

表面・界面ダイナミクスの数理III  
2012年5月18日

# 半導体微細構造の表面拡散による形態変化 — 実験とシミュレーション

大阪大学産業科学研究所

須藤孝一

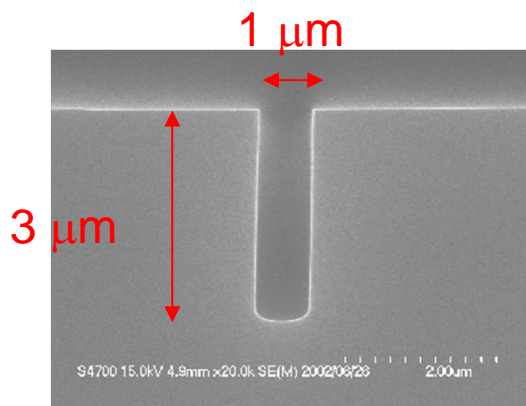
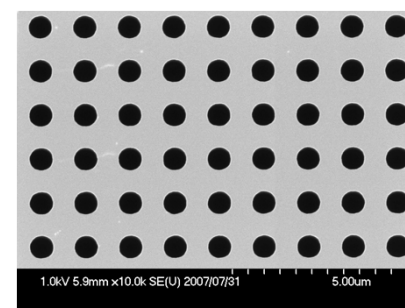
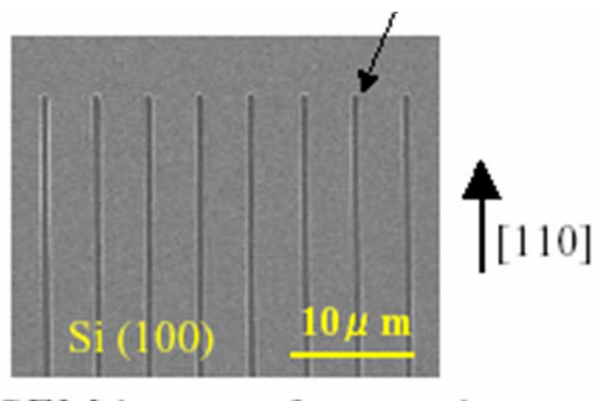
## 背景

