	0.80
	15	1200	0	0.96	0.71	0.74
	平均	-	-	-	-	0.69
超低損傷 エッチング	13	77	413.17	0.90	1.05	1.17
	14	77	395.49	0.80	0.70	0.88
	15	77	398.99	0.96	0.91	0.95
	平均	-	-	-	-	1.00



図②-(1)-1.35 実験 2 における Q/f の処理前後の変化

c. その他

実験 1、2 におけるサンプル No.4,5,6,13,14,15 の各エッチング量について注目し、その一覧を表②-(1)-1.5 に示す。この 6 個のサンプルはそれぞれ同条件の低損傷エッチング処理を行ったものであり、違いは Ar ガスによる通常エッチン

グ処理の有無だけである。しかしながら、実験 1 と実験 2 のエッチング量には大きな差があり、レートにすると約 1.5 倍程度異なる。この結果は、通常エッチングが転位欠陥を利用することでエッチングを加速させているメカニズムと同様の理由と考えられ、具体的にその効果を確認できたと考えられる。この結果から、低損傷エッチングにおいても通常エッチングと同様に紫外線照射を行い、被エッチング対象物の表面に意図的に転位欠陥を形成することで、さらに高レートな加工が実現できる可能性が期待できる。

表②-(1)-1.5 低損傷エッチング同条件サンプルにおけるエッチング量一覧

	サンプル No.	処理時間 [sec]	エッチング量 [nm]	エッチングレート [nm/min]
実験 1	4	77	273	213.0
	5	77	295	229.6
	6	77	267	207.8
実験 2	13	77	413	322.0
	14	77	395	308.2
	15	77	399	310.9

(1)-1-2-5 まとめ

本研究では、低損傷エッチングの機械的特性への具体的な効果を検証するために、カンチレバーの振動特性である Q 値を用いて評価を行った。そして、効果検証のため 2 つの実験を行った。その結果、実験 1 では MEMS への適応を目指した高レートな低損傷エッチング条件において、カンチレバーの機械的特性が低下しないことを確認し、低損傷エッチングの具体的な効果を立証した。また、実験 2 においては、転位欠陥を有する表面を低損傷エッチング処理することにより、転位欠陥を除去することができ、その効果として悪化していた機械的特性が回復することが確認できた。この結果は、MEMS での裏抜きなど極端に深いエッチング処理が必要な場合、通常エッチングで大きく加工した後に、低損傷エッチングで表面処理すれば、その効果を得られることを示唆しており、MEMS への適応が期待できる。今後は、本研究結果を受けて、より具体的な MEMS デバイスへの適応を行い、そのデバイス機能の向上を目指す。

(1)-1-3 fsレーザー改質を用いた3次元加工

(1)-1-3-1 背景及び目的

a. 背景

合成石英などの透明材質にフェムト秒レーザーを集光照射することで、集光部に構造改質部が形成される。この構造改質部はフッ酸などによるエッチング選択性が極めて大きく、基板内部に分岐・屈曲等を有する任意の3次元構造を基板内部に形成出来ることが知られている（以下では本技術をフェムト秒レーザーアシスト・エッチングと記載する）。更にこの技術を用いて、3次元インターポータルなどへの応用検討がなされており、半導体デバイスパッケージサイズの高密度・高集積化が期待されている。しかしながら、従来報告がなされてきた3次元構造の孔径はミクロンオーダーのサイズで、高密度・高集積化には限界がある。そのためインターポータルを更に高密度・高集積化するためには孔径をナノオーダーまで孔を微細化する必要があり、孔内部に導体を安定且つ均一に製膜・充填等を行うには孔側面の平滑性が要求される。

石英等のガラスをエッチング加工する技術として、このほかにフォトリソグラフィやレーザードリル等の技術が知られている。前者は基材表面にフォトリソグラフィ技術を用いてマスクを作製し、異方性のドライエッチング等を行うことで基材に垂直1次元の孔を形成する技術である。この技術では電子線描画装置等によって100nm以下でのパターン形成が可能である。しかしながらドライエッチングでは異方性の高いエッチングによって加工を行うため、横方向・分岐構造等を有する3次元構造を基材内部に形成させることは不可能である。さらに石英等の材料はエッチングレートが小さいなどの理由により、超ハイアスペクト孔を形成させることが極めて難しい。

またレーザードリルはウェットエッチング等を行わずともピコ秒オーダー以下の超短パルス幅を有するレーザーを用いて、横方向、分岐構造等を有する3次元微細孔を形成することが可能な技術である。しかしながら、アブレーション加工によって孔を形成するため、パルスエネルギーを大きくする必要があり、孔の径が最小~4 μm 程度とナノオーダーの孔形成が難しいだけでなく、孔の表面が荒れ、デブリが孔に詰まる可能性があるため高アスペクトな孔形成が困難であるという問題がある。

今回検討を行ったフェムト秒レーザーアシスト・エッチングはレーザー集光部に構造改質部を形成し、その後エッチングを行う技術であるため、3次元孔形成

が出来るだけでなく、比較的平滑な孔側面とすることが出来る。更には、デブリが孔に詰まることがないため、孔の高アスペクト化が可能である。ナノオーダーでの孔の加工は今までなされていないが、後に述べる周期構造形成技術を用いることでナノオーダーの加工が実現できる可能性がある。

以下にはフェムト秒レーザーによる構造改質について述べる。従来一般的に用いられてきた YAG や CO₂ などのレーザー加工では、電子温度とイオン温度が平衡状態になる熱的過程によって熔融反応・アブレーション反応が起きるため、熱拡散長が極めて大きく集光部周辺にダメージを与えてしまう。更に熱的な加工は基材が光を吸収するレーザー波長を用いた加工であるため、光路上にもダメージを与えるため加工領域が広い。一方でピコ秒オーダー以下のパルス時間幅を有するレーザーはパルス幅が極めて小さく、パルス先頭値が大きい。そのため、電子温度とイオン温度とが平衡状態にならず非熱過程で加工が進行する。非熱過程では熱拡散を極限まで抑えることが出来るとともに、多光子吸収反応に始まる非線形光学現象が支配的となる。そのため基材に対して透過する波長帯域のレーザーを用いた加工が可能であり、パルスエネルギーの高い集光部にのみ構造改質部を形成することが出来る。更には集光部を 3 次元的に動かすことで基材内部に任意の 3 次元的な構造改質部が形成される。

構造改質部では数百ナノオーダーの周期構造が自己形成的に形成されることが知られている。これは、先に述べた多光子吸収反応によって、加工対象の電子が励起されることで発生する電子プラズマ波と入射光の干渉によって形成されることが考えられている。電子プラズマ波は電子の疎密波であり、入射光の電場方向に対してのみ干渉が起きるため、周期構造の周期の向きは入射光電場に対して水平な方向となる。例えば合成石英の場合、干渉の強まる領域ではレーザー非照射領域よりも酸素原子が欠乏した層を形成する。これは酸素原子が周期構造領域から飛び出し、周期構造の間へ移動するもので、周期構造の間には周辺よりも酸素原子の多い層が形成される。この酸素の欠乏した層はフッ酸等のエッチャントに対して非照射領域よりもエッチング選択性が極めて大きくなることが知られている。この周期構造を選択的にエッチングしていくとき、ウェットエッチングを用いると乾燥時の表面張力によって、周期構造の破壊が起きる可能性がある。さらにウェットエッチングは等方的なエッチングであるため、周期構造の形状制御が乏しいといえる。これら問題を解決する手法として、ドライエッチングをウェットエッチングの代替として用いることが有効であると考えられるが、今までのこのような検討は殆どなされていない。

b. 目的

本研究はフェムト秒レーザーアシスト・エッチングの技術を発展させナノオーダーの3次元構造を形成させるとともに、エッチングにドライエッチングを用いることでレーザー改質部における周期構造のエッチング選択性を評価することを目的とする。本年度は、レーザー照射部と非照射部とのエッチング選択性の高く、加工原理が解明されている合成石英を加工対象とし研究をおこなった。

本研究におけるレーザー照射領域は基板の表面直下から深さ $30\mu\text{m}$ の領域とした。これは従来研究がなされてきた加工領域は基板表面と基板表面からおおよそ $30\mu\text{m}$ 以下の深い領域であり、表面直下からおおよそ深さ $30\mu\text{m}$ の領域は未だ詳しく調査されていないためである。この領域において研究が詳しくなされてこなかったのはステージなどの傾き等によって深さ方向に対して正確にレーザーを照射することが困難であり、評価が難しいためであると考えられる。それ故この領域を調査するためにはレーザーの照射方法に工夫が必要であり、本研究ではトレンチ状に構造改質部を形成することで評価を行った。詳細は次節以降で説明する。

さらにレーザーパルスエネルギーをアブレーション閾値以下として評価を行った。これは従来フェムト秒レーザーアシスト・エッチングで評価が行われてきたのが主にアブレーション閾値以上のエネルギーであり、アブレーション閾値以下でのエッチング選択性評価は今まで詳しく調査されていないためこの領域での研究をおこなうことで新たな特性を見つけ出すこととした。

(1)-1-3-2 表面改質部へのドライエッチング効果

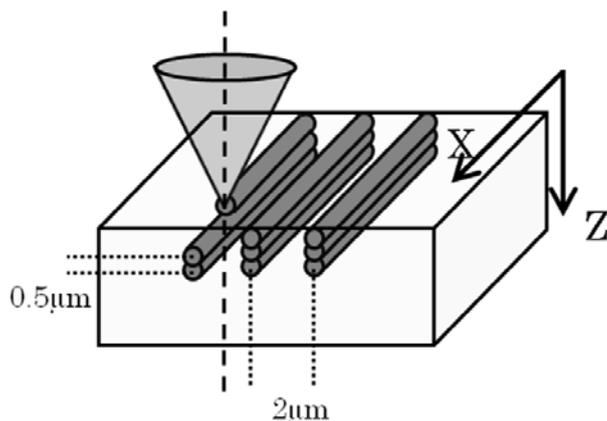
a. 実験方法

本研究で評価に用いたフェムト秒レーザーはチタン・サファイアレーザーである。レーザーパルスは波長 800nm 、パルス時間幅 $260\text{-}300\text{fs}$ 、繰返周波数 200kHz を使用し、開口数 0.5 の対物レンズによって集光照射した。レーザーの走査速度は 1mm/s である。また本研究ではレーザーパルスエネルギーをアブレーション閾値以下である $40\text{-}90\text{nJ}$ の範囲で検討を行った。

ドライエッチングでは CCP-RIE によるエッチングを実施した。CCP-RIE における加工条件は RF パワー 1000W エッチング時間 5 分、ガス組成が CF_4 と O_2 で流量はそれぞれ 45.5sccm であり、その他のパラメータを適宜変更した。

図②-(1)-1.36 にレーザー照射方法を示す。合成石英基板内部の X 軸方向に沿っ

て、レーザー照射を行い、 $2\mu\text{m}$ ピッチで 6 箇所 of レーザ改質部を形成する。その後、集光部を Z 軸方向に $0.5\mu\text{m}$ だけ高さを変え、同様に $2\mu\text{m}$ ピッチで 6 箇所のレーザー改質部を形成する動作を繰り返してトレンチ状に改質部を形成した。この際、レーザーは基板表面から遠い領域から照射を行い、基板表面まで改質部を形成した。



図②-(1)-1.36 トレンチ構造のレーザー照射方法を示す模式図

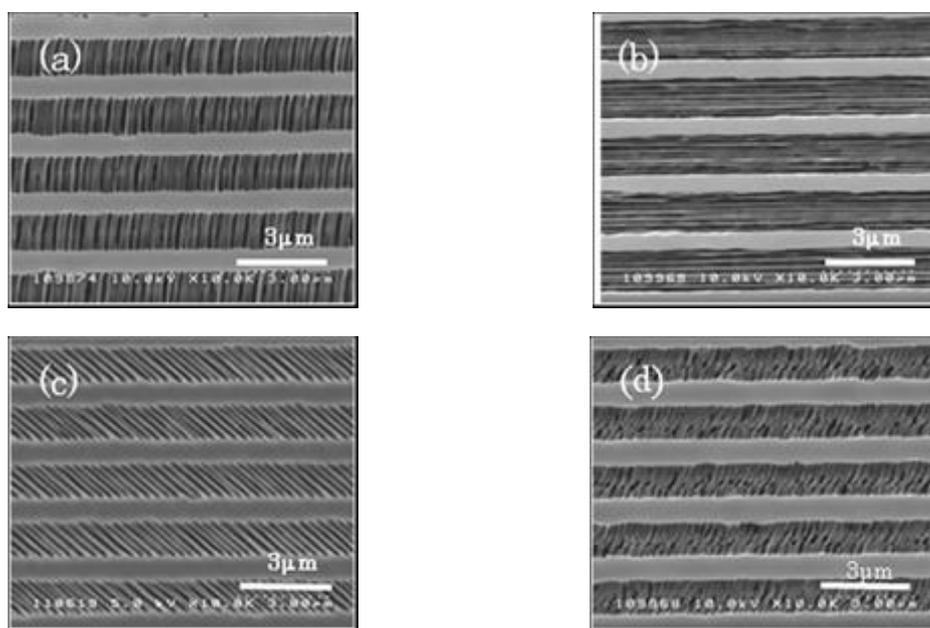
b. 実験結果

ア. 偏波依存性の調査

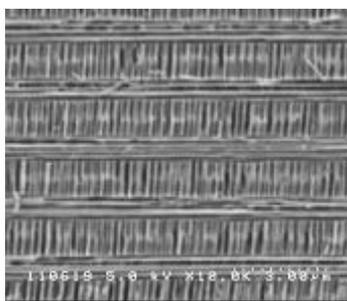
まずレーザーの偏波を変えることでどの様に周期構造が変化するかを調査した。偏波はレーザーの走査方向に対して、水平、垂直、 45° の直線偏波と円偏光の 4 条件で、レーザー照射時のパルスエネルギーは 50nJ/pulse 、エッチングには CCP-RIE を用い、プロセス圧力を 80Pa とし評価をおこなった。SEM による観察結果を図②-(1)-1.37 に示す。図②-(1)-1.37(a)はレーザー走査方向に対して偏波を水平、(b)はレーザー走査方向に対して偏波を垂直、(c)はレーザー走査に対して偏波を 45° 、(d)は円偏波でレーザー照射した後、ドライエッチングによって加工をおこなった観察結果を示す。

(a)～(c)ではそれぞれ偏波に対して垂直な方向に周期構造の溝が形成されることが確認された。またこのときの周期構造のピッチは 200nm 程度であった。一方、(d)では特異な形状が形成されることが確認された。レーザー照射後は円筒状の凸部が形成されているが、エッチング後には斜めに傾いた周期構造が形成された。これは円偏波で短パルスをレーザー照射した際には偏波の回転方向に渦を巻いた形状となることが知られており、連続的に照射されるとこのような特異な形状になるものと考えられる。

さらに、レーザを2段階にレーザ照射する方法を試みた。まずレーザ走査に対して偏波を垂直に照射した後、その後偏波を 90° 回転させレーザ走査に対して偏波を水平としレーザ照射をおこなった。レーザパルスエネルギーは 50nJ、エッチング条件は本節で示した同一条件で加工を行った。結果を図②-(1)-1.38に示す。偏波を変えた際にレーザ照射位置がわずかにずれているが、後からレーザ走査方向に垂直に形成された周期構造の幅の方が広い。すなわち先にレーザ照射をおこなった構造改質の履歴が消え、後からレーザ照射を行った構造改質の履歴が反映される結果となった。



図②-(1)-1.37 周期構造の偏波方向依存を観察した SEM 像。(a)レーザ走査方向と偏波が水平、(b)レーザ走査方向と偏波が垂直、(c)レーザ走査方向と偏波が 45° 、(d)円偏波でレーザ照射を行い、CCP-RIE にてエッチングを実施。

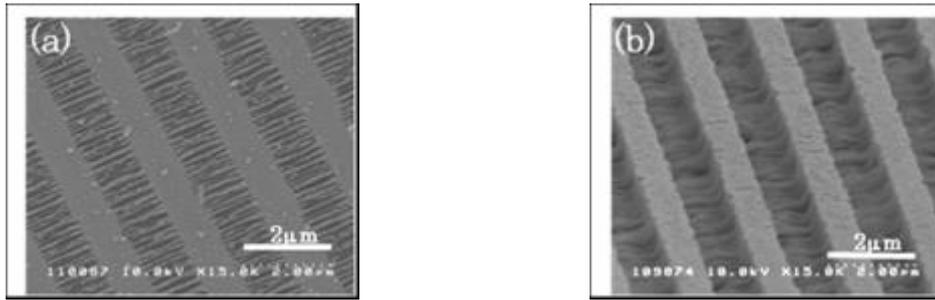


図②-(1)-1.38 偏波履歴が消えることを確認した SEM 像

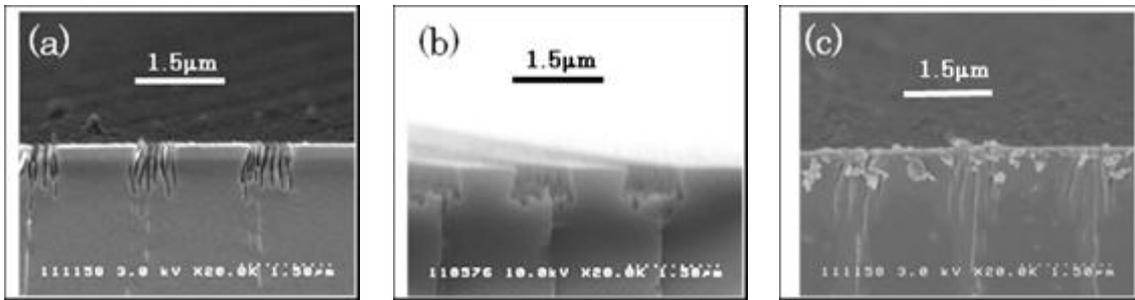
イ. ドライエッチング条件による形状制御性

次にドライエッチング条件を変えることで周期構造の形状がどのように変化するか観察をおこなった。レーザパルスエネルギーは 50nJ であり、エッチングは CCP-RIE を用い、プロセス圧力を 20–80Pa で変化させてエッチング後の形状観察を行った。結果を図②-(1)-1.39 に示す。図②-(1)-1.39 (a)(b)はエッチング圧力がそれぞれ 20、80Pa としたときの鳥瞰図であり、レーザ偏波をレーザ走査に対して水平とし、周期構造の溝とレーザ走査方向とが互いに垂直となるように加工を実施した。この際レーザ非照射部は 1200Å 程エッチングされている。プロセス圧力が低圧のときには周期構造のみが選択的にエッチングされ、高圧となるときにはレーザ照射部が全体的に窪み、底部に周期構造が形成されるようになる。さらに詳細を観察するため、周期構造の溝をレーザ走査方向に対して水平となるようにし、断面を観察した結果が図②-(1)-1.40(a),(b)であり、エッチング前の断面を図②-(1)-1.40(c)に示す。(a),(b)はドライエッチング時のプロセス圧力はそれぞれ 20、80Pa である。プロセス圧力が高い 80Pa では、レーザ照射部全体がエッチングされ、底部に周期凹凸が形成される。一方で圧力が 20Pa と低圧であるときには周期構造のみが選択的にエッチングされ、周期構造の凸部はレーザ非照射部の高さとはほぼ一致することが確認された。

