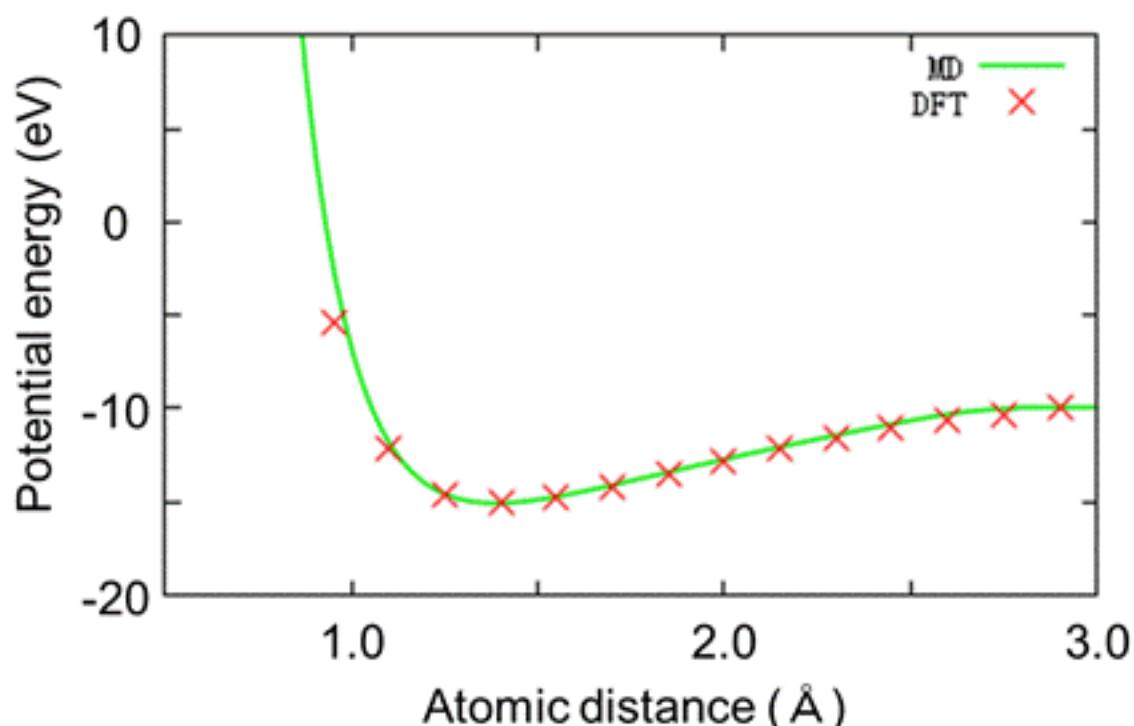


SiNプラズマエッチングにおける表面反応解析

大阪大学大学院工学研究科 マテリアル生産科学専攻 三宅 啓太

目的 ハイドロフルオロカーボン(HFC)プラズマによるSiNエッチングを解析し、SiN上のポリマー膜形成過程の詳細とエッチングメカニズムを理解する。

内容 分子動力学(MD)法を用いたプラズマ表面相互作用解析用シミュレーターの高精度化に取り組んだ。Gaussian09を用いた密度汎関数法によって、C, F, Nの各結合における原子間ポテンシャルエネルギーを求め、ポテンシャル関数へのフィッティングを行った。



C-Fにおける原子間ポテンシャルエネルギー(DFT)と
ポテンシャル関数(MD)

結果

表面層中の結合において、Fの電気陰性度の強さによる影響が重要であることが分かった。これを導入することで、エッチングシミュレーションによる、より現実的な評価を可能とした。