表面拡散による高アスペクト比微細構造の形態変化 → 三次元的な形態変化

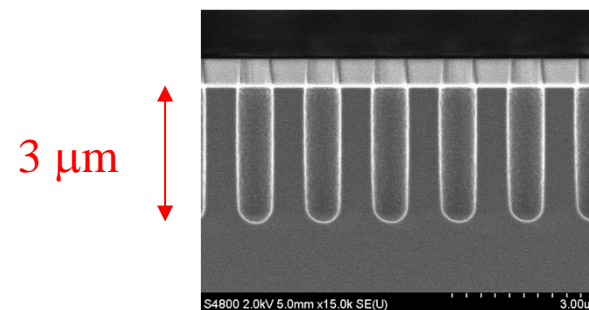
- 微細構造形成技術への応用
- 複雑な時間発展の物理的理解

→ Mullins理論に基づく現象の理解

# Si(001)基板上に形成した高アスペクト比微細構造

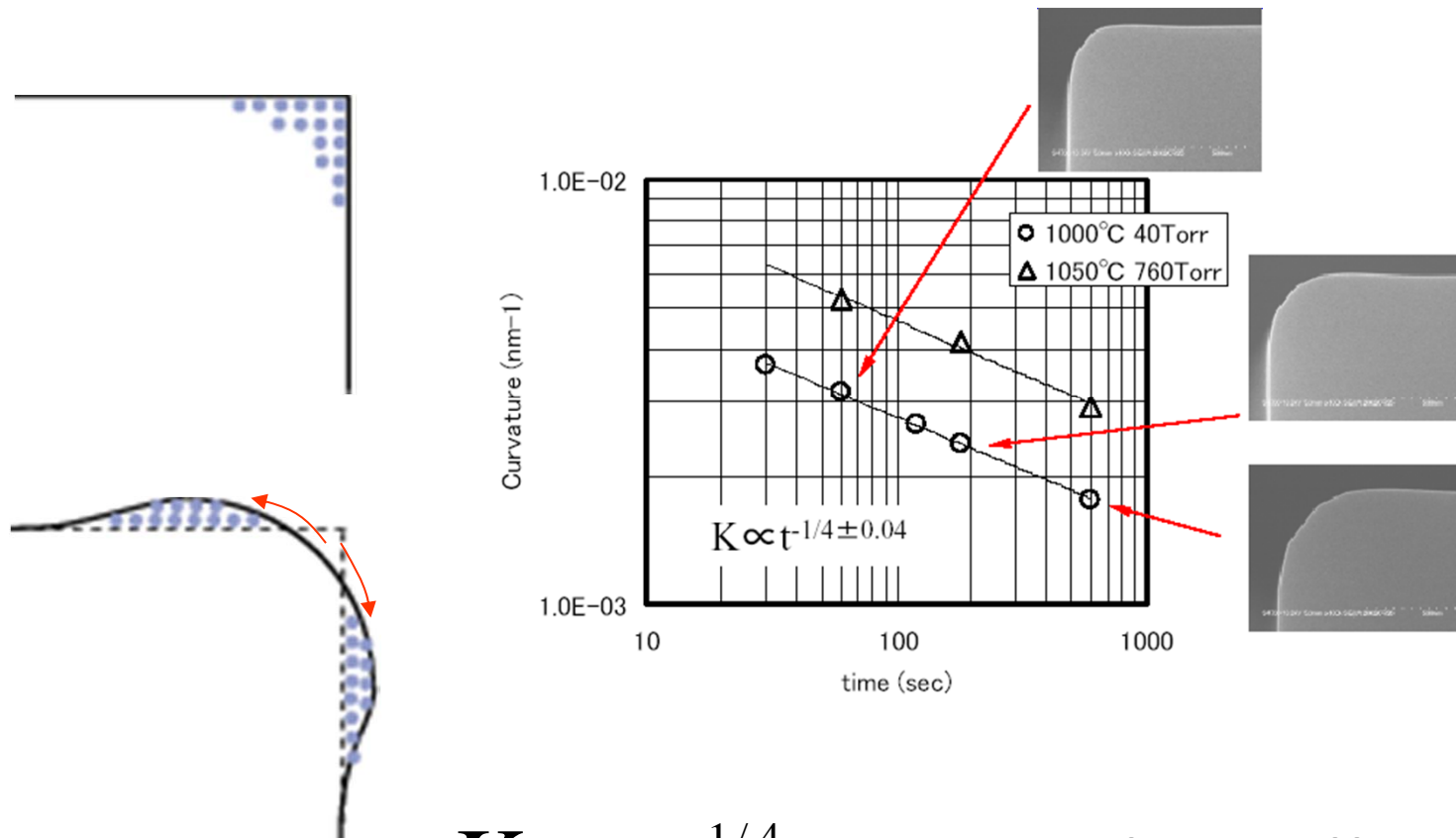


1次元トレンチ



柱状ホール

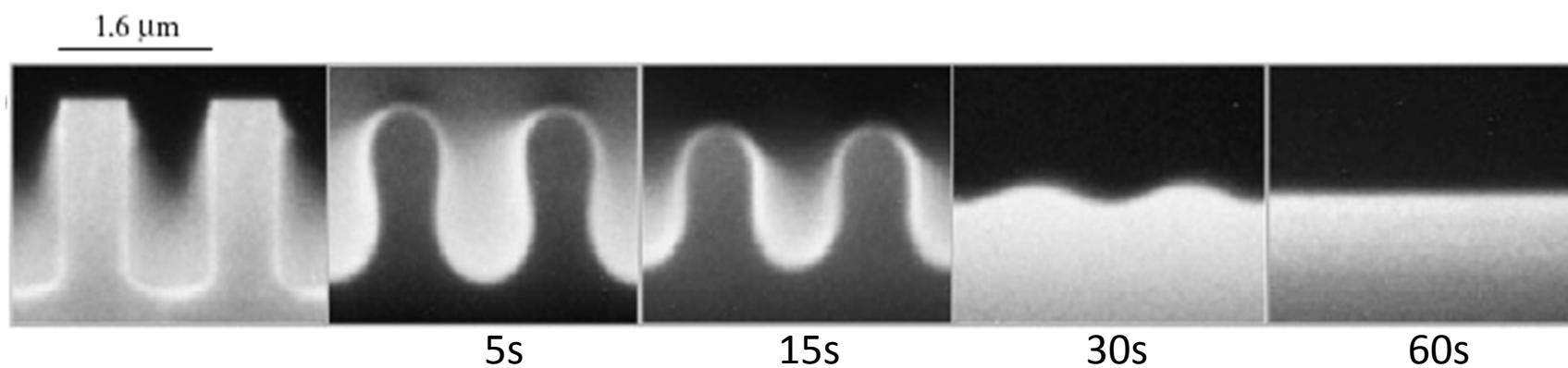
# コーナー・ラウンディング



$$K = t^{-1/4} \longrightarrow \text{Surface Diffusion}$$

H. Kuribayashi, R. Hiruta, R. Shimizu, K. Sudoh, and H. Iwasaki,  
Jpn. J. Appl. Phys. 43, L468 (2004).

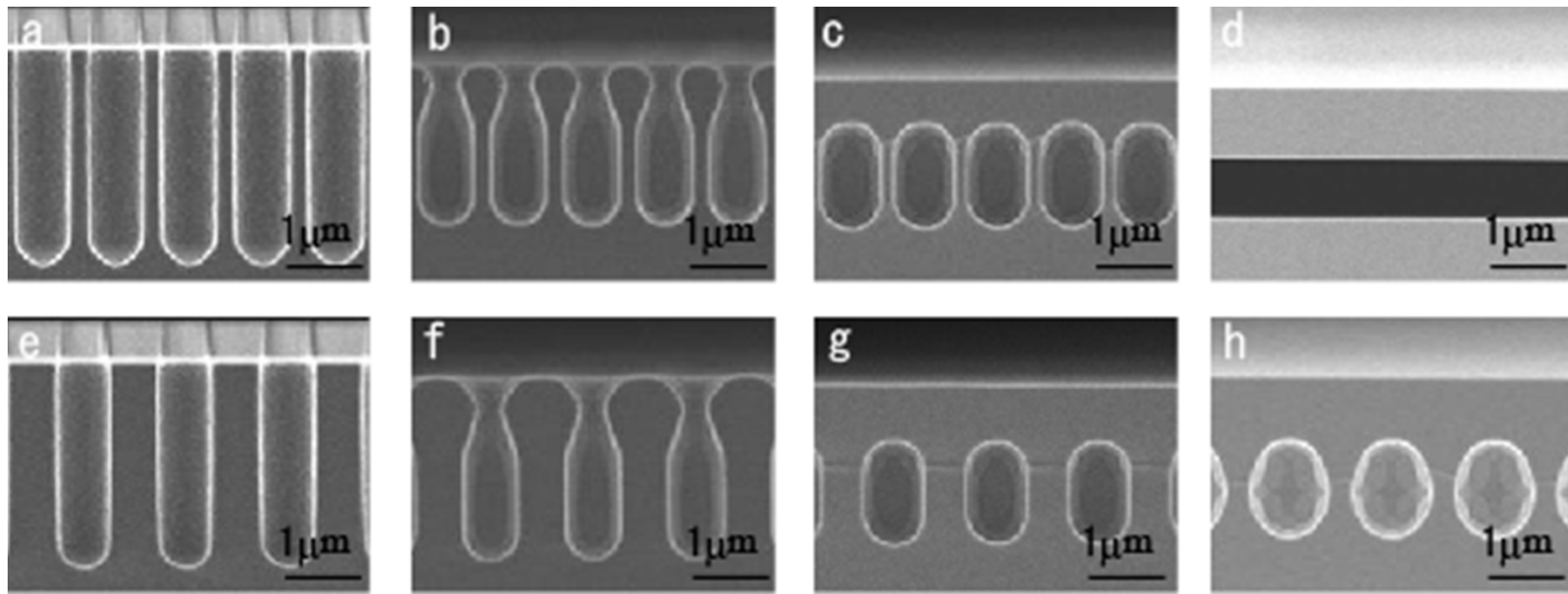
# 1次元格子プロファイルの減衰



シリコン1次元グレーティング1100°Cで加熱した時の変形の様子

J. Nakamura, K. Sudoh, and H. Iwasaki, Jpn. J. Appl. Phys. 46, 7194 (2007).

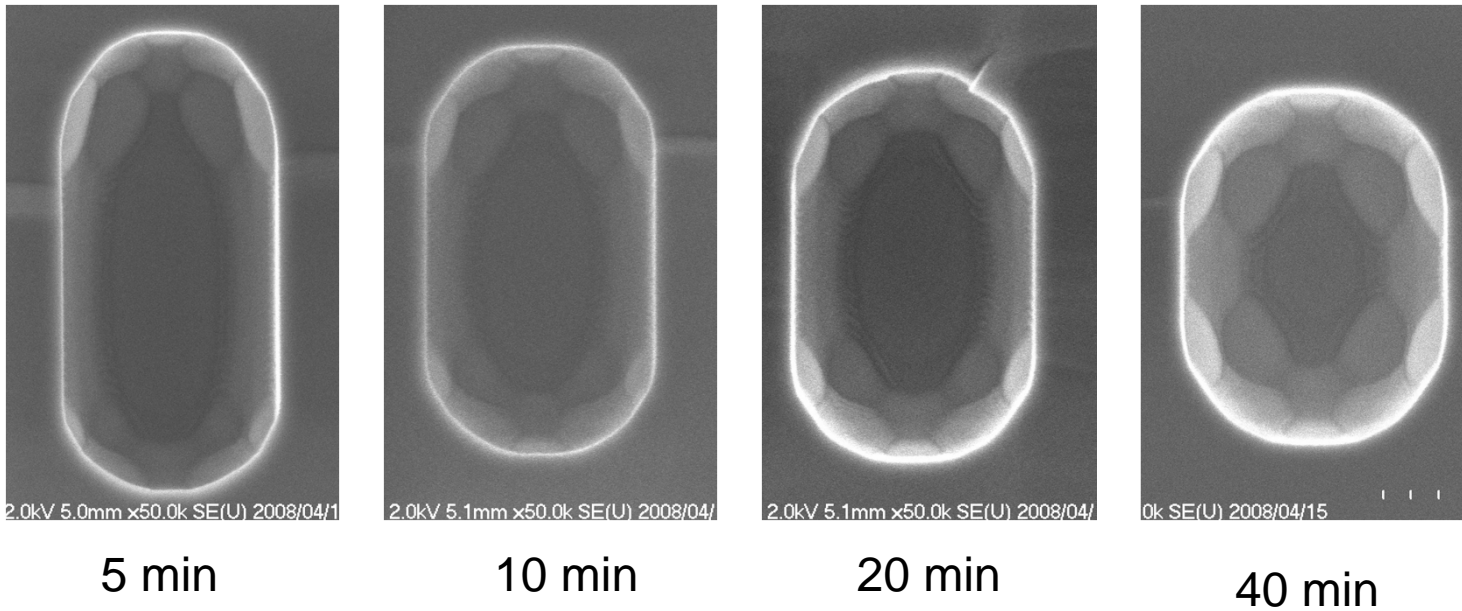
## 2次元ホール配列の形態変化



K. Sudoh, H. Iwasaki, H. Kuribayashi, R. Hiruta, R. Shimizu,  
J. Appl. Phys. 105, 083536 (2009)

# 表面拡散による空洞の形態変化

at 1100 °C in 60 Torr H<sub>2</sub> gas



- $\{001\}, \{011\}, \{111\}, \{113\}$  ファセットで覆われた多面体
- 体積一定

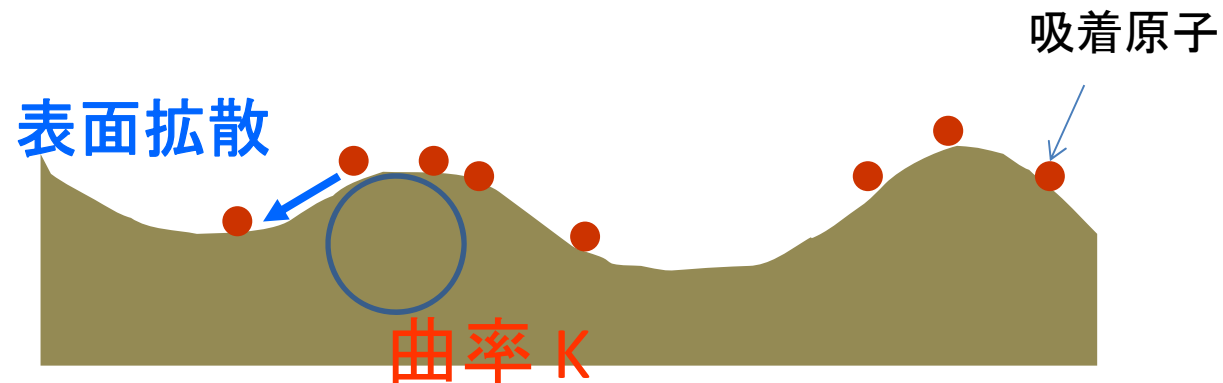
# 形態変化の駆動力

Gibbs-Thomson化学ポテンシャル

$$\mu(K) = \gamma\Omega K$$

$\gamma$  : 表面張力

$\Omega$  : 原子1個が占める体積