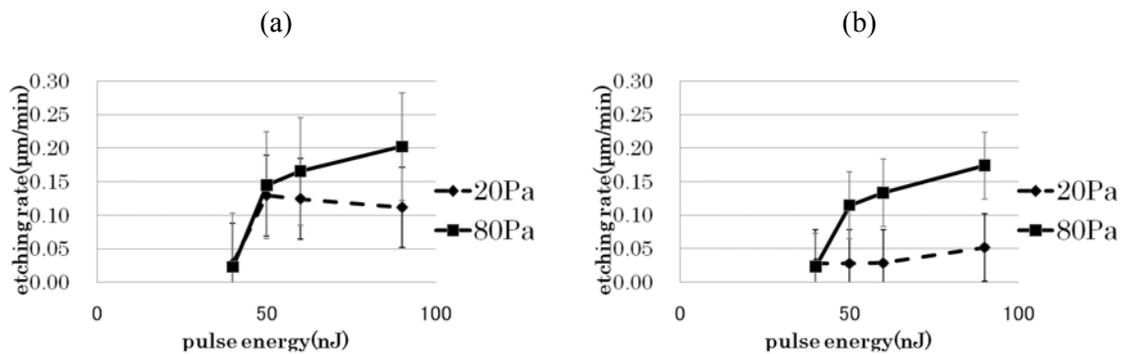
この観察結果を踏まえ、圧力 20Pa、80Pa における凹部及び凸部のエッチングレートを図②-(1)-1.41 に示す。(a)は凹部の(b)は凸部のエッチングレートをそれぞれ示しており、パルスエネルギーを 40nJ-90nJ で変化させ調査を行った。パルスエネルギーが 40nJ のときには周期構造がエッチング後に形成されず、エッチングレートはレーザ非照射部にほぼ一致した。その他のパルスエネルギーでは凹部のエッチングレートは、非照射部に対して選択的なエッチングが進行するが、プロセス圧力に対してそれほど大きな差がない。一方で凸部のエッチングレートは、プロセス圧力が 20Pa のときにはレーザ照射部は非照射部のエッチングレートとほぼ一致するが、80Pa のときには非照射部のエッチングレートよりも大きくなり、凸部においてのみプロセス圧力が周期構造の形状制御に大きく関わることを確認された。



図②-(1)-1.39 ドライエッチングのプロセス圧力による形状の違い①。(a)CCP-RIE のプロセス圧力 20Pa、(b)プロセス圧力 80Pa でエッチングを行った結果。



図②-(1)-1.40 ドライエッチングのプロセス圧力による形状の違い②。(a)プロセス圧力 20Pa、(b)プロセス圧力 80Pa でエッチングを実施した結果。(c)はレーザー照射後の断面を観察した結果。

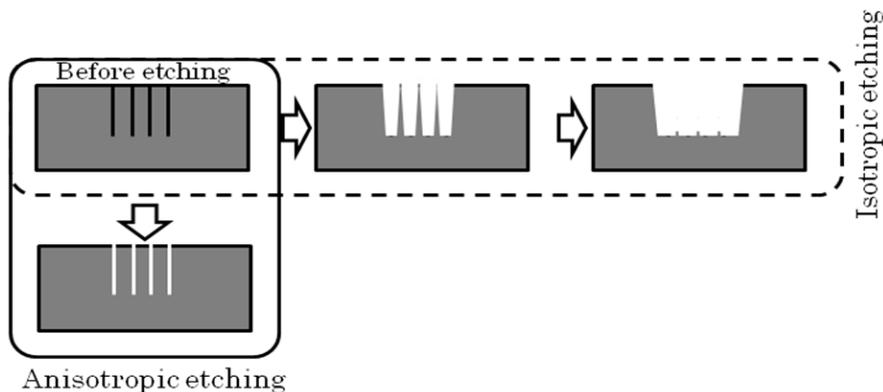


図②-(1)-1.41 プロセス圧力の違いによる凹凸部のエッチングレート。(a)凹部、(b)凸部のエッチングレート。

c. 考察

周期構造の形状がプロセス圧力によって制御される要因として、イオンの加速の違いが考えられる。プロセス圧力が 20Pa、80Pa のとき V_{DC} はそれぞれ 230V、

0V であった。すなわち、プロセス圧力が大きいときにはイオンの平均自由行程が短く、イオンの加速がほぼゼロでラジカルによる等方性エッチングが進行する。一方で、プロセス圧力が小さいときには平均自由行程が大きくなり、イオンが加速されイオンによる異方性エッチングとなる。等方性エッチングの場合、サイドエッチングが進行するため凸部の幅が細くなり、最終的には凸部が無くなるため、結果としてレーザ照射部全体がエッチングされ底部に周期構造が形成される形状となった（図②-(1)-1.42）。一方で異方性エッチングの場合にはサイドエッチングが進行せず、周期構造のみを選択的にエッチング出来るため、ハイアスペクトな周期構造が形成されたと考えられる。



図②-(1)-1.42 等方性・異方性エッチングにおける加工メカニズム

(1)-1-3-3 内部垂直方向改質部へのエッチング効果

a. 実験方法

さらに内部に形成された改質部のエッチング選択性の効果を確認するため、図②-(1)-1.36 に示した方法でレーザ照射をおこなった。合成石英基板内部の X 軸方向に沿ってレーザ照射を行い、 $2\mu\text{m}$ ピッチで 6 箇所のレーザ改質部を形成する。その後、集光部を Z 軸方向に $0.5\mu\text{m}$ だけ高さを変え、同様に $2\mu\text{m}$ ピッチで 6 箇所のレーザ改質部を形成する動作を繰り返した。この際、レーザは基板表面から遠い領域から照射を行い、基板表面まで改質部を形成した。またエッチングはウェットエッチングとドライエッチングの両加工方法によって評価を実施した。

b. 実験結果

ア. ウェットエッチングによるエッチング選択性評価

まずレーザー照射されたサンプルをウェットエッチングによって加工することを試みた。レーザー偏波をレーザー走査方向に対して垂直とし、周期構造の溝がレーザー走査方向に対して平行に形成されるようにした。ウェットエッチングには 0.5%フッ酸を常温で使用し、エッチング時間を 32 分とした。この際レーザー非照射部は 1000 Å エッチングされる。

結果を図②-(1)-1.43 に示す。(a)(b)はそれぞれレーザーパルスエネルギーを 50、60nJ で照射したものである。パルスエネルギーが 50nJ のとき、内部にハイアスペクトなナノオーダーのトレンチが形成されることが確認された。加工幅は 200nm、深さ $\sim 5\mu\text{m}$ であり、基板表面近傍には周期構造が形成された(a)。一方でパルスエネルギーが 60nJ であるときには加工幅が 50nJ の時よりも広く、側面が荒れたトレンチが形成された(b)。トレンチの深さは今回のレーザー照射領域とほぼ一致しており、更に深い領域までレーザー照射を行うことで、更に深い領域まで加工することが可能であり、本検討で用いたレーザー加工条件では最大 $10\mu\text{m}$ 程度の深さまでトレンチが形成されることを確認している。

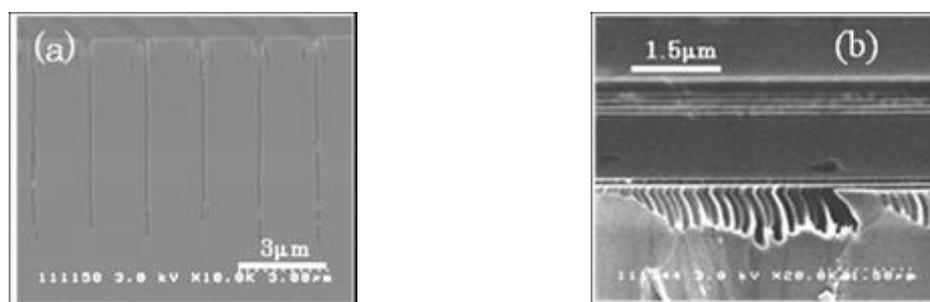


図②-(1)-1.43 トレンチの断面を観察した SEM 像①。(a)レーザーパルスエネルギー 50nJ、(b)60nJ にてレーザー照射を行い、その後フッ酸によってエッチングを実施。

次にエッチング時間を変更し加工幅がどの様に変化するかを調査した。図②-(1)-1.44(a)はエッチング時間 8 分で加工をおこなったものであり、このときの非照射部のエッチング量は 250 Å である。レーザーの深さ方向のピッチはスループットをあげるため $1\mu\text{m}$ として評価をおこなった。エッチング時間 8 分のとき、加工幅はおよそ 66nm で、エッチング深さは $5\mu\text{m}$ 程度であった。本結果より、エッチング初期の段階で、エッチャントが深い領域まで進行し、加工幅を広げていることが推察される。そのためエッチング時間が更に短い条件を用い

ると加工幅がより小さく、深さが同程度のトレンチが形成されるものと考えられる。

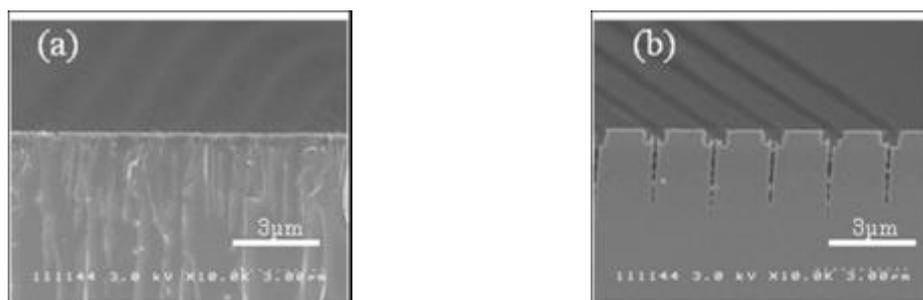
更にレーザーの偏波を 90° 回転し、周期構造がレーザー走査方向に対して垂直に形成されるように加工を行い同様な検討を実施した。レーザー走査方向に対して斜めに基板を分割し断面観察を行った結果を図②-(1)-1.44(b)に示す。先ほどの結果とは異なり内部にトレンチは形成されず、表面の周期構造のみが形成されることが確認された。すなわちナノオーダーのハイアスペクトなトレンチを形成させるにはレーザー偏波とレーザー走査の方向との関係が重要であり、互いに垂直となる状態でレーザー照射を行う必要があるといえる。



図②-(1)-1.44 トレンチの断面を観察した SEM 像②。(a)0.5%フッ酸で 8 分エッチングを行った後のトレンチの断面、(b)偏波をレーザー走査に対して水平としてレーザー照射し、フッ酸によるエッチングを行った結果。(b)はレーザー走査方向に対して斜め方向の断面観察を実施。

イ. ドライエッチングによるエッチング選択性評価

同様な検討をドライエッチングにて実施した。ドライエッチングでは表面の周期構造がガスの侵入を阻害する恐れがあるため、表面の周期構造部分を研磨した後ドライエッチングをおこなった。結果を図②-(1)-1.45 に示す。(a)がプロセス圧力 20Pa、(b)がプロセス圧力 80Pa の結果であり、レーザー照射時のパルスエネルギーはいずれも 50nJ である。圧力が 20Pa の時には内部の周期構造のエッチングが進行せず、圧力が 80Pa の時には周期構造の選択的なエッチングが観察された。すなわち圧力が高く等方的なエッチングの方が内部のエッチングが進行しやすいものと考えられる。



図②-(1)-1.45 ドライエッチングによる内部改質部のエッチング。(a)プロセス圧力 20Pa、
(b)プロセス圧力 80Pa で CCP-RIE にてエッチングを実施。

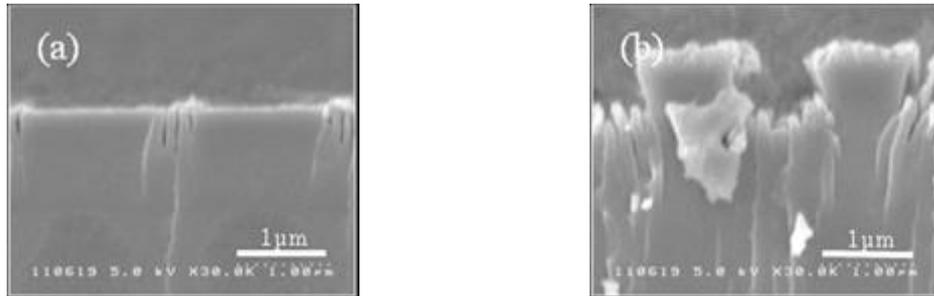
c. 考察

ハイアスペクトなトレンチ形状が形成されるには、(1)加工閾値近傍のより小さなパルスエネルギー、(2)レーザ走査方向が偏波に対して垂直の 2 つの条件が必要となる。

(1)のパルスエネルギーがより小さい程、加工幅が小さくなる理由として内部に形成される周期構造の数が大きく起因しているものと考えられる。通常、レーザ照射を行うと複数本の周期構造が偏波に対して垂直に形成される。さらにレーパルスエネルギーを小さくすると周期構造の本数が減り、最終的には周期構造の本数が 1 本になる。パルスエネルギーを変えたときの周期構造を断面観察した結果を図②-(1)-1.46 に示す。(a)はパルスエネルギー 50nJ、(b)は 90nJ でのレーザ照射後の断面を観察した結果である。パルスエネルギー 50nJ の時には内部に 1 本の周期構造が、90nJ の時には複数本の周期構造が内部に形成されることが確認された。パルスエネルギー 40nJ では周期構造が形成されなかったため、50nJ は周期構造形成の加工閾値近傍とあってよい。すなわち加工閾値近傍のパルスエネルギーで加工を実施した際には周期構造 1 本が形成され、その領域のみが選択的にエッチングされるため、ハイアスペクトな孔が形成される。そのため、文献によっては周期構造の幅が 20nm 程度との報告がなされているので、理論上はトレンチの加工幅を 20nm 程度にまですることが可能であると予想される。

(2)レーザ走査方向が偏波に対して垂直となる条件が必要となる理由であるが、こちらの加工原理は詳しくはわかっていない。しかしながら先に述べた偏波の履歴が消えるため現象によって履歴が完全に消えてしまうこと、あるいは周期構造の周期がレーザ走査に垂直となる場合には複数のパルス照射によって、同じ箇所にも周期構造が絶えず形成されるように加工が進行するが、周期構

造の周期がレーザ走査に対して水平となるときには自己形成的に周期構造が形成されるものの、必ずしも干渉の強まる箇所が一定の場所とはならないため、エッチング選択性が得られる程の周期構造が形成されないことが要因ではないかと考えている。

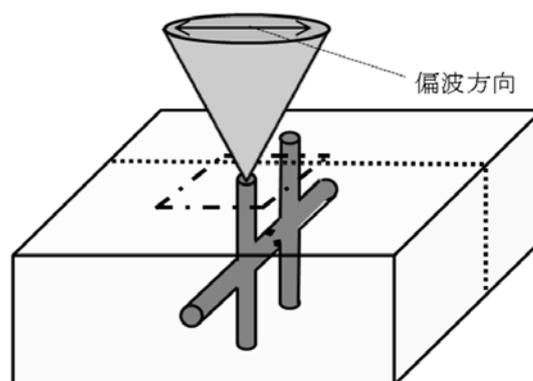


図②-(1)-1.46 レーザ照射後の断面観察像。(a)レーザパルスエネルギー50nJ、(b)90nJでレーザ照射

(1)-1-3-4 内部水平方向改質部へのエッチング効果

a. 実験方法

前節の結果を踏まえ合成石英基板内に3次元構造の形成を試みた。図②-(1)-1.47にレーザ加工方法を示す。まず基板内部に水平にレーザ照射を行い、次に垂直にレーザ照射を行った。エッチングにはウェットエッチングを用いた。エッチャントは基板表面から垂直にレーザ照射を行った領域から侵入し、水平孔をエッチングするようになっている。レーザの偏波はレーザ照射に対して垂直となっており、レーザ走査方向に対して水平に周期構造の溝が形成されるようにした。ウェットエッチングには0.5%フッ酸を常温で使用し、エッチング時間を32分とした。この際レーザ非照射部は1000Å程度エッチングされる。