# Mullins方程式

W. W. Mullins: J. Appl. Phys. 28, 333 (1957).

法線方向の速度

$$v_n = \frac{D_s \gamma \Omega C_0}{kT} \Delta_s K = B \Delta_s K$$

$D_s$  : 拡散定数

$\gamma$  : 表面張力

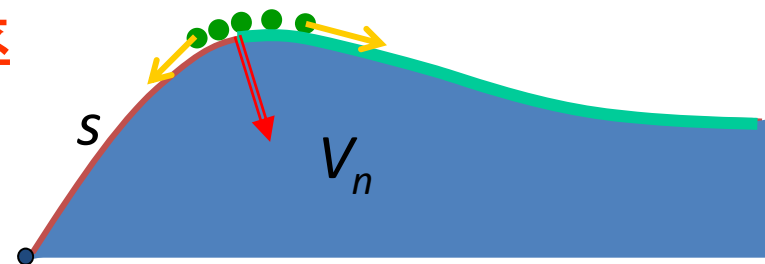
$\Omega$  : 原子1個が占める体積

$C_0$  : 平らな表面上の平衡濃度

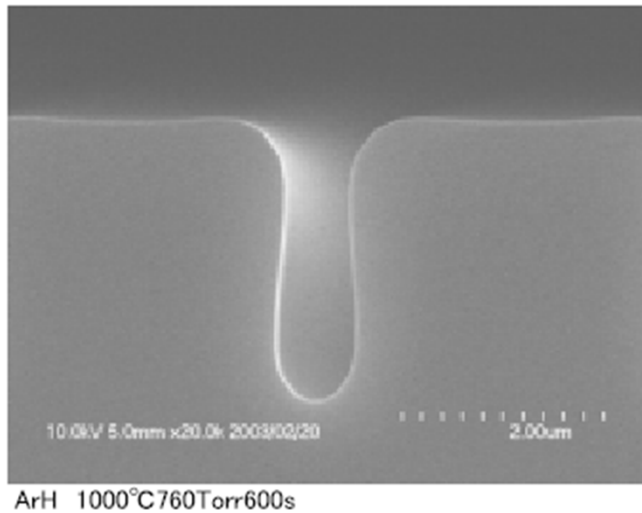
1次元プロファイルの場合

$$v_n = \frac{D_s \gamma \Omega^2 X_s}{kT} \frac{\partial^2 K}{\partial s^2} = B \frac{\partial^2 K}{\partial s^2}$$

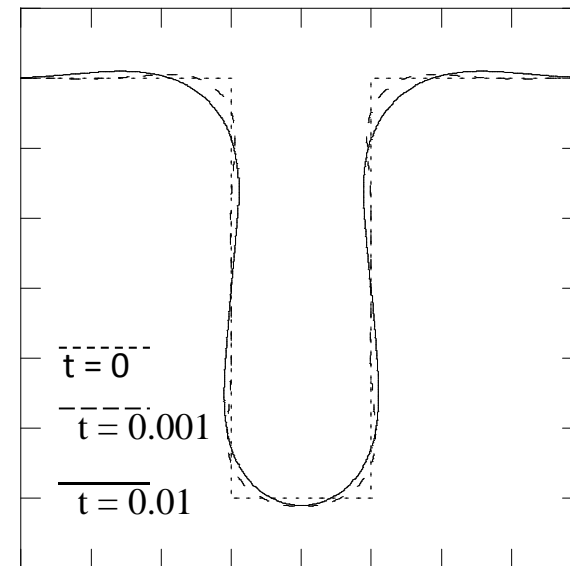
曲率



# 孤立した1次元トレンチの変形



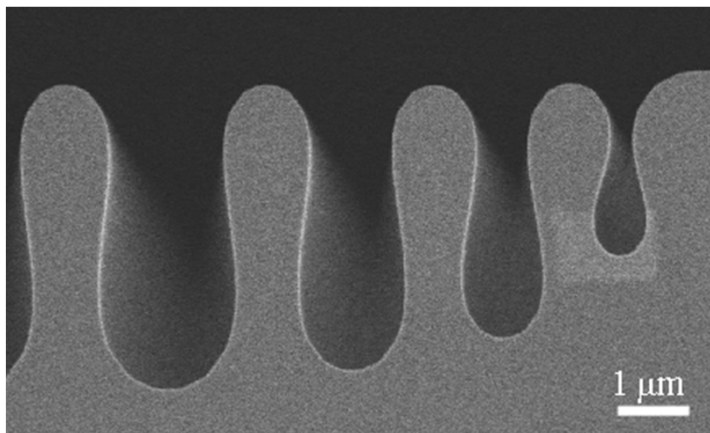
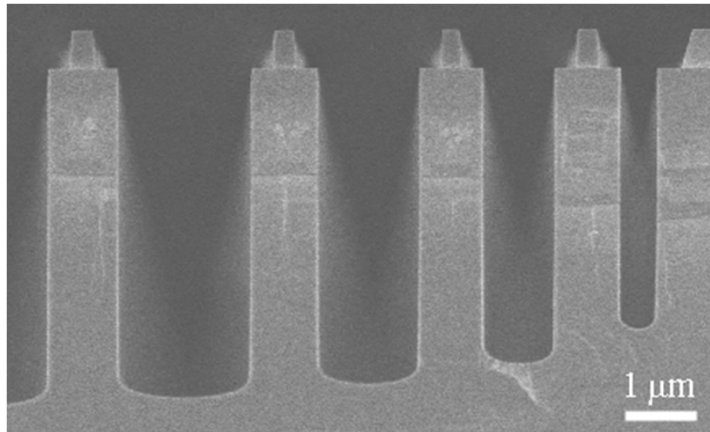
実験



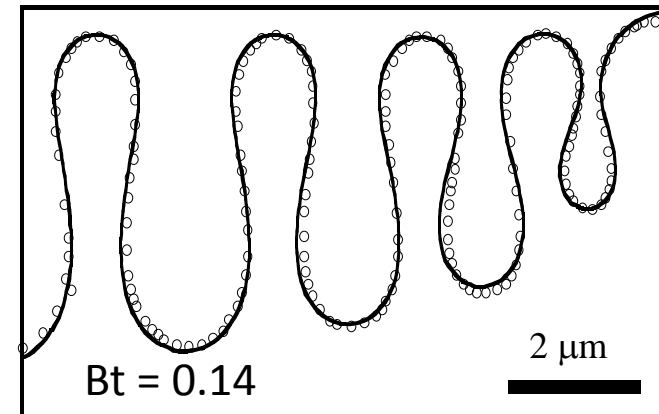
数値計算

K. Sudoh, H. Iwasaki, H. Kuribayashi, R. Hiruta, R. Shimizu,  
Jpn. J. Appl. Phys. 43, 5937 (2004).

# 1次元トレンチ列の変形



4%H<sub>2</sub>/Ar 760Torr  
1150 °C, 5min



Simulation

K. Sudoh, H. Iwasaki, R. Hiruta, H. Kuribayashi, R. Shimizu,  
Jpn. J. Appl. Phys. 43, 5937 (2004).

# 回転体の形態変化

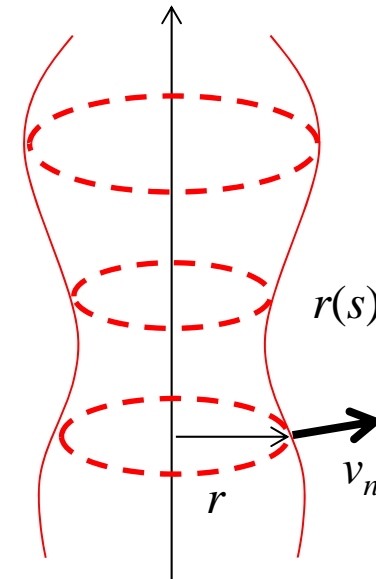
Mullins方程式

$$v_n = B \Delta_s K$$

回転体

円柱座標

$$v_n = \frac{B}{r} \frac{\partial}{\partial s} \left( r \frac{\partial K}{\partial s} \right)$$



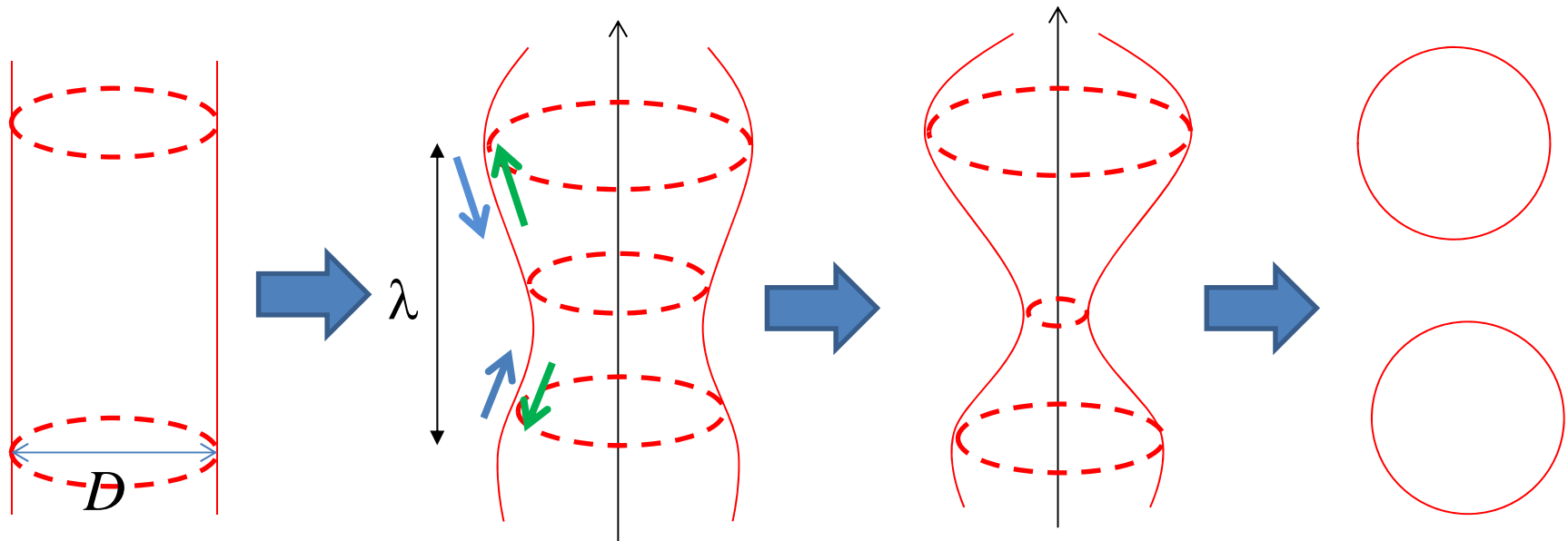
$$K = K_1 + K_2 = \frac{\partial \theta}{\partial s} + \frac{\cos \theta}{r}$$

F. A. Nichols and W. W. Mullins, J. Appl. Phys. 36, 1826 (1965).

# Rayleigh不稳定性

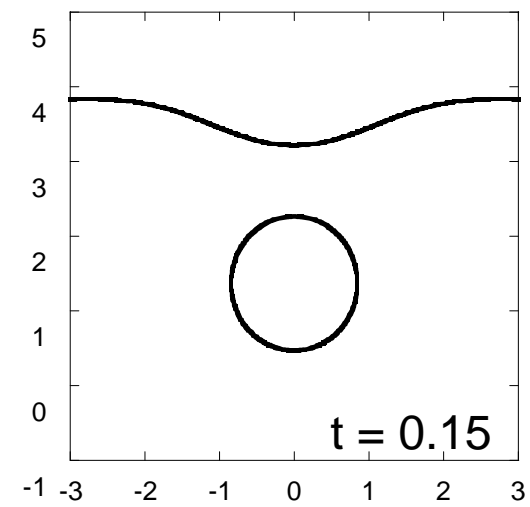
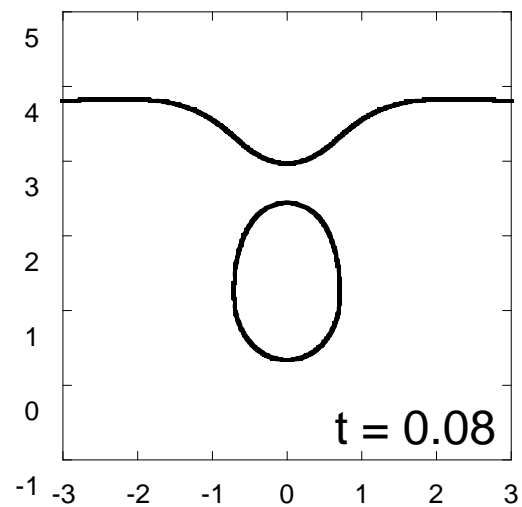
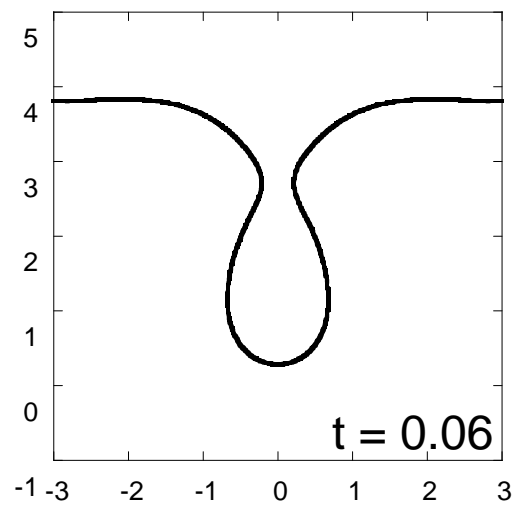
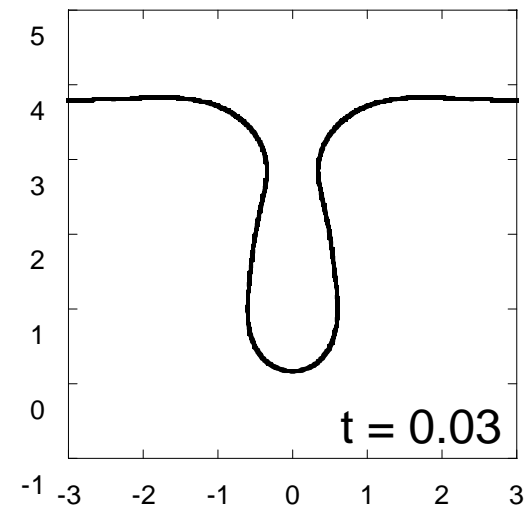
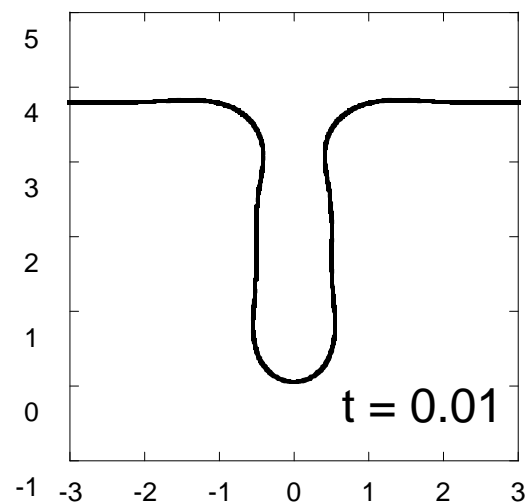
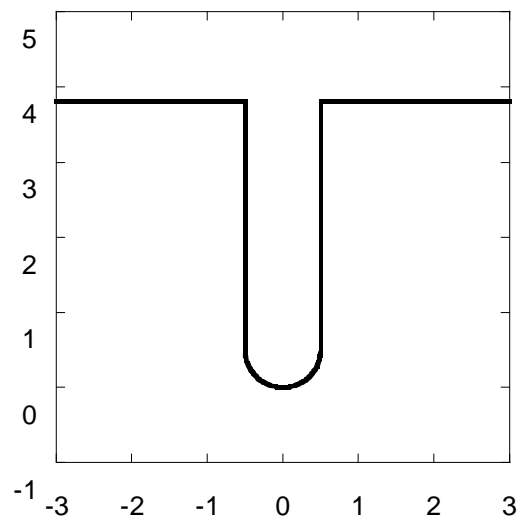
Lord Rayleigh, Roc. London Math. Soc. 10, 4 (1878).