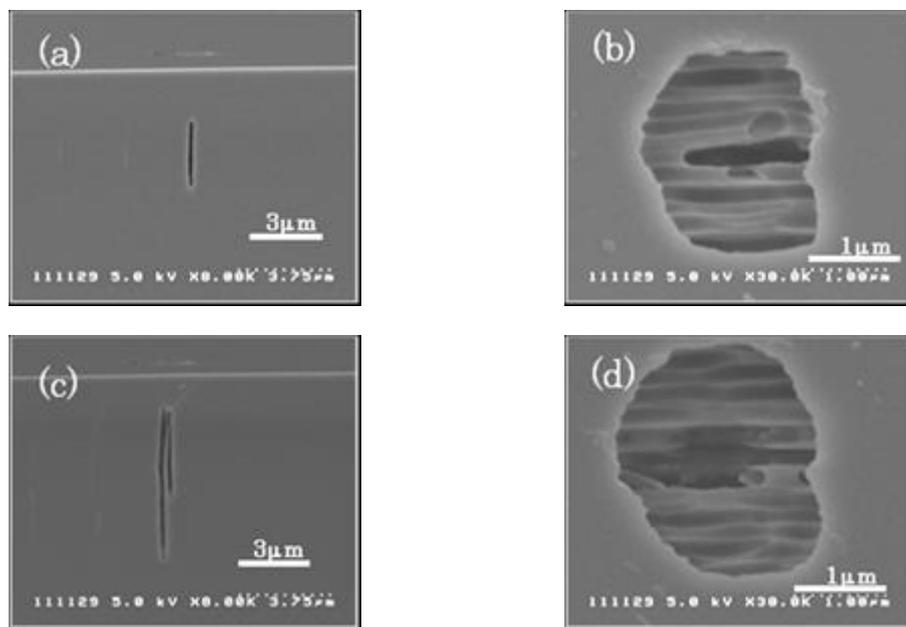


図②-(1)-1.47 3次元構造のレーザ照射方法を示す模式図

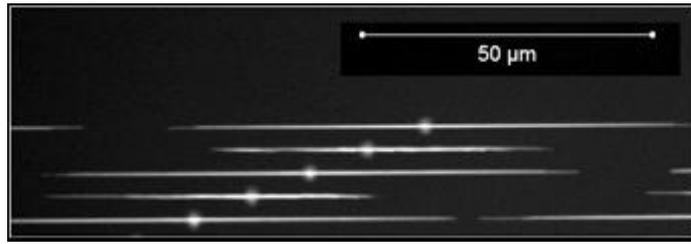
b. 実験結果

実験結果を図②-(1)-1.48 に示す。(a),(b)はパルスエネルギー60nJ、(c),(d)は90nJの結果であり、(a),(c)が基板の断面を、(b),(d)は基板表面から観察をおこなったものである(それぞれ図②-(1)-1.47 の点線、点実線に対応した箇所を観察)。(a)では垂直孔から7 μm 離れた領域の断面であり、(c)についても同等な箇所を観察している。パルスエネルギー60nJでは幅200nm、高さ $\sim 3\mu\text{m}$ の水平孔を基板表面からの深さ数ミクロンの領域に形成することに成功した(a)。また垂直方向からの観察では幅200nm \times $\sim 1.3\mu\text{m}$ の垂直孔が形成されている(b)。さらにパルスエネルギー90nJでは2本の孔が同時に形成されることが確認された(c),(d)。

次に水平方向のエッチングがどの程度進行しているかを調査した。図②-(1)-1.49 は孔内部に蛍光色素(FITC-dextran)を充填し、紫外光を照射させながら顕微鏡によって観察をおこなったものである。垂直孔は丸くデフォーカスになっている場所にあり、蛍光色素を垂直孔から差圧によって充填した。水平方向のエッチング量は最大で45 μm 程度であり、垂直方向のエッチング量10 μm 程度に対して、水平方向のエッチングの方が進行しやすいという結果が得られた。

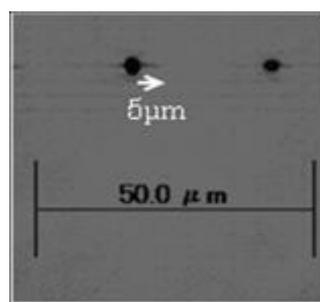


図②-(1)-1.48 3次元構造のSEM観察像。(a)(b)レーザーパルスエネルギー50nJ、(c)(d)90nJ、(a)(c)水平孔の断面、(b)(d)垂直孔の上面を観察。



図②-(1)-1.49 3次元構造の蛍光観察写真

更にドライエッチングによっても水平方向にエッチングが出来るかを調査した。レーザー照射はパルスエネルギー90nJで図②-(1)-1.47に示した方法を用い評価を実施した。またエッチングにはCCP-RIEを用い、このときの加工条件はプロセス圧力80Pa、エッチング時間10分である。結果を図②-(1)-1.50に示す。本結果については蛍光色素を充填せず明視野で顕微鏡観察を行った。ドライエッチングを用いることで横方向に5μm程度のエッチングがされることが確認された。図②-(1)-1.48の結果を踏まえるとエッチング形状は図②-(1)-1.48(c),(d)のように孔が2本並んで形成されていると考えられる。ウェットエッチングではパルスエネルギー60nJ以上で水平孔を形成することができたが、ドライエッチングを用いた場合にはパルスエネルギー60nJではレーザー照射部のエッチング選択性が確認されなかった。また、パルスエネルギー90nJではドライエッチングを用いるとウェットエッチングよりもエッチング選択性が小さく、エッチング選択性を大きくするためにはさらなる条件の最適化が必要になる。



図②-(1)-1.50 ドライエッチングによって形成された3次元構造の顕微鏡観察写真。

(1)-1-3-5 まとめ及び今後の予定

アブレーション閾値以下でフェムト秒レーザーパルスを表面近傍から深さ30μm以内の領域に照射することで、表面には周期構造を、内部にはナノオーダースケ

ールの任意の3次元構造を自己形成的に形成可能な改質層が得られた。

エッチングにドライエッチングを用いることで表面の周期構造の形状を容易に制御することが出来る。プロセス圧力が低いときには異方性のエッチングとなりハイアスペクトな周期構造が、プロセス圧力が高いときには等方性のエッチングとなり、レーザ照射領域全体が窪み底部に周期構造を配する形状が実現できる。また等方性エッチングでは内部の3次元的な改質層を選択的にエッチング出来ることを確認した。

エッチングとしてウェットエッチングを用いることでナノオーダーの開口幅を有する3次元構造を形成することが出来る。現状ではウェットエッチングで加工を行った方が、ドライエッチングで加工を行ったときよりも、選択的なエッチング加工が可能である。トレンチ構造では最小幅 66nm、深さ 5 μ m で、3次元構造では幅 200nm、高さ 3 μ m の横孔を形成できることを示した。

このように本技術を用いることで合成石英基板の内部にナノオーダーの開口幅を有する3次元構造形成の可能性を見出すことが出来た。今後はドライエッチングプロセスにおけるエッチング選択性の向上が課題となる。さらに来年度は他の材質への展開とデバイス化に向けた課題抽出を目指す。

(1)-1-4 有機半導体無損傷加工

中性粒子ビームを有機半導体に照射するための装置を導入した。有機半導体は大気中の酸素や水分によって劣化するものがあるが、成膜装置と中性粒子ビーム装置を接続した装置を用いることで大気暴露を避けることができるという利点がある。

(1)-1-4-1 装置の設計方針

前述の利点を最大限に生かすため、Life BEANS 九州、東北大と共同で装置の設計方針を考案した。中性粒子ビーム照射部分、有機半導体蒸着部分のほか、大気暴露なしに様々な実験操作を可能とするためのグローブボックスを接続した装置とした。3D BEANS では中性粒子ビーム照射部分（有機膜低損傷ドライエッチング設備）の導入を担当した。

有機膜低損傷ドライエッチング設備は、中性粒子ビーム源を備え、かつ、Life BEANS 九州が導入するグローブボックスに接続できる機能を有する必要がある。この両者を満たす装置を作製可能な業者は存在しないため、有機膜低損傷ドライエッチング設備を中性粒子ビーム源と真空チャンバーに大別し、それぞれを別の業者に発注することとした。

中性粒子ビーム源としては3D BEANS センター設置の開発中の大口径装置ではなく、東北大で開発され実績のある口径 10cm の装置を採用した。

真空チャンバーは、 10^{-5} Pa 台に到達可能なメインチャンバー、メインチャンバーを真空状態に保ったままサンプルを大気圧から導入するためのロードロックチャンバー、数十 sccm のプロセスガスを導入するための機構、基板冷却機構、別途用意するグローブボックスから大気を経ずにサンプルを導入する機構、などを備える装置である。とくに、グローブボックスのグローブ（手袋）越しに、すなわち、操作性が著しく制限された条件で操作する必要があり、容易に操作できる機構であることが重要である。

基板冷却機構としては、サンプルを設置するステージを -20°C にまで冷却し、さらにステージとサンプルの熱交換を容易とするためステージとサンプルの間のわずかな隙間にヘリウムガスを導入できる機構とした。

また、サンプル搬送・バルブ操作・ポンプ操作をできるかぎり手動とすることで、安価な装置を目指した。手動であってもバルブ操作ミス等による装置破壊を防ぐため、バルブ開閉許可ランプや誤操作警報ブザー等を導入し、安全性にも考

慮した。

真空ポンプとしては、1300 L/s の排気速度を持つターボ分子ポンプを用いた。導入ガスとしては窒素・酸素・アルゴンを導入可能とした。全ガスについて、100sccm までのガス導入を可能とした。将来の拡張用として、1 系統のガス導入ラインを追加できるためのスペースを確保した。

(1)-1-4-2 設置、検査

グローブボックス、真空チャンバー、中性粒子ビーム源、蒸着装置の設置および相互接続を行った。実験台や棚の移動も含め、レイアウトを決定した。

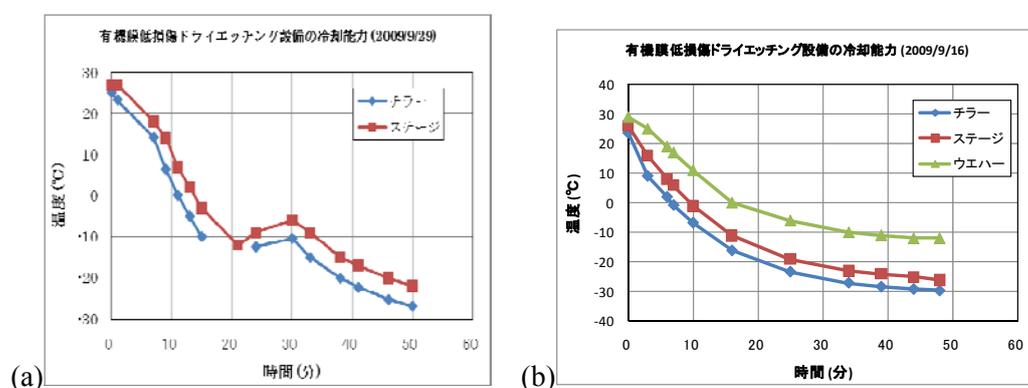
また、各種ユーティリティ接続を行った。「有機膜低損傷ドライエッチング設備（真空チャンバー）」に接続したユーティリティは、以下の通りである。電源（200V3φ、100V1φ）、圧縮空気、プロセスガス（酸素、窒素、アルゴン）、ヘリウムガス、冷却水、排気。冷却水供給のためには既存のヤマト科学製 CF1100 を使用した。なお、中性粒子ビーム源が必要とするユーティリティはすべて真空チャンバーから供給される。図②-(1)-1.51 に、設置が完了した装置全体の写真を示す。



図②-(1)-1.51 設置完了後の装置全体

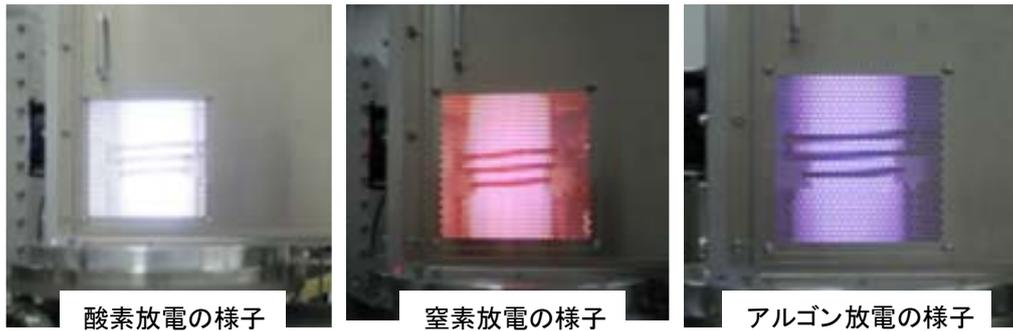
「有機膜低損傷ドライエッチング設備（真空チャンバー）」の検収のための基本的な検査として、以下の項目を行った。冷却水漏れチェック、He リークディテクターを用いた真空漏れチェック、到達真空度、チャンバー間サンプル搬送、サンプル～アパーチャ間距離設定、ステージ冷却、ガス導入、各種インターロック動

作。なお、ステージ冷却テストの結果を図②-(1)-1.52 に示す。途中、15分～30分の間、温度が上昇しているのは、冷媒不足によりエラーで停止し冷媒を追加したためである。冷媒不足となったのは冷媒をチラーに供給したのち初めての運転であったために配管が冷媒で満たされる必要があったためであり、以降の運転では同様のエラーは生じていない。冷却開始から1時間以内にステージ温度が -20°C 以下に到達していることが分かる。なお参考までに、出荷前立会検査においても同様の結果が得られていることを図②-(1)-1.52(b)に示す。このときは、サンプル（シリコンウエハー）に見立てたステンレス板（表面に熱電対をとりつけた）をステージに装着し、その温度も記録した。チラー温度 -30°C のとき、ウエハー表面温度は -10°C 以下であった。



図②-(1)-1.52 ステージ冷却テスト結果 (a)設置後テスト、(b)出荷前立会検査

「有機膜低損傷ドライエッチング設備（中性粒子ビーム源）」の検収のための基本的な検査として、以下の項目を行った。冷却水漏れチェック、真空漏れチェック、到達真空度、上下電極・アース間の絶縁テスト、放電テスト。図②-(1)-1.53 に、放電テスト時の中性粒子ビーム源の様子（筐体の外から石英チャンバー部分を観察した様子）を示す。

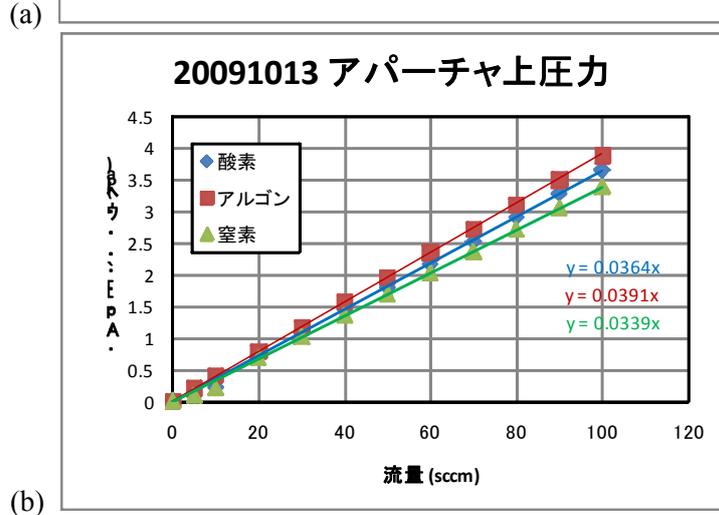
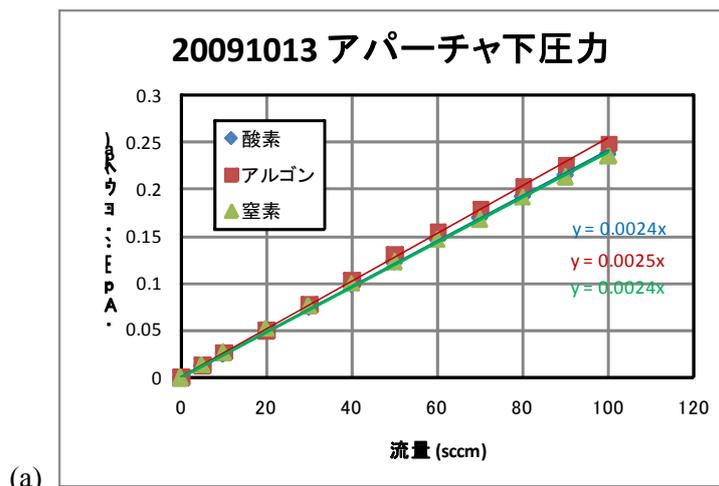


図②-(1)-1.53 放電テストの様子

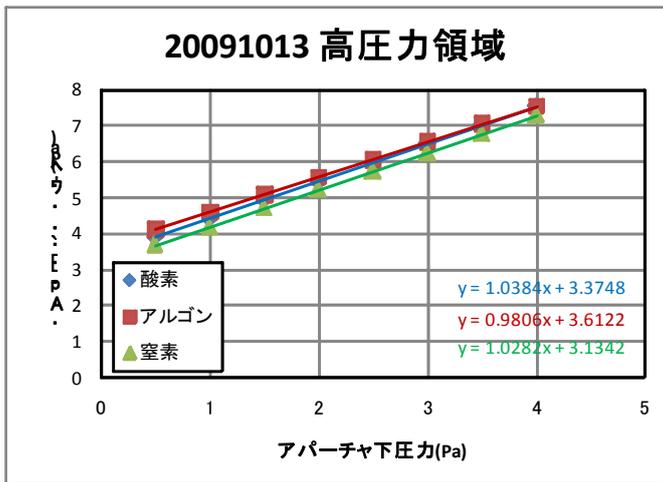
(1)-1-4-3 ガス導入時の圧力

次に、プロセスガスを流した状態でのチャンバー圧力を調べた。中性粒子ビーム源を構成するアパーチャはガスの流れに影響する（無視できないコンダクタンスを持つ）ため、中性粒子ビーム内部（アパーチャ上側）と真空チャンバー内部（アパーチャ下側）では圧力が異なる。

まず、ターボ分子ポンプの上流に設置されたメインバルブ（V1）を全開にした状態で、ガス流量を徐々に増やし、アパーチャ上下の圧力をガス流量に対してプロットしたのが図②-(1)-1.54 である。圧力が流量に比例して上昇していることが分かる。次に、ガス流量を最大（100sccm）とし、メインバルブを徐々に閉じていくことで、さらに圧力を上昇できる。図②-(1)-1.55 はその結果である。これらから、アパーチャ上圧力が 0.1Pa～7Pa 程度の領域をカバーできることが分かる。また、アパーチャのコンダクタンスを参考文献 4)の式を適用して計算し、アパーチャ下圧力とガス流量からアパーチャ上圧力を予測した場合、ガス流量 10sccm 以下と少なく測定誤差が大きいと考えられる場合を除き、ガスの種類に応じて誤差は5～9%以内であることが分かった。



図②-(1)-1.54 アパーチャ上下の圧力測定結果 (V1 全開時)



図②-(1)-1.55 アパーチャ上下の圧力測定結果 (V1 調節時)