$$K = K_1 + K_2 = \frac{\partial \theta}{\partial s} + \frac{\cos \theta}{r}$$

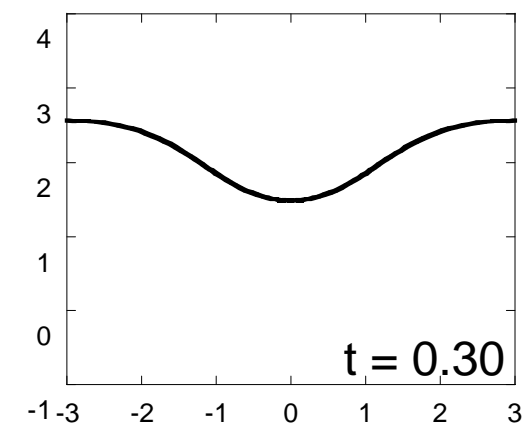
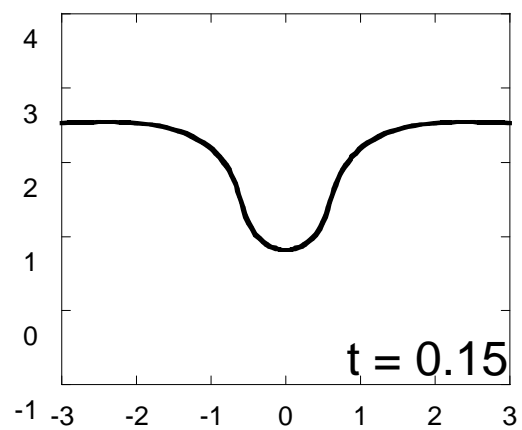
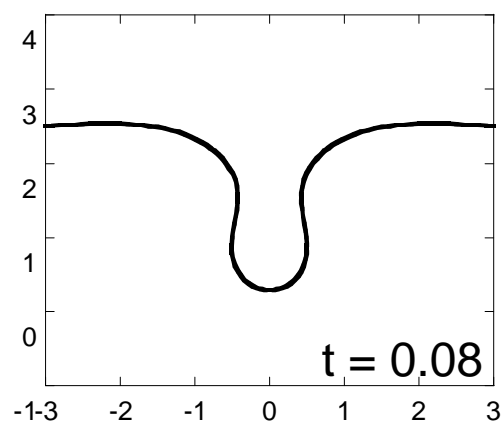
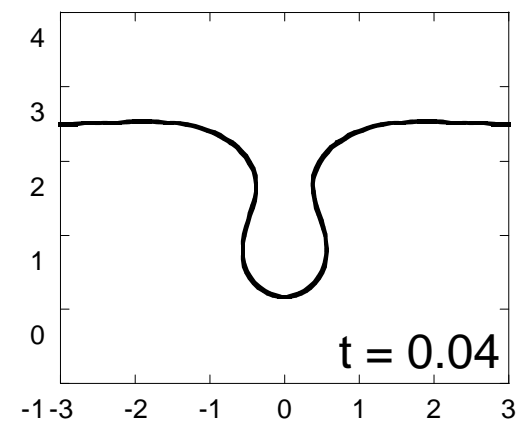
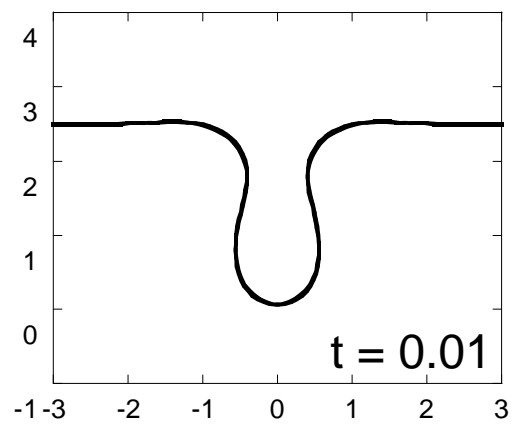
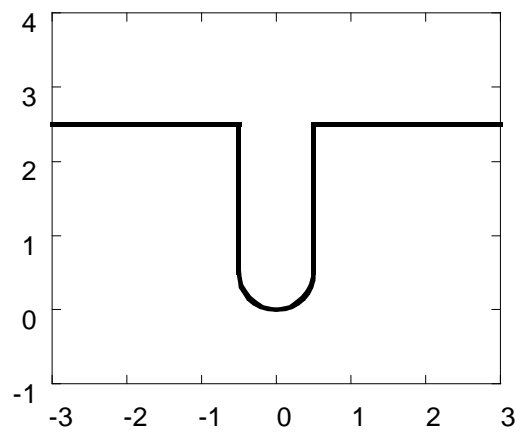