(1)-1-4-4 プロセス条件

中性粒子ビームのエネルギーは、圧力に依存し、中性粒子ビーム源内部 (アパーチャ上) の圧力が 5mTorr, 7mTorr, 10mTorr, 17mTorr, 24mTorr, 32mTorr, 40mTorr の

ときにそれぞれ 12eV, 10eV, 7eV, 5eV, 3.5eV, 2.5eV, 1eV であるとされている。アパーチャのコンダクタンスと真空チャンバー（アパーチャ下）の圧力からアパーチャ上の圧力を推測した。その結果を表②-(1)-1.6 に示す。

表②-(1)-1.6 プロセス条件とビームエネルギーの関係

O2	バルブ	下圧力	上圧力	上圧力	排気能力	ビームエネルギー
sccm		Pa	Pa	mTorr	L/s	eV
23.5	全開	0.059	0.67	5	670	12
33	全開	0.08	0.93	7	670	10
40	全開	0.1	1.14	8.55	670	
46.9	全開	0.118	1.33	10	670	7
79.6	全開	0.2	2.27	17	670	5
100	全開	0.25	2.85	21.375	670	
100	調整	0.61	3.2	24	279	3.5
100	調整	1.66	4.27	32	101.5	2.5
100	調整	2.7	5.33	40	62.5	1

(1)-1-4-5 まとめ

以上のように、有機膜低損傷ドライエッチング装置の導入は無事終了し、有機半導体等の成膜・中性粒子ビーム照射・その他の実験操作が一貫して大気暴露なしにできる環境が整った。今後、Life BEANS 九州と共同で、この装置を用いて有機半導体等への中性粒子ビームの照射による表面改質・エッチング等の検討を行う。

(1)-2 超低損傷エッチングシミュレーションによる 3次元形状予測

(1)-2-1 無損傷エッチングシミュレーション

中性粒子ビームによるエッチング加工形状予測法を構築するために、平成 20 年度に実施した試解析と基本設計をもとに、中性粒子ビームを生成する中性化アパーチャ設計のための 2 つの手法によるシミュレーションと中性粒子ビームによるエッチング加工形状シミュレーションを実施した。

無損傷エッチングシミュレーションの全体像と 3 つのシミュレーションの位置付けを図②-(1)-2.1 に示す。各シミュレーションの概要は次の通りである。

(i)時間発展量子電子動力学(TD-DFT)法によるアパーチャ設計シミュレーション

イオン種、基板材料、エネルギーなど各種パラメータを変えた TD-DFT 解析を行い、イオンとアパーチャ壁面との相互作用による中性化メカニズムの解明とイオンの中性化率のエネルギー・材料依存性などの検討を行った。本シミュレーションの結果得られた、イオンのアパーチャ壁面との相互作用による中性化率を次の Monte Carlo 法によるイオン軌道計算に適用している。

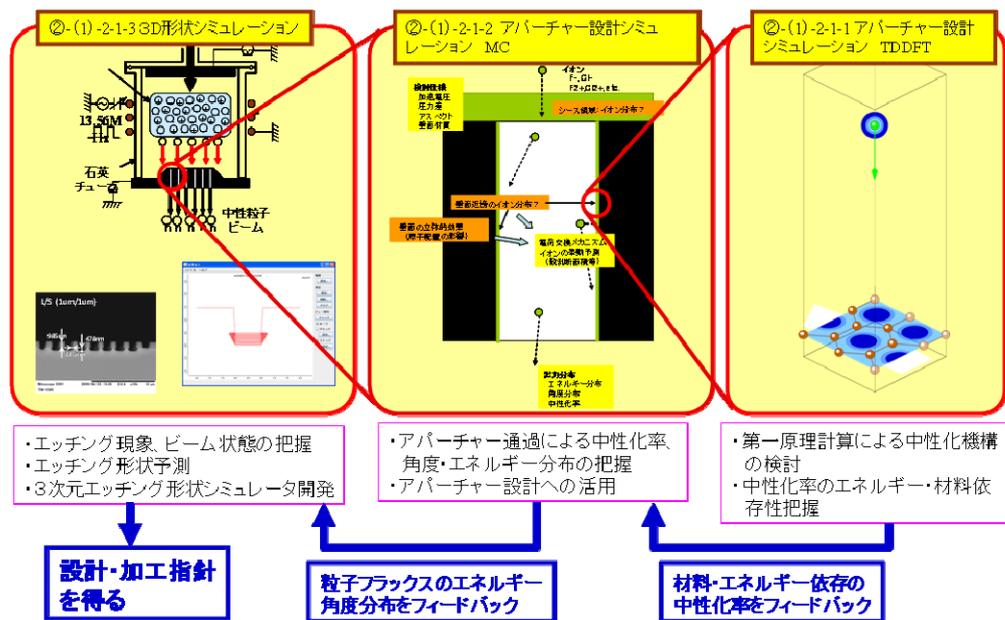
(ii)Monte Carlo (MC) 法によるアパーチャ設計シミュレーション

アパーチャ材料・構造の設計に資するべく、アパーチャ内のイオンの軌道、射出エネルギー・角度、中性化率などを古典的 MC 法計算により抽出し、実測データとの比較・評価を行った。本シミュレーションの結果得られた、イオン (=中性粒子ビーム) フラックスのエネルギー・角度分布を次の 3 次元形状シミュレーションの入力データとして利用することで、エッチング形状シミュレーションの予測精度を向上することが可能となった。

(iii)3 次元形状シミュレーション

実プロセス技術開発をサポートするべく、表面反応処理モジュールと 3 次元形状変化処理モジュールから構成される 3 次元形状シミュレータのプロトタイプ版を開発し、各種エッチング条件による形状予測計算・評価を行い、加工のための指針を与えた。また、3 次元形状変化処理モジュールにおいては、高精度化、高速化、対象材料の拡大などを見据えながら継続的なプログラム改良を実施した。

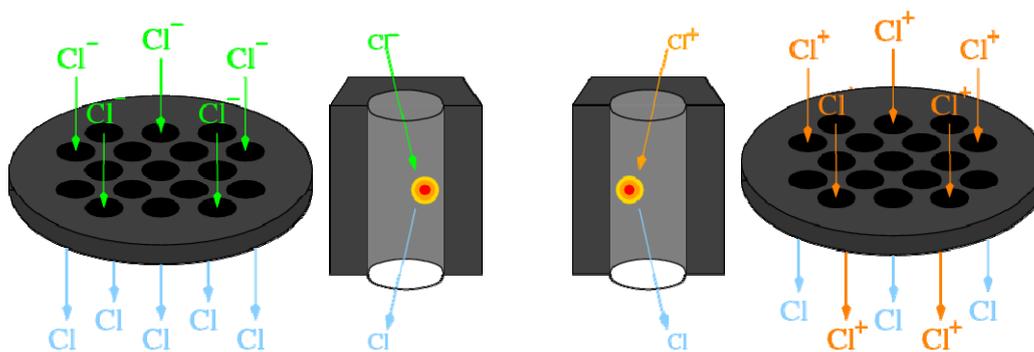
以降に各解析の詳細を述べる。



図②-(1)-2.1 無損傷エッチングシミュレーションの全体像

(1)-2-1-1 時間発展量子電子動力学 (TD-DFT) 法によるアパーチャ設計シミュレーション

アパーチャに塩素ガスの正負それぞれのイオンのビームを通過させる実験では、アパーチャを通過する負イオンのほぼ 100%が中性化され、正イオンの約 70%が中性化されることが測定されている。



図②-(1)-2.2 アパーチャを通過する正負イオンが中性化される模式図

負イオンがアパーチャの側壁に衝突する際には、その衝撃で電子がアパーチャに移り、正イオンが衝突する際には、そのクーロン力でアパーチャの電子がイオンに移ることが予想される。このように電子の移動のメカニズムがイオンの正負・元素やアパーチャ材質によって異なることが、中性粒子ビーム発生装置の効率に影響すると考えられる。

より高効率の中性粒子ビーム発生装置を実現するための最適なガス・アパーチャ材料を探索するためには、ガスのイオンがアパーチャに衝突する際の電子の移動という化学反応に似た量子力学的な現象を理論的に解析する必要がある。

そこで昨年度はイオンがアパーチャに衝突する過程での、量子力学的な電子状態の変化を数値解析する量子電子動力学シミュレータを開発した。このシミュレータでは電子状態の時間発展を第一原理的に記述する時間依存 Kohn-Sham 方程式を基にして各電子の波動関数の時間発展を計算し、それらの和から電子密度分布の時間変化を解析する。

昨年度はこのシミュレータによって衝突計算の試計算を多数実施し、イオンのアパーチャとの衝突過程での電子状態の変化の解析に必要な計算モデル、シミュレータの改良点、ノウハウなどの知見を蓄積した。そして今年度は本番計算に耐えうるシミュレータに改造し、本格的なシミュレーションを多数実施し、それらの解析結果から中性化率に関するいくつかの理論的知見を得た。

a. 量子電子動力学シミュレータによる時間依存Kohn-Sham方程式の数値計算

時間依存 Kohn-Sham 方程式は多電子系の電子状態の運動方程式であり、具体的には次式のように各電子の軌道波動関数の時間発展の方程式である。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi_n(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \sum_a V_{\text{ion}}^a(\mathbf{r}, t) + V_{\text{HXC}}[\rho(t)] \right] \phi_n(\mathbf{r}, t) \quad (\text{②-2})$$

ハミルトニアンはそれぞれ運動エネルギー、各原子・イオンのポテンシャル、電子間相互作用ポテンシャルを表している。今回の衝突過程ではイオンポテンシャルが移動し、波動関数の時間発展が引き起こされる。電子密度分布の時間変化で電子間相互作用ポテンシャルも時間変化する。数値計算の結果として最終的に得られる衝突後の電子密度分布からイオンの中性化率について解析する。

この計算の難点はこの衝突過程の経過時間が約 10femto 秒にも渡り、この時間は波動関数の時間発展の計算としては極めて長時間であることである。この方程式を高速・高精度・高安定に数値計算する量子電子動力学シミュレータを開発し、さらに本プロジェクト用にいくつかの改良を施し、衝突によるイオン中性化にも対応した。この量子電子動力学シミュレータの特徴は以下のとおりである。

ア. 時間発展演算子の指数積展開による近似展開

ハミルトニアン¹の指数演算子による複雑な時間発展演算子を複数の指数演算子の積に展開することで、各指数演算子による時間発展の演算式を単純化した。

イ. 各時間発展演算子の演算のノルム保存

各時間発展演算子による波動関数の演算を波動関数のノルムが厳密に保存される計算法で計算した。このため計算の安定性が保証した。

ウ. 各時間発展演算子の演算の高速化

各時間発展演算子による演算量を最小にする特殊なアルゴリズムを開発した。陽解法・陰解法の組み合わせ、実空間法・逆空間法の組み合わせで計算した。

エ. 周期境界条件

周期境界条件のある結晶・表面・鎖分子、周期境界条件のない分子に対応した。

オ. 基底状態計算

イオンが静止した基底状態での電子状態計算も計算可能とした。これを時間発展の初期状態として利用した。

b. イオンの中性化過程の計算モデル

今年度に改良した量子電子動力学シミュレーションを東北大学流体科学研究所のスーパーコンピュータ Altix に導入し、イオンのアパーチャ衝突過程での電子状態の時間発展を計算した。その計算内容の詳細は以下の通りである。

ア. イオンガスの成分

昨年度と異なり今年度は実際の実験で扱われる塩素ガスを計算した。

塩素ガスのうち以下の5種類の塩素原子・イオンの1原子・1分子についてそれぞれアパーチャと衝突過程を計算した。

- | | |
|-------------|------------------------------|
| ・ 塩素の負イオン | Cl ⁻ |
| ・ 塩素の中性原子 | Cl |
| ・ 塩素の正イオン | Cl ⁺ |
| ・ 塩素分子の中性分子 | Cl ₂ |
| ・ 塩素分子の正イオン | Cl ₂ ⁺ |

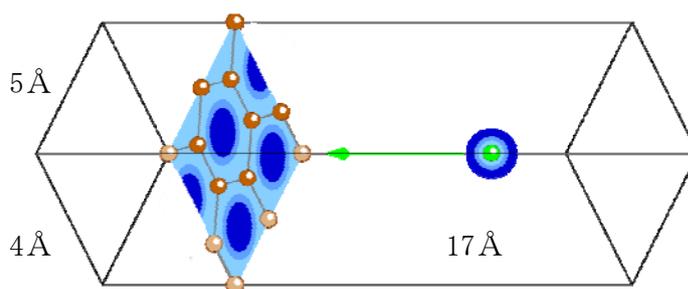
イ. アパーチャの成分

アパーチャは黒鉛製の円盤に細い穴を多数開けたもので、その穴の側壁の材

質はグラファイトである。側壁はガスに長時間触れているためガス分子が吸着している可能性もあるが、簡単のため単層グラファイトとして計算した。

ウ. 計算系の単位胞

計算系の単位胞の形状は図②-(1)-2.3 のとおり横長の直方体で、左側に単層グラファイトの炭素原子 8 個を配置し固定した。右側に各ガス分子イオンを配置し、左方向に移動させグラファイトに衝突させた。グラファイト面方向には周期境界条件を課し、垂直方向には閉鎖境界条件を課した。



図②-(1)-2.3 計算系の単位胞内のグラファイトとイオンの配置

エ. 計算の手順

上記の単位胞を $16 \times 16 \times 64$ の格子で分割し、グラファイト単独での炭素原子の価電子の電子状態の基底状態の波動関数を計算した。同じ単位胞で塩素原子・分子・イオンのそれぞれ単独での価電子の電子状態の基底状態の波動関数を計算した。

次にグラファイトとイオンを合わせて、イオンの価電子の波動関数と原子核座標に初期速度を与えて、グラファイトとイオンの双方の価電子の時間発展の計算を開始した。原子核はグラファイトと衝突し反射して元の位置にまで戻るように移動させ、その過程での価電子の波動関数の時間発展を計算した。

計算終了後の価電子の波動関数から価電子の電子密度の分布を計算し、イオンの周辺に分布する電子密度の総量をもってイオンの価電子数とした。なお、塩素原子・分子・イオンの通常の状態での価電子数とイオン価数は表②-(1)-2.1 のとおりである。

表②-(1)-2.1 塩素イオンの価電子数とイオン価数

原子種	Cl ⁻	Cl	Cl ⁺	Cl ₂	Cl ₂ ⁺
価電子数	8	7	6	14	13
イオン価数	1-	0	1+	0	1+

終状態での見積もられる価電子数は量子力学的な期待値であり整数ではなく、初期状態からの変化から中性化率を導くことができる。

オ. イオンの照射速度

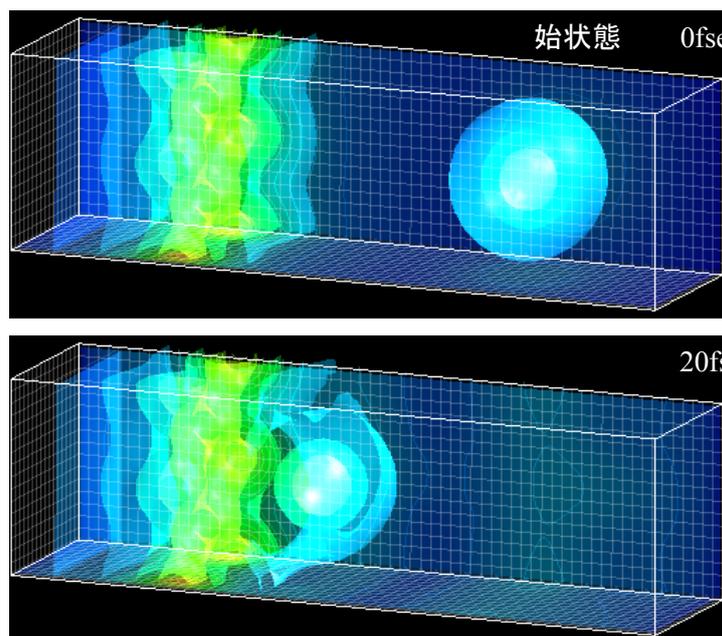
イオンをグラファイト面に垂直に照射する設定で計算した。その照射速度の運動エネルギーを 10eV から 2500eV までの範囲で複数計算した。

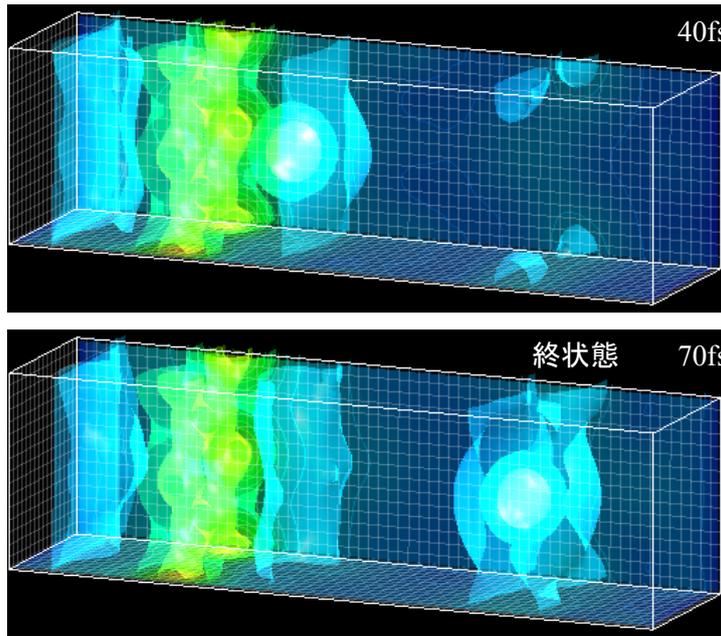
カ. イオンの照射角度

イオンをグラファイト面に斜めから照射する設定で計算した。その照射速度の運動エネルギーを 16eV または 100eV で固定して、照射方向をアパーチャ表面の鉛直軸からの角度で 0 度から 60 度までの範囲で複数計算した。

c. イオンの中性化過程の計算結果

Cl⁻イオンを 100eV の運動エネルギーでグラファイトに垂直照射し、その衝突過程の価電子密度分布の時間変化でのスナップショットを図②-(1)-2.4 に載せる。計算終了後にはイオンの周辺に電子が広がり、この分布を積算することでイオンの価電子が見積もられる。