$$\lambda > \lambda_c = \sqrt{2\pi D}$$

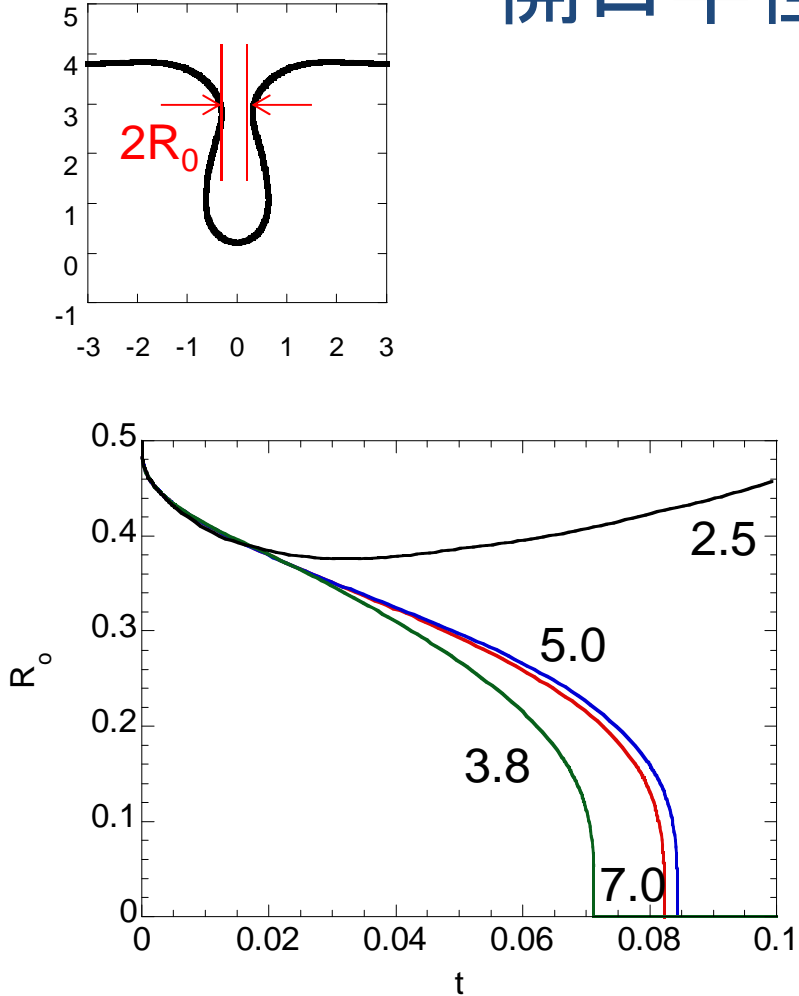
# シミュレーション結果:アスペクト比=3.8



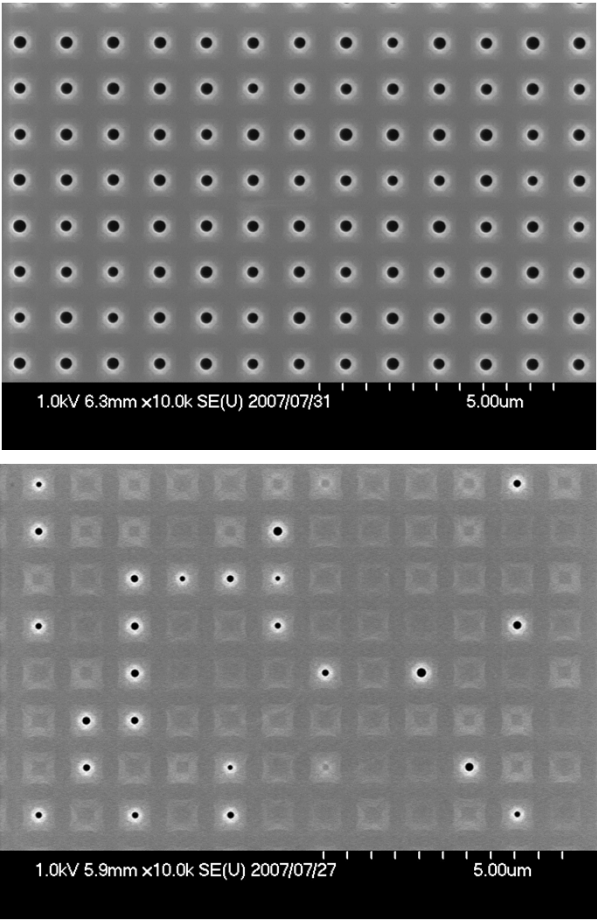
# シミュレーション結果:アスペクト比=2.5



# 開口半径の時間変化



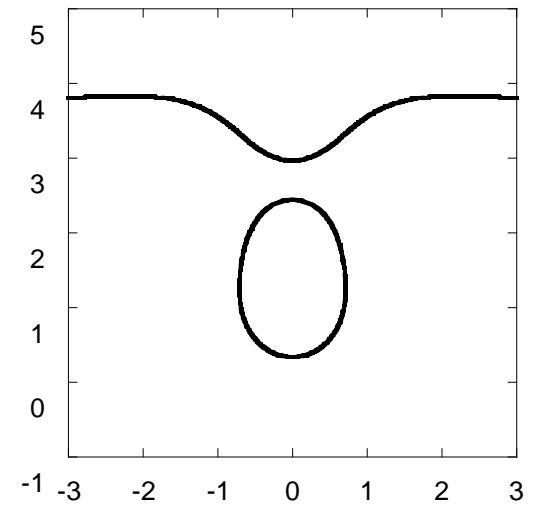
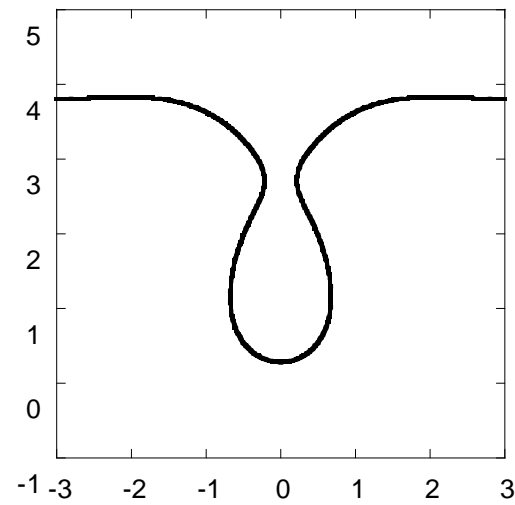
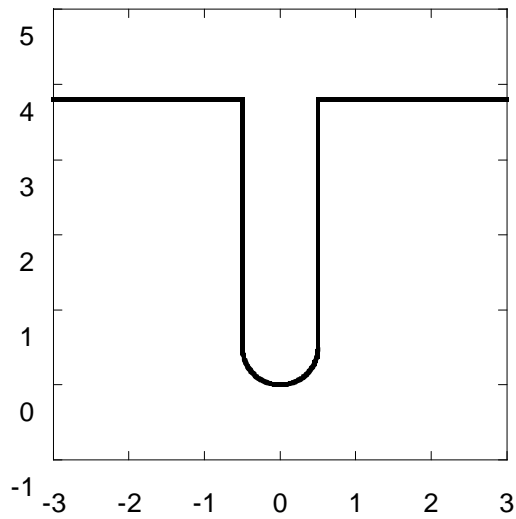
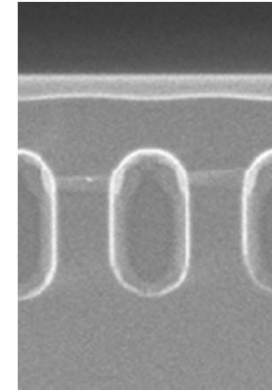
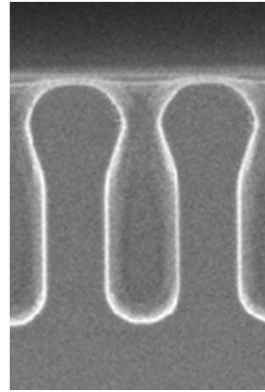
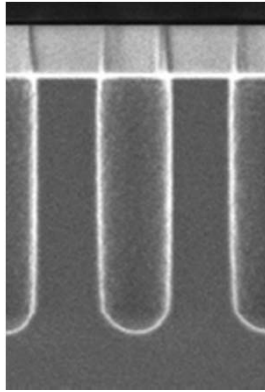
開口半径の時間変化(数値計算)



開口の閉塞過程(SEM像)



# プロファイルの比較



## 異方性があるときのMullins方程式

化学ポテンシャル  $\mu(K) = \beta(\theta)\Omega K$

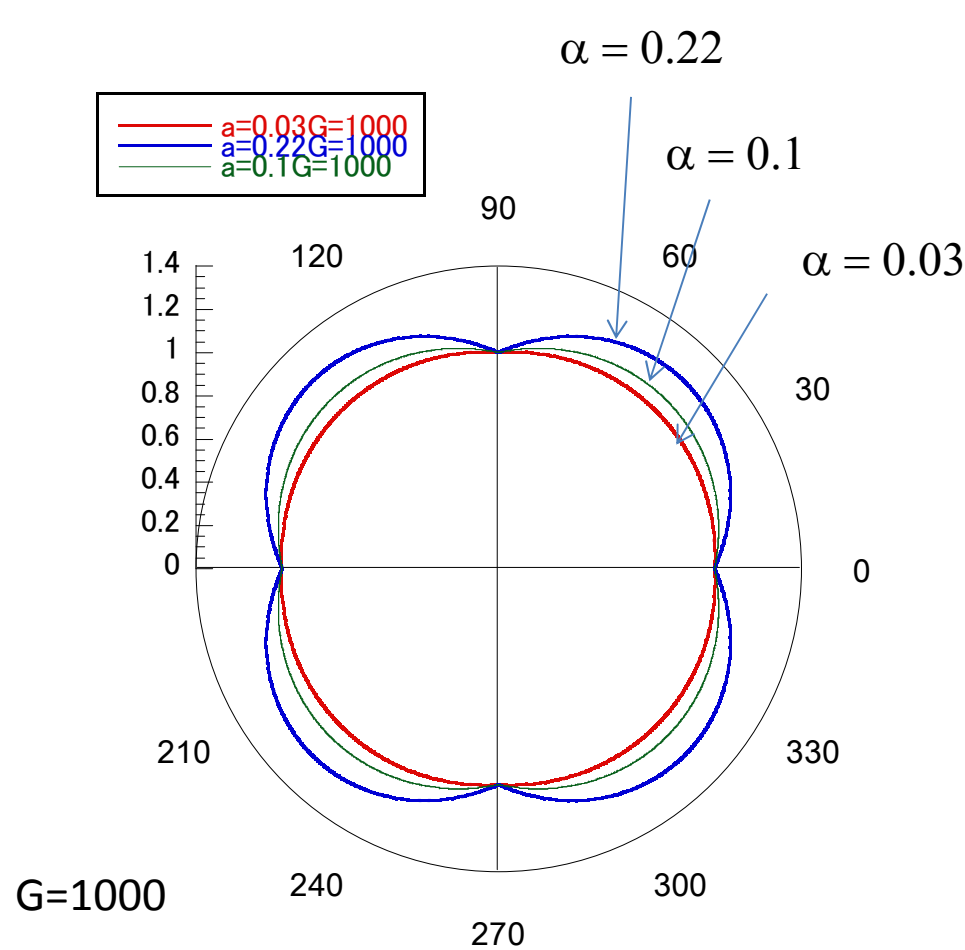
表面スティフネス  $\beta(\theta) = \gamma(\theta) + \frac{\partial^2 \gamma(\theta)}{\partial \theta^2}$

一般  $v_n = B \Delta_s \beta(\theta) K$

回転体  $v_n = \frac{B}{r} \frac{\partial}{\partial s} \left( r \frac{\partial \beta(\theta) K}{\partial s} \right)$

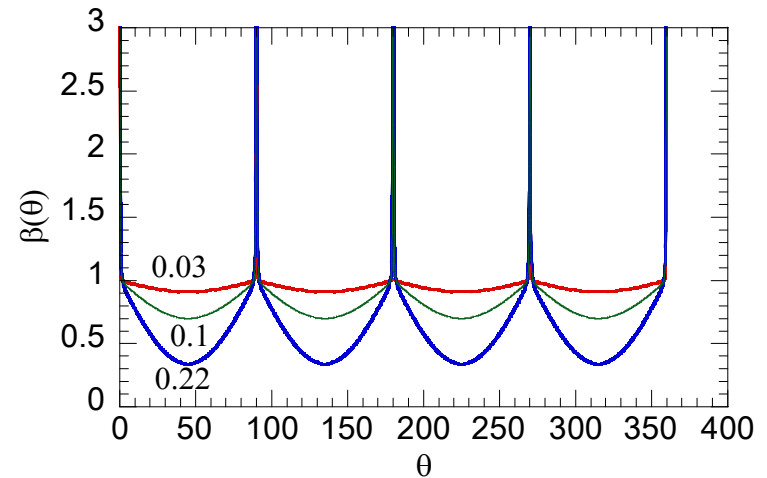
# 表面エネルギーの異方性の与え方

H. P. Bonzel, E. Preuss, Surf. Sci. 336 (1995) 209.

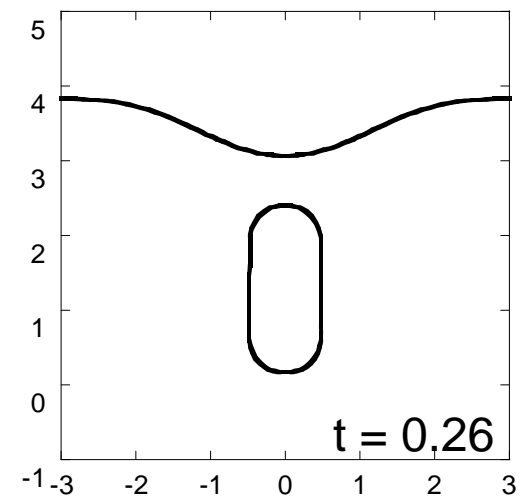
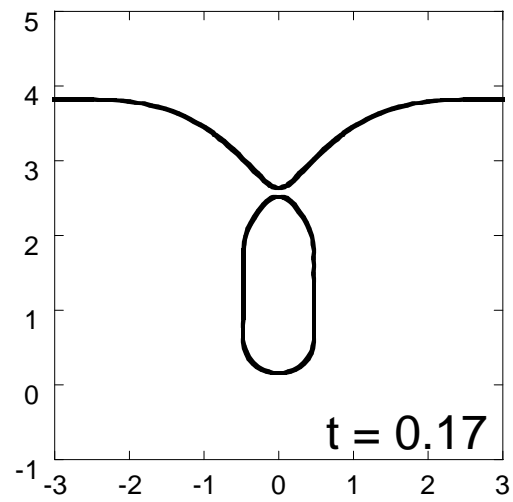
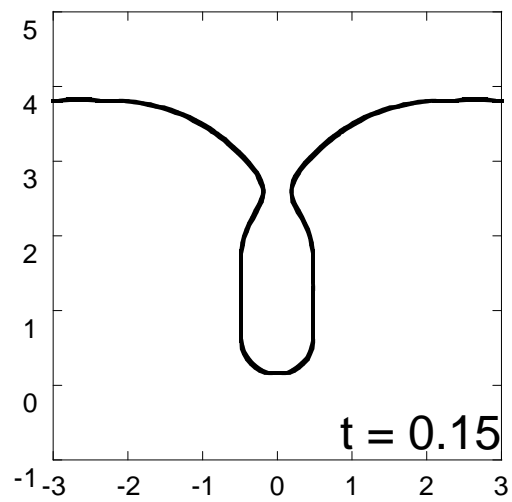
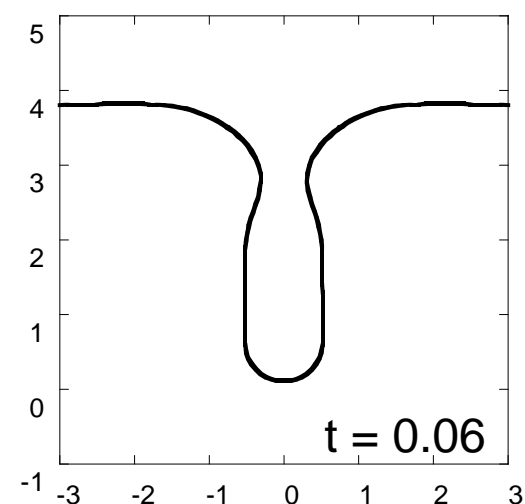
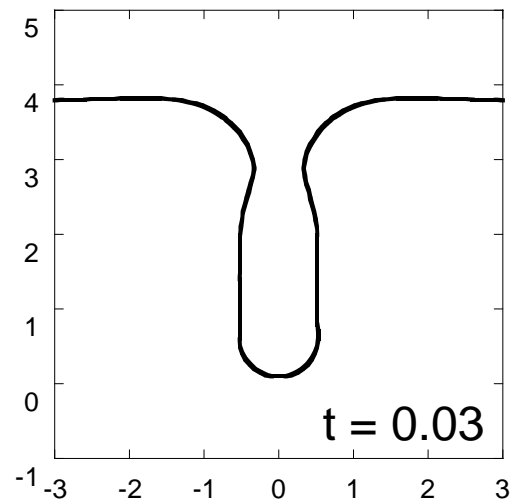
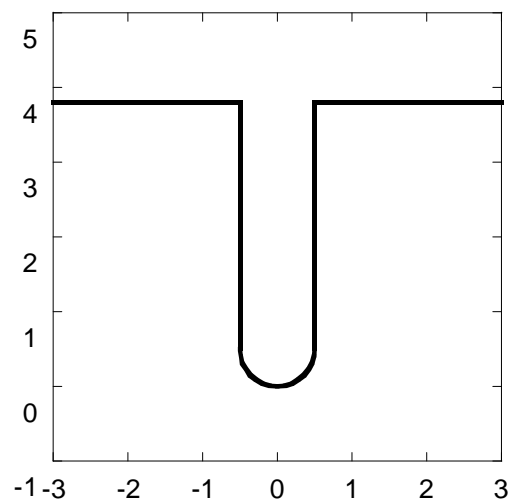