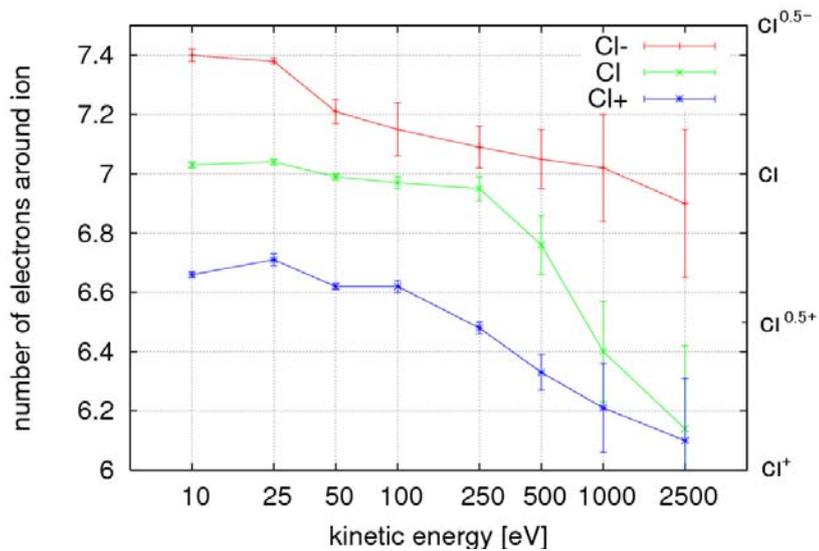




図②-(1)-2.4 グラファイトに Cl⁻イオンを垂直照射。
衝突過程での価電子密度分布の時間変化のスナップショット。

ア. 照射速度を変えての計算結果

Cl⁻, Cl, Cl⁺ の 3 種類のイオンをグラファイト面に垂直に照射し、照射速度を 10eV から 2500eV まで変えて計算した。終状態での価電子数を図②-(1)-2.5 に載せる。



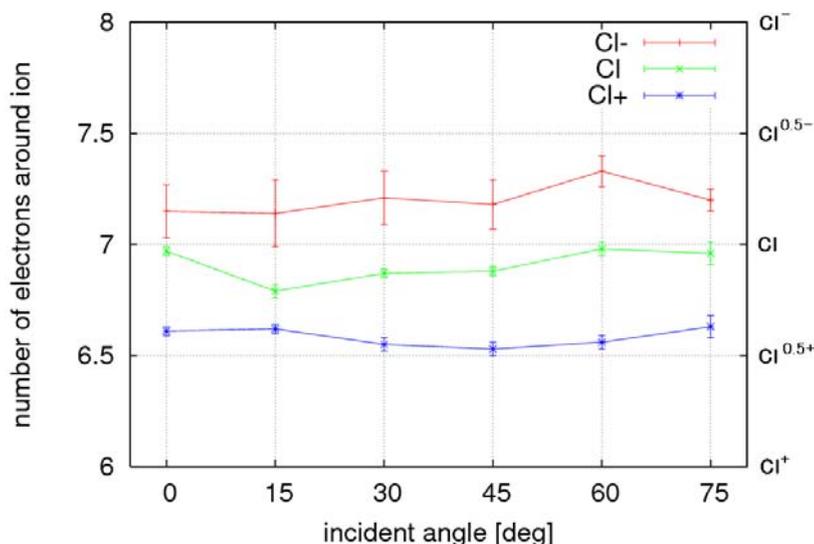
図②-(1)-2.5 各種イオンの終状態での価電子数の速度依存性

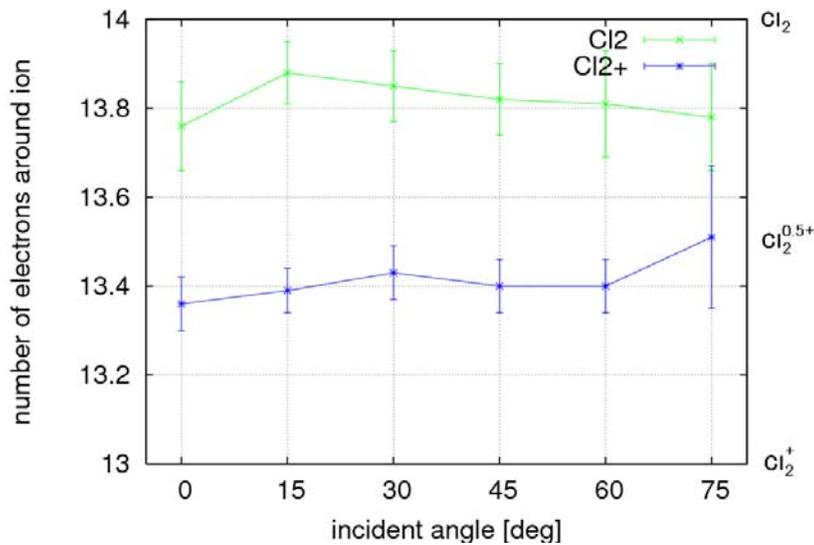
このグラフから以下の傾向を読み取れる。

- Cl⁻イオンは 10eV では価数は 0.40-で、60%の確率で電子を落とす。速度が上がるほど高い確率で電子を落とし、2500eV では正イオンも現れる。
- Cl 中性原子は 10eV では価数 0.03-で、97%が中性原子のままである。100eV 程度まではこの状態が続き、2500eV では電子を多く落とす。
- Cl⁺イオンは 10eV では価数 0.33+で 66%が電子を拾う。100eV 程度まではこの状態が続き、2500eV では電子を拾わない。
- 100eV を超える高エネルギーでの照射ではイオン種にかかわらず、衝突の衝撃で電子を落とす。中性化を超えて正イオンになることもある。
- 100eV 以内の運動エネルギーでの照射では負イオンは電子を落として中性化し、正イオンは電子を拾い中性化する。
- 100eV 以内の運動エネルギーでの照射では中性原子はあまり変化しない。
- 負イオンでは運動エネルギーが低いと衝突の衝撃が弱いいため電子を落とす確率が減り、中性化の確率が減る。
- 正イオンでは運動エネルギーが低くても電子を拾う確率がある程度残り、中性化の確率は変わらない。

イ. 照射角度を変えての計算結果(速度 100eV)

Cl⁻, Cl, Cl⁺, Cl₂, Cl₂⁺ の 5 種類のイオンをグラフィイト面の鉛直軸に対して斜めに照射し、照射速度を 100eV で、照射角度を 0 度から 60 度まで変えて計算を行った。終状態での価電子数を図②-(1)-2.6 に載せる。





図②-(1)-2.6 100eVでの各種イオンの終状態での価電子数の角度依存性

このグラフから以下の傾向を読み取れる。

- どのイオン種でも価電子数は角度にあまり依存しない。
- Cl⁻ の価数はおよそ 0.2- で 80% の中性化率。
- Cl₂⁺ の価数はおよそ 0.6+ で 40% の中性化率。

実際のアパーチャでは、グラファイト面が側壁面に平行に露出しているとは限らなく、さまざまな向きのドメインが側壁面に露出している。そのため、実際のイオンとグラファイトの衝突はさまざまな角度で衝突している。

先の計算結果での価電子数や中性化率が角度にあまり依存しないため、どの角度の衝突でも同様に中性化されることになり、中性化率の議論は先の複数の角度での計算結果の平均値で議論することができる。そのため以下の指針が得られる。

- 複数の照射角度での計算結果の平均値で中性化率を議論できる。

以上を総合して、各種イオンの中性化反応の確率方程式は表②-(1)-2.2 となる。

表②-(1)-2.2 100eV-Cl イオンの中性化反応確率

100eV	平均価電子数	平均価数	1回の衝突でのイオン状態の遷移確率
Cl ⁻	7.20	0.20-	Cl ⁻ → 80% Cl ⁻ + 20% Cl ⁰
Cl	6.90	0.10+	Cl → 90% Cl + 10% Cl ⁺
Cl ⁺	6.58	0.42+	Cl ⁺ → 58% Cl + 42% Cl ⁺
Cl ₂	13.82	0.18+	Cl ₂ → 82% Cl ₂ + 18% Cl ₂ ⁺
Cl ₂ ⁺	13.40	0.60+	Cl ₂ ⁺ → 40% Cl ₂ + 60% Cl ₂ ⁺

表②-(1)-2.2 表から上記の各種イオンが混在するガスのグラファイトとの1回の衝突での遷移確率行列は次式のとおりとなる。

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(1)} = \begin{pmatrix} 0.20 & 0.00 & 0.00 \\ 0.80 & 0.90 & 0.58 \\ 0.00 & 0.10 & 0.42 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(1)} = \begin{pmatrix} 0.82 & 0.40 \\ 0.18 & 0.60 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

(②-3)

イオンはアパーチャを通過する際に2,3回側壁に衝突することもある。複数回の衝突での遷移確率行列は1回の確率遷移行列の積で次式のとおりに求まる。

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} 0.04 & 0.0 & 0.0 \\ 0.88 & 0.87 & 0.77 \\ 0.08 & 0.13 & 0.23 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} 0.74 & 0.57 \\ 0.26 & 0.43 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

(②-4)

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(3)} = \begin{pmatrix} 0.01 & 0.00 & 0.00 \\ 0.87 & 0.86 & 0.82 \\ 0.12 & 0.14 & 0.18 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(3)} = \begin{pmatrix} 0.71 & 0.64 \\ 0.29 & 0.36 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

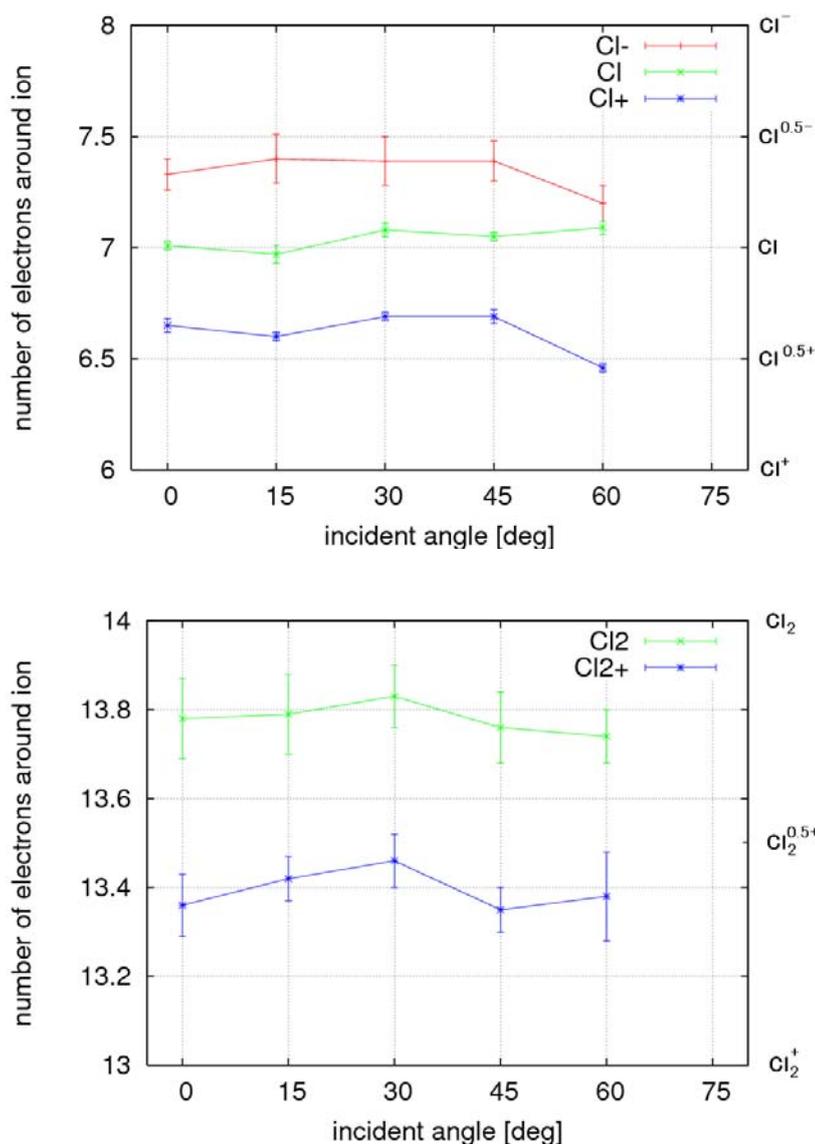
(②-5)

イオンがアパーチャ通過中に衝突が1~3回起こるとして正負イオンの中性化率は以下のように見積もられる。

- Cl⁻ イオンの100eVでの中性化率 80% ~ 88%
- Cl₂⁺ イオンの100eVでの中性化率 40% ~ 64%

ウ. 照射角度を変えての計算結果(速度 16eV)

Cl⁻, Cl, Cl⁺, Cl₂, Cl₂⁺ の5種類のイオンをグラファイト面の鉛直軸に対して斜めに照射し、照射速度を16eVで、照射角度を0度から60度まで変えて計算した。終状態での価電子数を図②-(1)-2.7に載せる。



図②-(1)-2.7 16eVでの各種イオンの終状態での価電子数の角度依存性

16eVの運動エネルギーでの確率方程式は表②-(1)-2.3のとおり得られた。

表②-(1)-2.3 16eV-Clイオンの中性化反応確率

100eV	平均価電子数	平均価数	1回の衝突でのイオン状態の遷移確率
Cl ⁻	7.34	0.34 ⁻	Cl ⁻ → 66% Cl + 34% Cl ⁻
Cl	7.04	0.04 ⁻	Cl → 96% Cl + 4% Cl ⁻
Cl ⁺	6.62	0.38 ⁺	Cl ⁺ → 62% Cl + 38% Cl ⁺
Cl ₂	13.78	0.22 ⁺	Cl ₂ → 78% Cl ₂ + 22% Cl ₂ ⁺
Cl ₂ ⁺	13.39	0.61 ⁺	Cl ₂ ⁺ → 39% Cl ₂ + 61% Cl ₂ ⁺

1回の衝突での遷移確率行列は次式のとおりとなる。

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(1)} = \begin{pmatrix} 0.34 & 0.04 & 0.00 \\ 0.66 & 0.96 & 0.62 \\ 0.00 & 0.00 & 0.38 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(1)} = \begin{pmatrix} 0.78 & 0.39 \\ 0.22 & 0.61 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

(2-6)

複数回の衝突での遷移確率行列は次式のとおりとなる。

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} 0.14 & 0.05 & 0.03 \\ 0.86 & 0.95 & 0.83 \\ 0.00 & 0.00 & 0.14 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(2)} = \begin{pmatrix} 0.69 & 0.54 \\ 0.31 & 0.46 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

(2-7)

$$\begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(3)} = \begin{pmatrix} 0.08 & 0.06 & 0.04 \\ 0.92 & 0.94 & 0.90 \\ 0.00 & 0.00 & 0.06 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl^-} \\ P_{Cl} \\ P_{Cl^+} \end{pmatrix}_{(0)} \quad \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(3)} = \begin{pmatrix} 0.66 & 0.60 \\ 0.34 & 0.40 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{Cl_2} \\ P_{Cl_2^+} \end{pmatrix}_{(0)}$$

(2-8)

イオンがアパーチャ通過中に衝突が 1~3 回起こるとして正負イオンの中性化率は以下のように見積もられる。

- Cl⁻ イオンの 16eV での中性化率 66% ~ 92%
- Cl₂⁺ イオンの 16eV での中性化率 39% ~ 60%

100eV の場合と比べて 16eV での Cl⁻ の中性化率の上限値が上がっている。この現象は Cl 中性原子が 100eV では電子を落として Cl⁺ となるが 16eV では落とさなくなり、Cl⁻ から Cl に遷移した中性原子が次の衝突でも中性化された状態に留まるため、効率よく中性原子が増えるためである。一方、下限値は下がり、これは衝突の衝撃が弱くなることで電子が落ちにくくなるためである。

他方 Cl₂⁺ の中性化率の範囲は 100eV と比べて 16eV ではあまり変わらない。

d. まとめ

時間依存 Kohn-Sham 方程式に基づいた第一原理量子電子動力学シミュレータの開発・改良によって、イオンがアパーチャ側壁のグラフィイトと衝突し、電子を交換する微視的な動的過程を数値シミュレーションで解析する技術を確立した。

塩素イオンについていくつかの本番計算を行い、塩素の負イオンが衝突の衝撃で電子を落として中性化される結果、塩素の正イオンがクーロン力で電子を拾う結果を得た。これらの結果が実験での実測値と傾向が一致することを確認

した。

来年度はこの計算技術を応用して、他のガス材料、他のアパーチャ材料での中性化率を予測計算し、実験と共同して、より高効率の中性粒子ビーム発生装置の実現を目指す。

(1)-2-1-2 Monte Carlo (MC) 法によるアパーチャ設計シミュレーション

本テーマに関して、昨年度までに既存の Monte Carlo 法 (MC 法) による 2 次元の粒子軌道計算プログラムを用いた予備計算を行い、アパーチャ仕様決定のための課題抽出と要件定義を行ってきた。今年度はその成果を踏まえ、主要な要件定義を個別に検討した上で、アパーチャ構造最適化に必要なシミュレータ上の機能開発を実施した。また実測結果と比較することで開発した機能の有効性を実証した。

a. 開発項目の検討

以下に、今年度検討および開発を実施した項目を列挙する。

ア. 中性化メカニズムのモデル化

イオンの中性化モデルとして、アパーチャ側壁における Auger 過程を模擬したモデル (アパーチャ材質、イオンエネルギー、側壁への入射角度を考慮) の組み込みを行った。このモデルによれば一回の側壁との衝突による中性化率 P は以下の式で与えられる。

$$P(v_n) = \exp[-(A/a)(1/v_n)] \quad (\text{②-9})$$

ここで v_n は側壁に対して垂直な方向の速度成分を表し、 A/a は側壁材料と衝突イオン種によって決定されるパラメータである。このモデルによれば、中性化率は側壁に衝突する際のイオンの入射角度に大きく依存する。

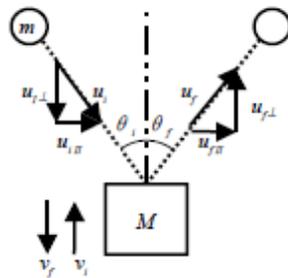
一方で上記のモデルと平行して、TD-DFT 計算の計算結果をベースにしたモデル化を検討した。TD-DFT 計算によれば、中性化率は側壁に対するイオンの入射角度にほとんど依存性を示さないという結果が得られている。