$$\gamma(\theta) / \gamma_0 = 1 + \alpha \sin(4\theta^*)$$

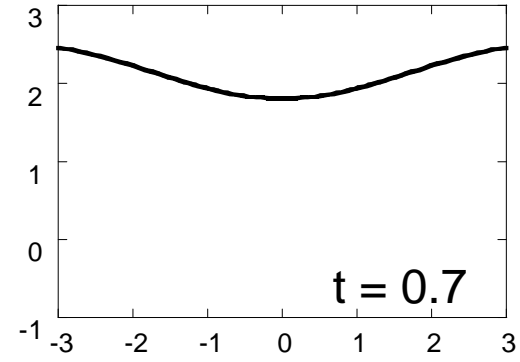
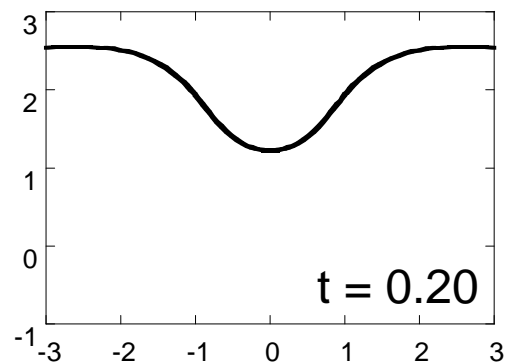
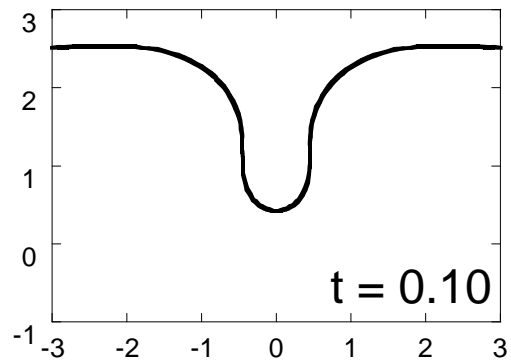
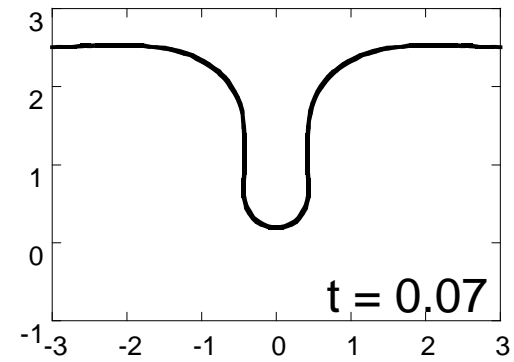
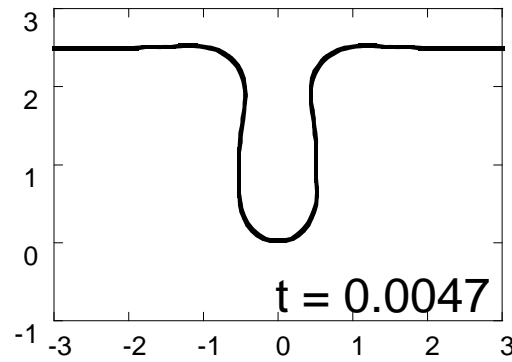
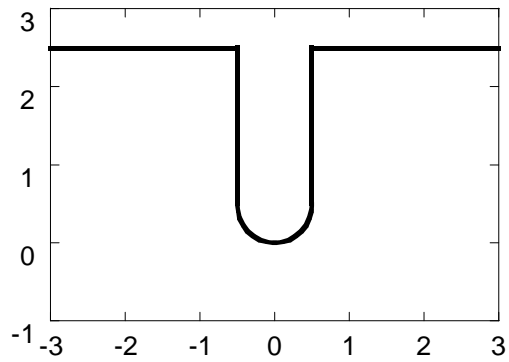
$$\theta^* = \sqrt{\left(\frac{\pi}{8\theta_0}\theta\right)^2 + G^{-2}} - G^{-1}$$



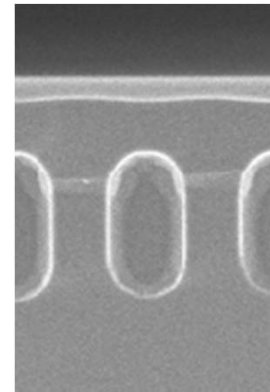
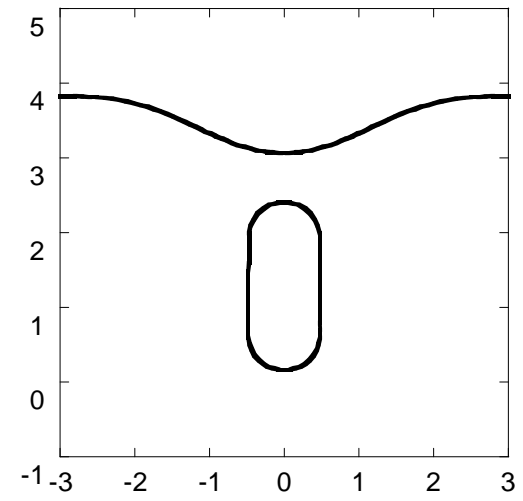
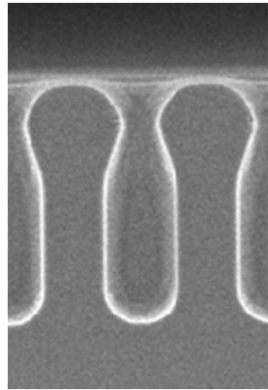
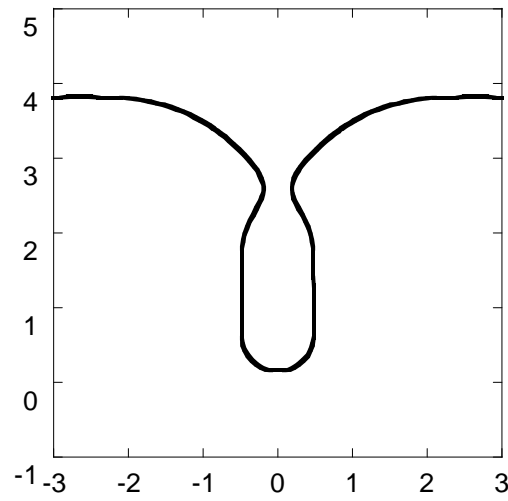
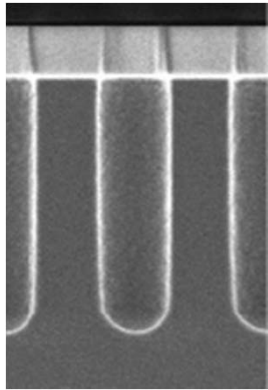
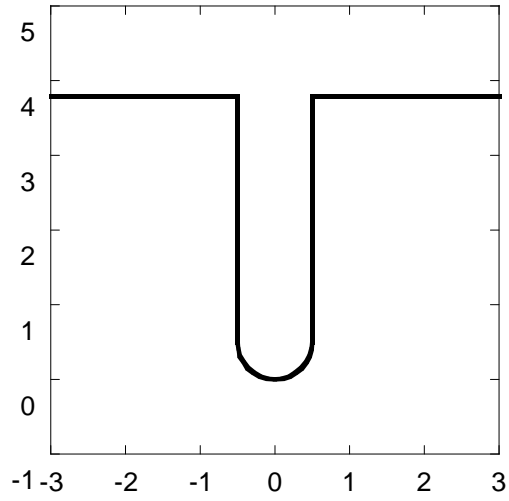
異方性を考慮したシミュレーション: アスペクト比=3.8



異方性を考慮したシミュレーション: アスペクト比=2.5



# プロファイルの比較



## まとめ

Si(001)基板の上に形成した1次元トレンチと柱状ホールの表面拡散による変形の様子を観察し、連続体モデルによるシミュレーションと比較した。

1次元トレンチの変形は、Mullins方程式を用いたシミュレーションで良く再現される。

柱状ホールの変形を再現するには、表面エネルギーの異方性を考慮することが必要。