TD-DFT 計算手法及び条件設定は、アパーチャ側壁 (グラファイト) との衝突を想定した第一原理的なものである。TD-DFT 計算の結果は、材料依存パラメータを持つ現象論的な立場からの Auger モデルよりも適切であると考えられる。本解析では TD-DFT 計算結果をベースにしたモデルを最終的に採用した。現在までに行われている TD-DFT 計算では側壁がグラファイトである場合のみであるが、側壁材料の種類を変更した TD-DFT 計算の結果を用いることによ

り、アパーチャの材料が変更された場合の解析にも対応可能である。

イ. イオンとアパーチャ側壁との相互作用

アパーチャ通過時のイオンの中性化は、アパーチャ側壁と衝突して側壁との間の電荷移行を経て生じる。その衝突過程は一般に非弾性散乱であるため、アパーチャ通過後のエネルギー分布、角度分布に大きく影響を及ぼす。本解析ではイオンの側壁衝突を表現するために、以下に示す HardCube 散乱モデルの組み込みを行った。このモデルによれば、アパーチャ側壁を壁面に垂直な方向のみに自由度を持つ有効質量 M の仮想粒子と考え、イオンと側壁との衝突を 1 次元的な 2 体衝突問題として扱う。図②-(1)-2.8 にモデルの概念図を示す。



図②-(1)-2.8 Hard Cube 散乱モデル概念図

衝突前の側壁を模した仮想粒子の速度分布は、ボルツマン分布に従う。

$$G(v_i)dv_i \propto \exp[-Mv_i^2/2k_B T_s]dv_i \quad (2-10)$$

ここで T_s は側壁温度を表す。散乱後のイオンの状態は上記の仮想粒子と衝突した際の運動量保存、エネルギー保存から算出される。

材料特性は側壁を模した粒子の有効質量 M という形で考慮される。グラファイト及びシリコンが側壁である場合の有効質量の値と参考文献を以下に挙げる。

グラファイト $M=310u$ ⁵⁾

シリコン $M=200u$ ⁶⁾

ここで u は原子質量単位である。

ウ. ガス中のイオン-イオン（原子分子）、イオン-電子の相互作用

チャンバー中の圧力はアパーチャの上側で 1 [Pa]程度、アパーチャの下側では 0.1[Pa]程度である。平均自由行程と圧力はおよそ λ (cm) = 0.68/ p (Pa) に関係付けられる。アパーチャ内部ではアパーチャ上下圧力値の間にあると考えら

れ、その場合の粒子の平均自由行程は～1 [cm]程度となり、アパーチャの長さと同程度となる。したがって、イオンがアパーチャ通過中に平均で約1回程度他のイオンや電子と散乱することになり、イオンがアパーチャ通過中にこれらの粒子と散乱し中性化する確率は無視できない。一方で実測されたアパーチャ出口でのイオンの角度分布は、側壁衝突によってビームの広がりが抑えられていることを示しており、側壁衝突がイオンに影響を及ぼしていることを示している。ここではイオンのアパーチャ側壁での衝突が中性化率、アパーチャ通過後のエネルギー・角度分布に影響を及ぼす主要因であると考え、イオンや電子との散乱は無視するものとする。

エ. シース領域の電位分布

実験ではプラズマ密度から、大よそ50～400 [μm]程度のシース領域ができていると考えられる。口径が1 [mm]のアパーチャではそのサイズが電場の空間変化を特徴付けるシース長に比べ十分に大きいため、アパーチャ入口付近での電位の変化は大きいと考えられる。この電位の変化は入射してくるイオンの軌道を大きく変化させると予想され、その結果としてイオンの中性化やエネルギー・角度分布にも大きく影響すると予想される。

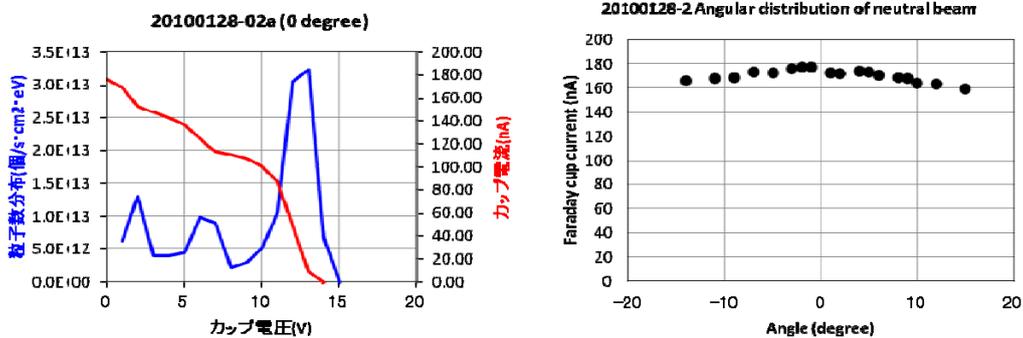
ここではバルクプラズマの解析は行わずに、シース長及びシース領域境界における電位を入力として与えることで電位分布を計算する機能を開発する。電位分布のイオンに及ぼす影響は電場中を運動するイオンの軌跡を解析することで解明する。

b. 解析条件

主な解析条件を表②-(1)-2.4に示す。またアパーチャ入口における実測データを図②-(1)-2.9に示す。なおここではシースによって形成された電場の影響は考慮しない。というのも実測で得られた入射粒子の角度分布にはシースの作る電場の影響も含まれている。そのため実測データに合わせ込んだ時点でシースの影響は実効的に考慮されていることになる。

表②-(1)-2.4 主な解析条件

項目	設定条件
入射粒子	Cl ⁻
粒子数	1,000,000
中性化確率 (TD-DFT)	66% (1回の側壁衝突)
基板形状	開口部のアスペクト比を以下に設定 10 (口径: 1[mm]、長さ: 10[mm]) 30 (口径: 1[mm]、長さ: 30[mm])
イオンのエネルギー	実験データより合わせ込み 平均: 12[eV]、半値幅: ±3[eV]
入射粒子の角度分布	実験データより合わせ込み ほぼ等方的な分布 (-60° ~ 60° を一様に分布させる。)



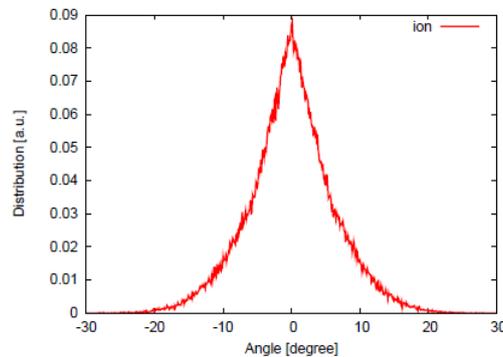
図②-(1)-2.9 アパーチャー入口のエネルギー (左)・角度 (右) 分布 (実測データ)

c. アパーチャ出口における解析結果

上記の解析条件を用いて算出した結果を以下に示す。以下ではアパーチャ出口におけるイオンの分布を元に議論を展開する。これは得られている実測データがイオン分布に関するものであるため、シミュレーション結果の直接的な検証を行えるためである。また、過去の研究⁷⁾により中性粒子ビームと残留イオンのエネルギー分布はほぼ等しいという結果が得られている。

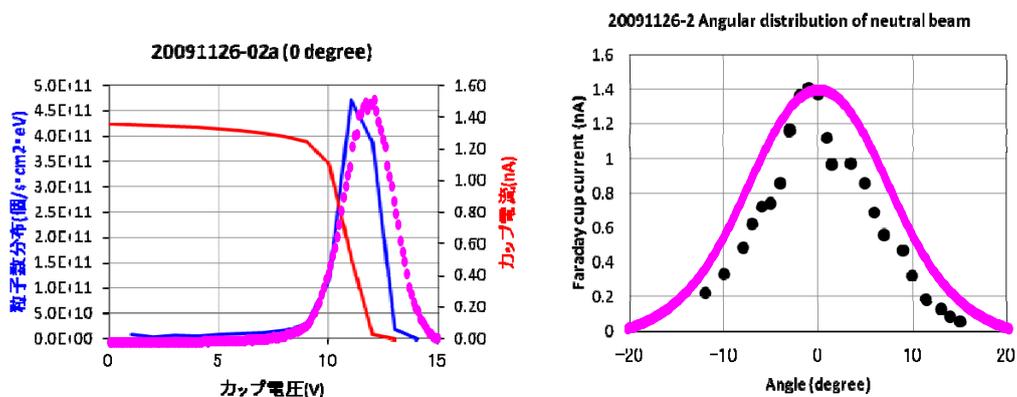
ア. アスペクト比 10 構造の場合

アパーチャ出口におけるイオンの角度分布を以下に示す。



図②-(1)-2.10 アパーチャ出口におけるイオンの角度分布

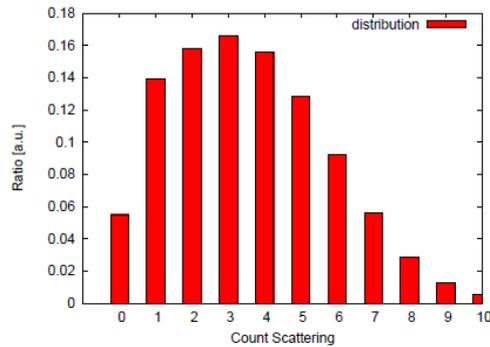
上記のグラフから半値半幅が約 5° であることが分かるが、これはアスペクト比が 10 の場合に一度も散乱せずにアパーチャを通過する粒子の最大角度が $\tan(1/10) \approx 5.7^\circ$ であることを考慮すれば、妥当な結果であると言える。というのも上記の数値以上の角度を持って入射した粒子は側壁と衝突し中性化する確率が高くなるため、アパーチャ出口でイオンとして検出される可能性は小さくなる。実験ではファラデーカップを用いてイオンを検出するため、角度分布を比較する際にはカップの形状依存性を考慮したコンボリューション処理を行う必要がある。図②-(1)-2.11 にシミュレーションによるエネルギー分布と角度分布（コンボリューション処理）の実測データとの比較を示す。ピンクの丸プロットがシミュレーション結果を示し、それ以外は実測値のプロットである。縦軸のスケールに関してはピーク高さを一致させるようにプロットした。今回得られた解析結果は実測値と大よそ定量的に一致していることが分かる。



図②-(1)-2.11 アパーチャ出口におけるイオンの角度分布（コンボリューション）

エネルギー分布に関してはアパーチャ入口での分布とほぼ同等の分布となっているが、実験結果でも同様の傾向が見られている。

以下に粒子がアパーチャを通過する間の側壁衝突回数のヒストグラムを示す。

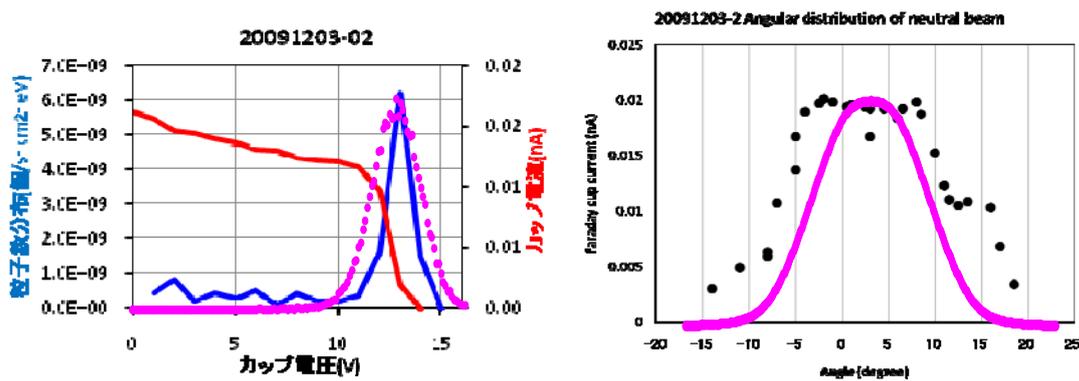


図②-(1)-2.12 アパーチャー通過中に側壁と衝突する回数分布

1回の側壁衝突によりイオンが中性化する確率は約66%であるが、複数回衝突した際の中性化率は側壁衝突という事象が独立であるため、単純な掛け算により求めることができる。すなわち2回衝突では約88%、3回衝突では約96%となる。上記のヒストグラムにおける各衝突回数の確率を積算すると87%となる。実測では90%以上の中性化率が得られているが、それに近い数値が得られたことになる。

イ. アスペクト比 30 構造の場合

同様にしてアスペクト比が30の場合の結果を以下に示す。図②-(1)-2.13では、アパーチャ出口におけるエネルギー・角度分布を実測値と比較した。縦軸のスケールに関してはピーク高さを一致させるようにプロットした。また角度分布に関して、横軸のピーク中心を一致させるようにプロットしている。実測結果とシミュレーション結果とは大よそ一致している。



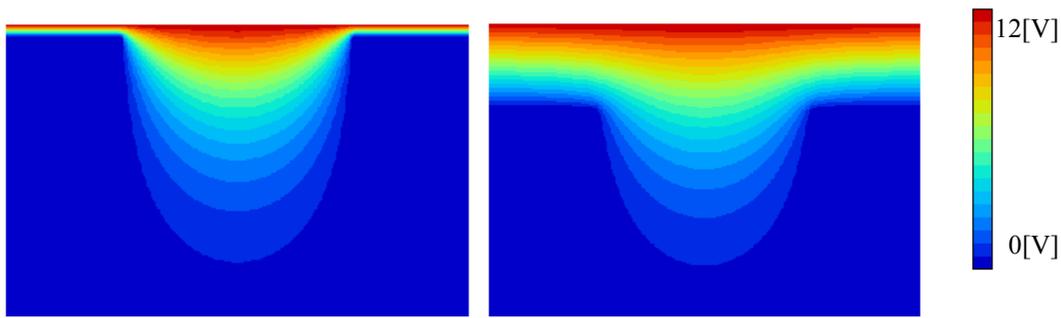
図②-(1)-2.13 アパーチャ出口におけるイオンのエネルギー分布 (左)・角度分布 (コンボリューション) (右)

この場合の中性化率は 95%となった。アパーチャが長くなった分、アパーチャを通過するまでに側壁と衝突する確率が増えたため、中性化率も大きくなったと考えられる。

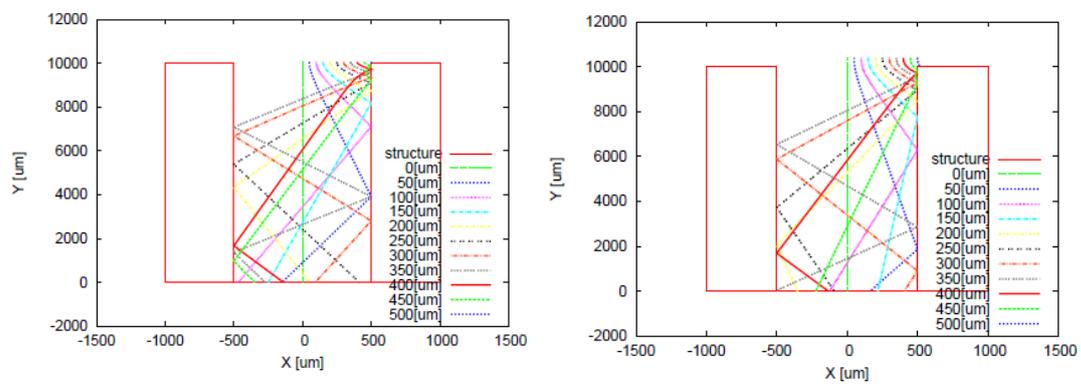
d. シースを考慮した解析結果

前節では実測データに合わせ込んだ入射粒子の分布を用いてシミュレーションを行ったが、アパーチャ形状の最適化を検討する際に、各アパーチャ形状に対する入射粒子分布を実測することは非現実的である。したがってアパーチャ構造の最適化のためのシミュレーションを行う場合、入射粒子分布の実測値が与えられていない条件設定の基で、アパーチャ出口におけるエネルギー分布、角度分布、中性化率を予想できることが不可欠となる。本節では、シースによって作られる電場を計算し、入射粒子分布が得られない状況での解析を検討する。

今回対象としている実験では、そのプラズマ密度からシース長は 50～400[μm]であることが想定される。最初に、シースが作り出す電場により粒子軌道に及ぼす影響を解析する。粒子をシースの上端でアパーチャ中央から 50[μm]間隔で配置し、その後の粒子の軌跡を追跡した。シース上端の電位は 12[V]とし、アパーチャ表面での電位は 0[V]とする。これは入射粒子のエネルギー分布の実測値によりその平均値が 12[eV]であったので、相当する電位差が同程度であることから導かれる。図②-(1)-2.14、15 にシース長が 50[μm]と 400[μm]の場合の電位分布と粒子軌道を示す。



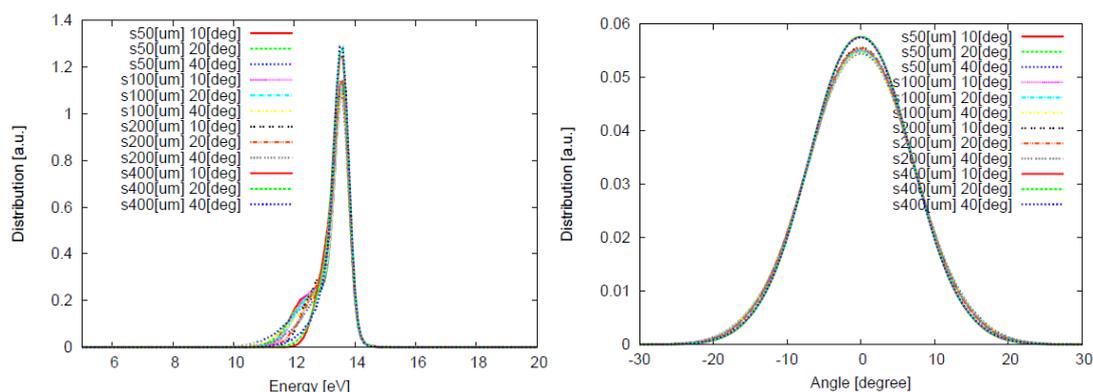
図②-(1)-2.14 電位分布：シース長が 50[μm] (左)、400[μm] (右) の場合



図②-(1)-2.15 粒子軌道：シース長が 50[μm] (左)、400[μm] (右) の場合

アパーチャに対して各粒子は垂直に入射しているが、アパーチャの中心から外れた位置に入射すると、電場の影響で軌道が大きく曲がること分かる。

次に上記で計算したシース電場中に粒子が入射してきた場合のアパーチャ出口での分布について検討する。シース長は想定される範囲が 50[μm]～400[μm]であるので、50,100,200,400[μm]の4通りを検討する。角度分布についてはシースの影響がない状態で入射した場合の分布が必要となるが、実測値としては得られていない。そのため平均値 0[$^\circ$]、半値幅 10,20,40[$^\circ$]の場合の3通りを検討する。したがって、行すべき計算条件は合わせて12通り存在する。図②-(1)-2.16にアパーチャ出口におけるイオンのエネルギー、角度分布の解析結果を示す。角度分布についてはファラデーカップ形状を考慮してコンボリューション処理を行ったものである。



図②-(1)-2.16 シースを考慮した場合のエネルギー分布（左）、角度分布（右）

エネルギー分布についてはピーク位置はいずれの場合も同じである。側壁衝突によってエネルギーを失った粒子についてはピーク右側のテイル部分の分布にその特徴が現れるが、この部分が条件によって若干の差異を持つ。角度分布についてはいずれの場合も同様の分布を持つ。上記の各場合の中性化率及び平均側壁衝突を以下の表にまとめる。

表②-(1)-2.5 アパーチャ通過による中性化率（左）、平均側壁衝突回数（右）

エラー! 編集集中のフィールド コードからは、オブジェクトを作成できません。 エラー! 編集集中のフィールド コードからは、オブジェクトを作成できません。

シース電場を考慮しない場合に比べ、中性化率及び平均衝突回数に関して入射角度分布による依存性は小さいことが分かる。これはシースによって形成される電場の影響で粒子軌道が大きく曲げられるため、シース領域に入射する前の分布に対する依存性は小さくなるためである。シース長が短い方が側壁衝突の影響が大きくなり、中性化率が大きくなっている。シース長により電場の空間的に変化する長さのスケールが決まるが、アパーチャの口径に対する相対的なスケールが小さい程、アパーチャ内での電場の変化が大きくなり、粒子の軌道がより大きく曲げられるためであると考えられる。

今回の解析においては中性化率は最大で 80%程度であり、実測されている中性化率 90%以上という数値とは差がある。シースによって形成された電場は静電場であるとしたが、実験では電場の向きを時間的に反転させており、形成されるシースやその電場も非定常的なものであると考えられる。より実測データに近いシミュレーションを行うためには、シース領域の計算に関して上記の非

定常的な効果を考慮する必要がある。

e. まとめ

粒子軌道計算プログラムに対して、①材料特性を考慮できる側壁衝突モデル、②中性化率計算機能、③シース電場計算機能の開発を行い、イオンのアパーチャ通過によるエネルギー、角度分布計算、中性化率計算を行うシミュレーションを実現した。中性化率計算機能において、一回の側壁衝突による中性化率にTD-DFTの計算結果を用いた。

今回開発したシミュレータを用い、現在までに得られている実測データと同じ条件で解析を行い、その実用性を検証した。入射粒子のエネルギー、角度分布を入力値として実測データから合わせ込んだ値を用いた結果、アパーチャ出口でのエネルギー、角度分布、中性化率として実測データと定量的に同等な値を得ることができた。

アパーチャ構造の最適化を進める上では、入射する粒子の分布を仮定しない計算が必要となってくる。今回シース電場を計算することにより、アパーチャに入射する粒子の分布を直接用いない計算を試みた。中性化率に関しては約80%となっており、実測の90%以上との乖離を埋めるため、今後より精度の高い解析が必要である。

(1)-2-1-3 3次元形状シミュレーション

平成20年度に作成した基本設計をもとに、表面反応処理モジュールとして2次元プラズマエッチングシミュレータ FabMeister-PE を、形状変化処理モジュールとして3次元形状シミュレータ ParadiseWorld-II をベースに3次元エッチング形状シミュレータのプロトタイプ版を開発した。

また、実プロセス開発者との打合せに基づき、開発したプロトタイプ版を利用して形状シミュレーションを行い、各種エッチング条件による形状予測・評価計算を行った。更に、シミュレーション結果に基づき、高精度化、高速化、対象材料の拡大のために必要なプログラム改良を継続的に行った。

以下に、今年度の成果を報告する。

a. 実加工データによる表面反応モデルのキャリブレーション

東北大学所有の中性粒子ビームエッチング装置による実加工データをもとに試計算を行い、エッチング表面反応モデルの検討と各反応パラメータのキャ

リブレーションを実施した。試計算の対象とした実加工データは、Case-1 : F2 ガス、Case-2-1 : Cl2 ガス（高流量、短時間条件）、Case-2-2 : Cl2 ガス（低流量、長時間条件）の3条件である。

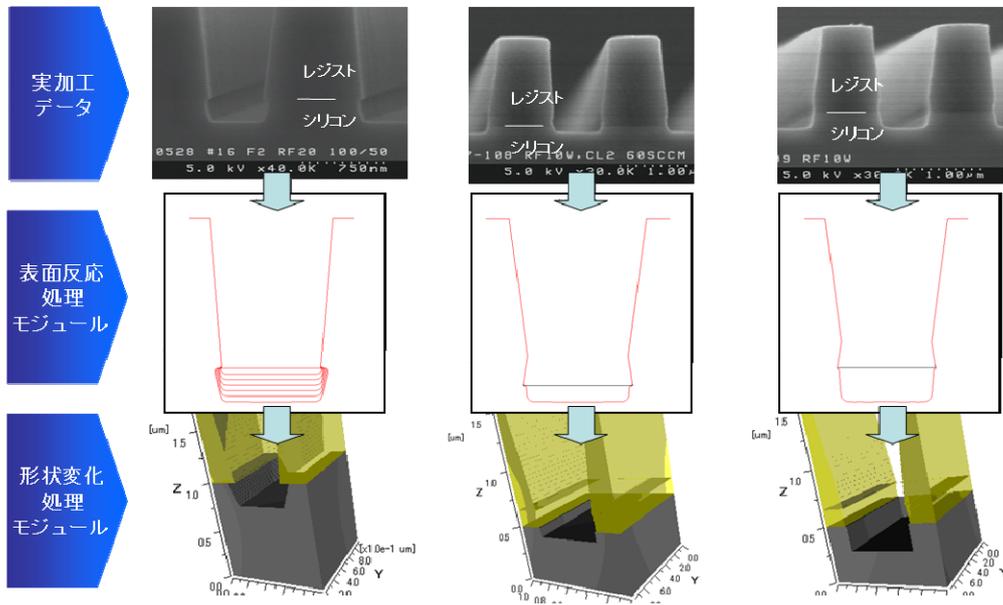
実際に基板表面で起きている反応は、ガス種によって異なり複雑な表面反応モデルを考慮する必要があるが、未解明な反応も多いため、第一段階として、表面反応モジュールによる加工形状の再現可能性を示すことを目的として、表面反応モデルを以下の簡易的なものに限定した。

- 入射フラックスはエネルギー依存性を持たず、入射角度として±4度の半値幅をもつ Gauss 分布を持つものとする
- エッチングへの寄与比率（等方性：異方性）はサイドエッチング量を等方性、垂直エッチング量からサイドエッチング量を差し引いたものを異方性、として評価する

上記の仮定のもとで、考慮した表面反応は、ガス種に依らず、ラジカルの吸着過程、熱励起によるエッチング、中性粒子によるエッチング（イオンアシスト反応に相当する）、の3つの反応過程であり、Case-1 と Case-2-1 の2つの条件の実加工形状に対して表面反応モデルパラメータのキャリブレーションを実施した。なお、Case2-2 は Case-2-1 の条件をもとにエッチング時間とガス流量を変えて計算したが、実加工形状をよく再現しており、本条件の範囲内で設定したモデルが妥当であることが分かった。表②-(1)-2.6 に各反応パラメータを、図②-(1)-2.17 に3次元エッチング形状シミュレータによる計算結果を実加工形状とともに示す。

表②-(1)-2.6 中性粒子ビームエッチングの表面反応モデルとパラメータ

項目	小項目	Case-1	Case-2-1	Case-2-2
反応過程	ラジカルの吸着過程	$F^* + Si \rightarrow SiFx$	$Cl^* + Si \rightarrow SiClx$	同左
	熱励起エッチング	$SiFx \rightarrow X$	$SiClx \rightarrow X$	同左
	中性粒子エッチング	$F + Si \rightarrow X$	$Cl + Si \rightarrow X$	同左
		$F + SiFx \rightarrow X$	$Cl + SiClx \rightarrow X$	
$F + Mask \rightarrow X$		$Cl + Mask \rightarrow X$		
Flux [個/(cm ² sec)]	吸着反応	2.5E+16	2.5E+16	同左
	熱励起反応	2.5E+16	2E+14	同左
	中性(イオン)反応	2.5E+16	2.5E+16	同左
吸着率 [-]	吸着反応	0.0745	0.745	同左
	熱励起反応	0.0477	0.0477	同左
	中性(イオン)反応	0.121	0.015	同左
ERate [個/(cm ² sec)]	吸着反応	1.8625E+15	1.8625E+16	同左
	熱励起反応	3.79E+15	3.03E+13	同左
	中性(イオン)反応	3.025E+15	3.75E+14	同左
$v=ERate/\rho$ [cm/sec]	吸着反応	3.73E-08	3.73E-07	同左
	熱励起反応	7.58E-08	6.06E-10	同左
	中性(イオン)反応	6.05E-08	7.50E-09	同左

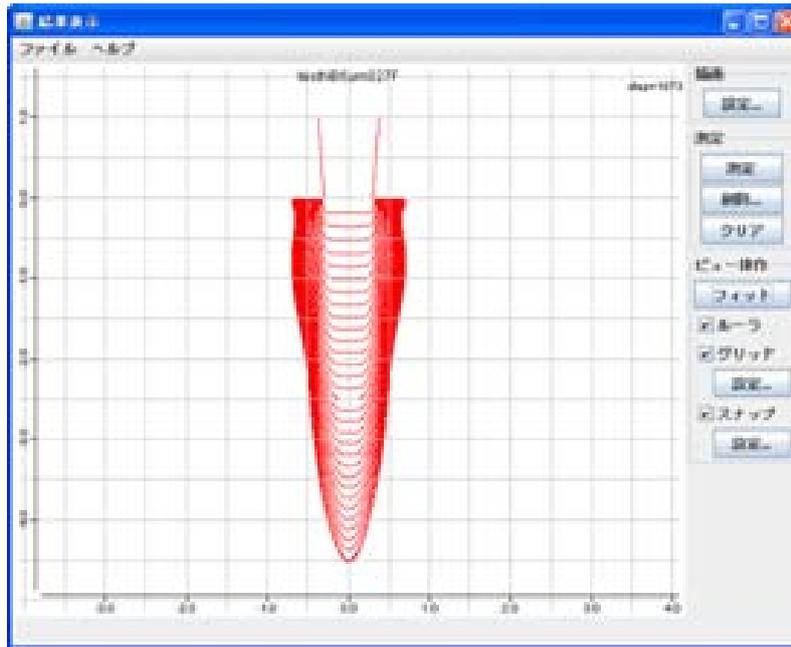


図②-(1)-2.17 3次元エッチング形状シミュレータによる試算結果

次に、中性粒子ビームエッチング加工の本プロジェクトの中間目標となっているアスペクト比 30 の加工実現可能性を評価するために、キャリブレーションしたパラメータを使い、F₂ガスによる深掘りエッチング計算を行った。

開口幅 600nm で深さ 5μm をターゲットとしたエッチング計算を実施したところ、試算モデルの範囲内であるが、図②-(1)-2.18 に示すように、4μm 程度の深さでエッチストップしてしまうことが分かった。

更に、本結果をうけて、実プロセス開発において別条件でのエッチング加工を行い、形状シミュレーションによる加工形状の各種反応パラメータ依存性の評価と深掘りエッチング条件の探索を行った。



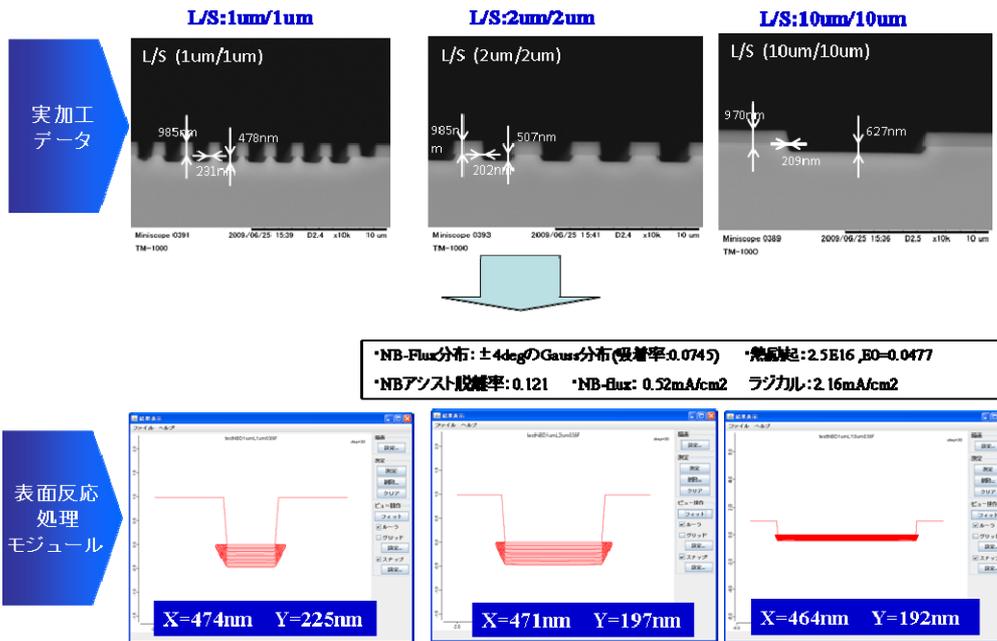
図②-(1)-2.18 F₂ガスによる深掘りエッチング計算例

b. 加工形状の反応パラメータ依存性の評価と深掘りエッチング条件の探索

前述の反応モデルとパラメータを標準データとして、F₂ガスを用いた開口幅の異なる3つの加工条件（L/S:1μm/1μm、L/S:2μm/2μm、L/S:10μm/10μm）における形状計算を行った。その結果を図②-(1)-2.19に示す（図中のX：エッチング深さ、Y：サイドエッチング量）。標準データを利用した場合でも、加工条件の違いによるおおよその形状予測は可能であったが、計算精度を高めるため、再度、キャリブレーションを実施した。

L/S:1μm/1μmの実加工データでキャリブレーションを実施し、同一条件で他の開口幅の予測計算を行ったものであるが、500nm程度のエッチング深さでは、開口幅による深さの違いはほとんど出ないという妥当な結果となった。

キャリブレーションしたパラメータを使って、加工形状に対する各反応パラメータ依存性、特にラジカルフラックス量による異方性評価を行い、深掘りエッチング条件を探索した。



図②-(1)-2.19 F_2 ガスによる開口幅の異なる3つのエッチング計算結果

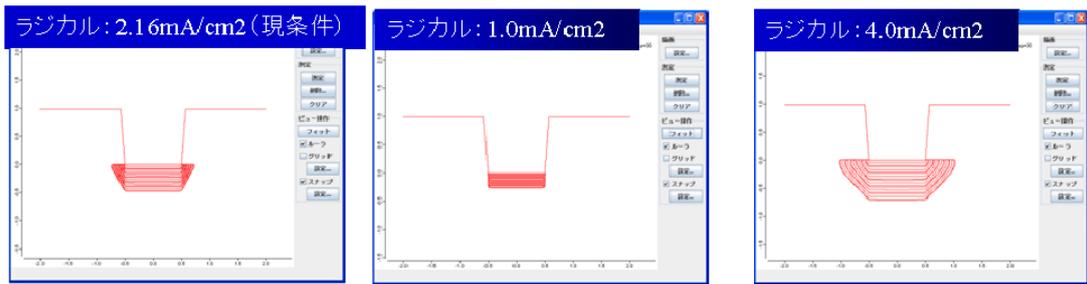
図②-(1)-2.20 は、L/S:1 μ m/1 μ m の構造に対して、ラジカルフラックス量をイオン電流密度換算で、2.16、1.0、4.0[mA/cm²]、エッチング時間 30 分とした場合の計算結果であり、図②-(1)-2.21 は、ラジカルフラックス量（横軸）に対して、エッチング深さ X に対するサイドエッチング量 Y を異方性評価値（Y/X）としてプロットした図である。

現条件である 2.16[mA/cm²]においては、熱励起型反応の寄与を評価するために基板温度を下げた計算も行ったが、等方性反応を若干抑えることが可能であっても、その効果には限界がありこのままでは深掘りエッチングはできないことが分かった。

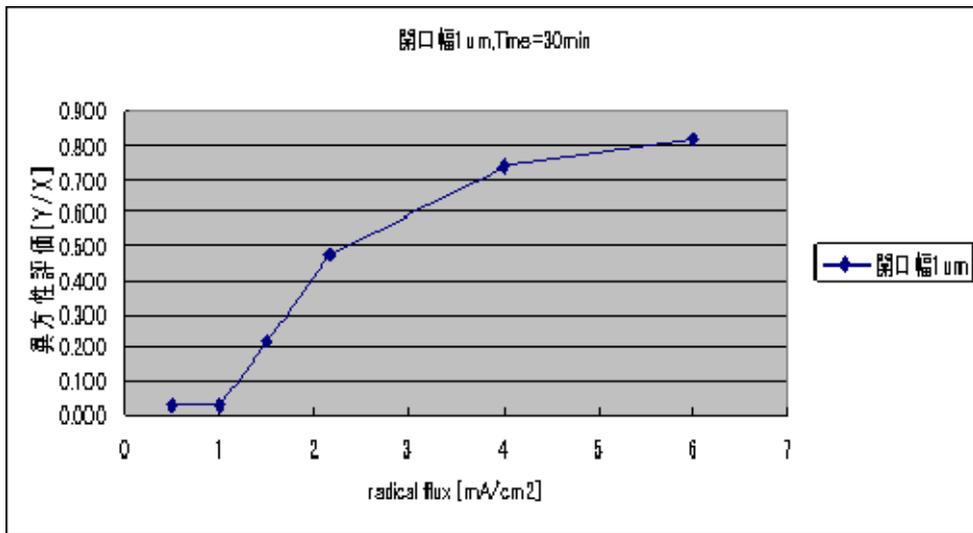
現条件の 2 倍のフラックス量に相当する 4.0[mA/cm²]では、等方性エッチングが支配的となり形状制御ができないという事前の予測通りの結果となった。

図②-(1)-2.21 から分かりますとおり、現条件の半分のフラックス量に相当する 1.0[mA/cm²]以下であれば、ほぼ垂直にエッチングすることが可能であり、垂直性を保持しながら深掘りエッチングすることが可能となることを示した。

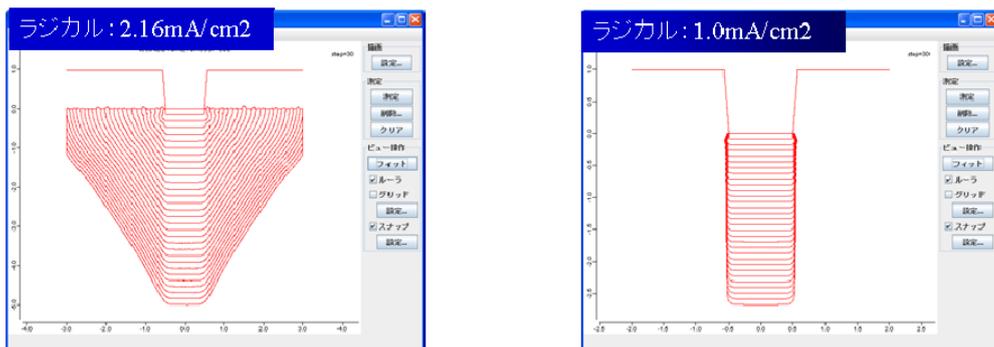
ラジカルフラックス量 2.16[mA/cm²]と 1.0[mA/cm²]のそれぞれの場合について、エッチング時間を 10 倍の 300 分とした、深掘りエッチングの計算結果を図②-(1)-2.22 に示す。1.0[mA/cm²]の場合は、深さ 2.68[μ m]までほぼ垂直にエッチングできており、本条件下であればアスペクト比 30 の加工も可能であることが分かった。



図②-(1)-2.20 エッチング形状のラジカルフラックス量依存性



図②-(1)-2.21 エッチング形状のラジカルフラックス量依存性



図②-(1)-2.22 深掘りエッチング条件の探索結果

c. プラズマエッチングに関する文献調査

本計算結果は、前述のとおり表面反応モデルを簡易的なモデルとしているため、反応パラメータが極小解である可能性が残されており、実プロセス担当者と議論を進めながら、実験データとの比較により、表面反応種類、フラックス

分布（絶対量、角度分布）、吸着率、離脱率等の主要なモデル因子を特定する手法を確立し、データと知見を蓄積しながら形状予測精度を向上させていくが重要である。

フラックス分布については、実験値として取得できるものもあり、MC 法によるアパーチャ設計シミュレーションから得られたフラックス分布を利用することで計算精度を向上することが可能である。しかし、表面反応については不明な点も多いため、プラズマエッチングにおける実験やシミュレーションに関する文献を収集し、内容を概観し分類した。分類結果を表②-(1)-2.7 に示す。

塩素ガスに関する文献が多数であり、より複雑な反応が起きているとされるフッ素ガスに関する文献は少ない。また反応パラメータが記載されている文献はほとんど存在しない。今後、収集した文献の精査を行い、装置条件、計算条件、エッチング収率などの情報を文献から抽出し、シミュレーションや実験条件にフィードバックしていき、詳細な反応素過程の決定に役立てていく予定である。

表②-(1)-2.7 プラズマエッチングに関する収集文献の分類

大分類	小分類	件数
実験	粒子ビーム(ガス)を用いた表面反応モデル実験	8
	粒子ビーム(イオン)を用いた表面反応モデル実験	12
	プラズマ実験	5
シミュレーション	半導体プロセスにおける計算機利用	4
	シミュレーション(特性曲線法)	4
	シミュレーション(ストリングモデル)	10
	シミュレーション(ショックトラッキング法)	2
	シミュレーション(レベルセット法)	6
	シミュレーション(レイトレーシング)	1
	シミュレーション(セルリムーバブルモデル)	9
	シミュレーション(MD)	12
その他	全般	9
計		82

d. 3 次元形状変化処理モジュールのプロトタイプ版作成

3次元形状変化処理モジュールでは、Monte Carlo 法によるアパーチャ内の粒子軌道計算によって得られた「アパーチャからの出射粒子フラックス分布」と表面反応処理モジュールによって得られた「反応特性パラメータ」を入力データとして、中性粒子ビームエッチングによる3次元加工形状の計算を可能とすることが求められる。昨年度実施した形状シミュレーションの基本設計に基づ

いて、上記2つのデータを入力とした形状計算が可能な3次元形状変化処理モジュールのプロトタイプ版作成と、中性粒子ビームエッチングの3次元加工形状の試計算を実施した。

昨年度に実施した基本検討の結果、プロトタイプ版作成に際しては、以下の2点が必要なことが分かり、これらを行った。

1) 高アスペクト比のエッチング形状計算を目的とした、3次元形状変化処理モジュールの大規模化

2) モンテカルロシミュレーションの結果を引き継いだ形状計算を可能とすることを目的とした、任意な形の入射フラックスの角度/エネルギー分布を反映した計算への対応

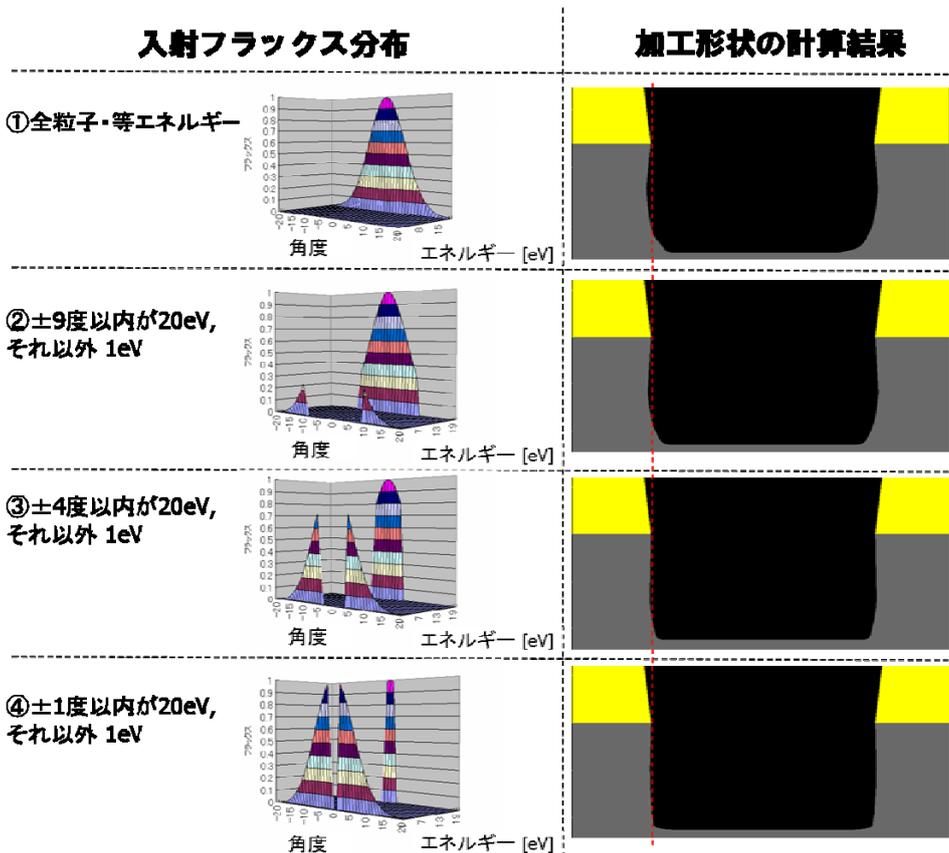
3次元形状変化処理モジュールの大規模化においては、省メモリ化を実施した。当モジュールでは voxel とよばれる立方体を単位として形状操作を行うが、voxel の内部データ構造を抜本的に修正し、1 voxel あたりのデータ量の削減を行った。また、データ構造の変更に伴う処理アルゴリズムの変更も行った。表②-(1)-2.8 に、開口幅 10 μm 、深さ 5 μm のトレンチ加工の形状計算におけるメモリ消費量と計算時間を示す。改善の結果、消費メモリ量が約 60%削減し、計算時間も若干短くなった。これにより、「超低損傷・高密度ナノ構造形成技術の開発」における中間目標であるアスペクト比 30 の 3次元ナノ構造のエッチングの形状計算にも対応可能となった。

表②-(1)-2.8 形状変化処理モジュールの改善前・改善後の比較
(CPU:AMD Opteron™244[1.8GHz]、メモリ: 8GB)

	消費メモリ量 (MB)	計算時間 (秒)
改善前	688.948	19.1
改善後	278.296	15.4

一方、任意な形の入射フラックスの角度/エネルギー分布を反映した計算への対応においては、入射フラックスの角度/エネルギーの2次元テーブルファイル、およびエッチングイールドのエネルギー依存性データファイルの読み込んだ形状計算処理を実装した。実装した処理の単体テストとして、開口幅約 0.7 μm 、深さ約 0.2 μm のトレンチ加工の形状計算を実施した。結果を図②-(1)-2.23 に示す。ここで、加工形状に与える入射フラックス分布の影響が明らかになるように、等方性反応の寄与はないものとして計算を行った。全粒子のエネルギーが

等しい場合（ケース①）と比較して、 $\pm 9^\circ$ より広角側の粒子エネルギーを 20 分の 1 にすると側面のエッチング量が減少し（ケース②）、更に粒子エネルギーを減少させる角度の範囲を広げると側面の垂直性が増加する。側面のエッチングが広角側の粒子によるものであり、そのエッチングイールドはエネルギーが下がると減少することから、この結果は妥当なものであると言える。

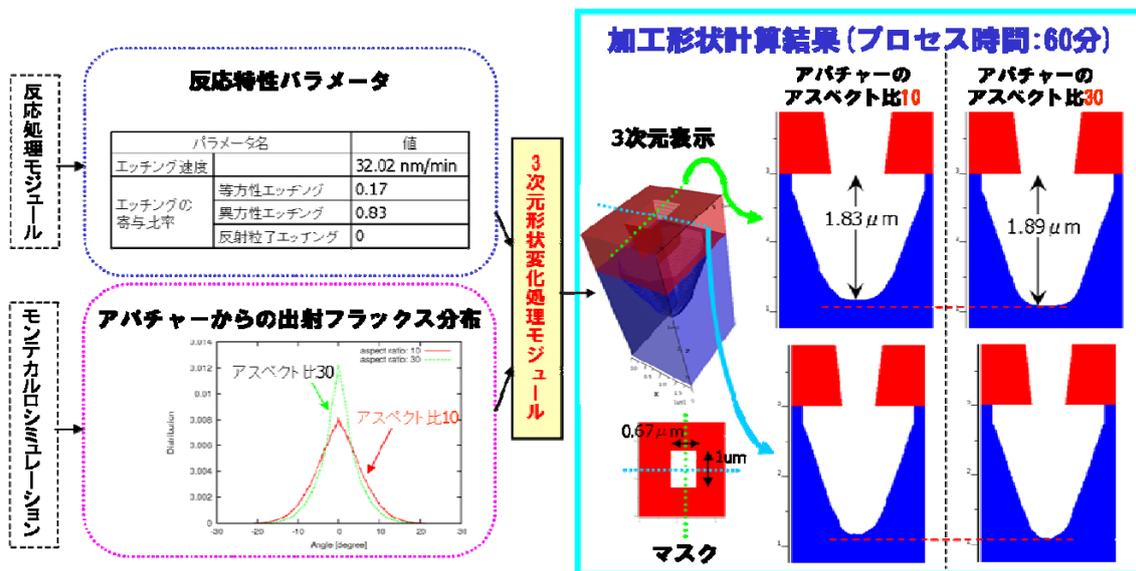


図②-(1)-2.23 種々の形の入射フラックス分布による加工形状計算の結果

e. プロトタイプ版による中性粒子ビームエッチングの 3 次元加工形状計算

上記で作成した 3 次元形状変化処理モジュールのプロトタイプ版を用いて、Monte Carlo 法によるアパチャー内の粒子軌道計算によって得られた「アパチャーからの出射粒子フラックス分布」と表面反応処理モジュールによって得られた「反応特性パラメータ」を入力データとして、種々の 3 次元加工形状計算を実施した。その一例として、図②-(1)-2.24 にフッ素ガスによる中性粒子エッチングを対象とした 3 次元形状計算の結果を示す。ここでは、アパチャーのアスペクト比とエッチング加工形状の関係を捉えるため、アパチャーのアスペクト比 10 の場合とアスペクト比 30 の場合の加工形状を計算し、両者を比較した。アパチャーのアスペクト比が高くなると、深さ方向のエッチング量が減少する

一方で、底部の丸みの程度が小さくなる。この結果は、アパチャーからの出射フラックス分布の広がり度合いの違い、つまりアスペクト比が高いほど出射フラックス分布が小角側にコリメートされている点を反映したものであると言える。



図②-(1)-2.24 フッ素ガスによるエッチングの3次元形状計算結果

f. まとめ

今年度の3次元エッチング形状シミュレーションの成果を以下にまとめる。

- Monte Carlo法によるアパチャー内の粒子軌道計算によって得られた「アパチャーからの出射粒子フラックス分布」と表面反応処理モジュールによって得られた「反応特性パラメータ」を入力データとした3次元形状変化処理モジュールのプロトタイプ版を開発した。
- プロトタイプ版による3次元加工形状の試計算を実施し、プラズマ粒子のアパチャーへの入射から3次元加工形状まで一気通貫したシミュレーションが可能であることが分かった。
- 表面反応素過程を仮定することにより、フッ素・塩素によるエッチングシミュレーションが実施可能となり、反応定数等のキャリブレーションにより、限定した条件下における実験結果を再現・予測できるようになった。
- 各種パラメータの調整により、マスク開口幅を変えた場合の評価や、深掘りエッチングの条件検討が可能となった。

最後に、来年度に向けた今後の課題と予定をまとめる。

- 文献調査や実験結果を参考にして、表面反応の素過程と各反応定数を決定することが課題であり、上記検討を通じて、主要なモデル因子を特定する手法を確立し、データと知見を蓄積しながら形状予測精度を向上させていく予定である。
- 最近の実験において、 F_2 及び Cl_2 (及び O_2) の混合ビームにより従来の単一ガス種の場合よりも大きなエッチングレートが得られた。これら実験結果を対象にエッチングシミュレーションを実施し (Cl_2 流量依存性等)、混合ビームに関する反応素過程モデルの決定、パラメータの合わせ込みを実施し、形状再現性の確認を行う予定である。
- プロセス技術開発者との連携をさらに密にして、エッチング対象材料の拡大、大面積化、高アスペクト比対応など各種エッチング条件による形状予測・評価のための解析と必要な機能開発を継続的に行い、超低損傷 3 次元ナノ構造の形状を予測・設計できるシミュレーション技術を構築していく予定である。

(1)-3 超低損傷・高密度 3次元ナノ構造形成技術の研究動向調査

超低損傷エッチングなどについて、最新の・超低損傷エッチング等 3次元ナノ構造形成技術における最新の研究動向を SSDM2009（平成 21 年 10 月、仙台）等の学会に参加し調査したので報告する。

(1)-3-1 SSDM2009 における最新の研究動向

2009 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2009) において、東北大・寒川教授らのグループによる講演「Deterioration of mechanical characteristics of micro-cantilevers by plasma induced damage」によると、厚さ 0.2 μ m、長さ 90 μ m、幅 20 μ m のカンチレバーアルゴンプラズマおよび中性粒子ビームを照射したところ、プラズマの場合には特性周波数および Q 値が大きく変化したが中性粒子ビームでは Q 値がわずかに変化したのみであった。この結果は、機械特性に対するプラズマ照射の影響について初めて確認されたもので、半導体電子デバイスのみならず MEMS においてもプラズマダメージについて考慮する必要があることを示すものである。BEANS プロジェクトでは MEMS における低ダメージ加工にいち早く着目し検討を進めているが、この検討を進めれば世界をリードできる立場にあると考えられる。

また、京都大・斧教授らのグループから、半導体電子デバイスに対するプラズマダメージに関する報告があった。今後、MEMS と半導体電子デバイスとの融合を考える際には、プラズマダメージは避けては通れない問題である。

(1)-3-2 AVS2009 における最新の研究動向

AVS 56th International Symposium And Exhibition (米国ボストン、2009 年 11 月 8 日～24 日) において、エッチング加工における損傷の問題や 3次元ナノ構造形成技術に関する多数の報告がなされた。

東北大・寒川教授は、中性粒子ビームによる低ダメージ加工に関する招待講演を行い、大きな注目を浴びた。また、韓国 Sungkyunkwan University のグループは、独自の中性粒子ビーム装置を用いた SOI ウエハの平坦化を報告している。

参考文献

- 1) M.-C. Chuang and J. W. Coburn, *J. Vac. Sci. Technol. A* 8, 1969 (1989).
- 2) W. Pfleging, D. A. Wesner, and E. W. Kreutz, *Appl. Surf. Sci.* 96-98, 496 (1996).
- 3) S. Suto, N. Hayasaka, H. Okano, and Y. Horiike, *J. Electrochem. Soc.* 136, 2032 (1989).
- 4) D. J. Santeler, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 4, 338 (1986).
- 5) Y. Watanabe et al, *Eur. Phys. J. D*, 38, 103-109 (2006).
- 6) T. K. Minton, *JPL Publication 95-17*, September (1995).
- 7) F. Shimokawa and H. Kuwano, *J. Vac. Sci. Technol. A*12, 2739 (1994).