# 微細パターン構造に生じる面外うねり座屈の比較解析

# COMPARATIVE ANALYSIS OF OUT-OF-PLANE UNDULATIN BUCKLING IN MICROSCOPIC PATTERNED STRUCTURE

杉浦 順哉 1), 奥村 大 2), 田中 展 3)

# Junya SUGIURA, Dai OKUMURA, and Hiro TANAKA

- 1) 名古屋大学大学院工学研究科(〒464-8603 名古屋市千種区,E-mail: sugiura@mml.mech.nagoya-u.ac.jp)
- 2) 大阪大学大学院工学研究科 (〒565-0871 吹田市山田丘, E-mail: okumura@mech.eng.osaka-u.ac.jp)
- 3) 大阪大学大学院工学研究科(〒565-0871 吹田市山田丘, E-mail: htanaka@mech.eng.osaka-u.ac.jp)

In this study, we investigate the lateral undulation buckling of semiconductive micropatterned structures with mask and dielectric layers, which is induced by the intrinsic compressive stress in the mask layer. This investigation is individually conducted by theoretical and numerical analyses. Theoretical solutions are obtained from a bilayer model developed with Föppl-von Kármán plate theory, while numerical solutions are obtained from an eigenvalue buckling procedure in finite element analysis. Two different solutions are consistent when the cross section thickness-to-width ratio of mask layer is sufficiently large. In contrast, as the ratio is small, theoretical solutions overestimate the onset stress of buckling. This tendency is caused by assuming a uniform distribution of the intrinsic stress in the bilayer model.

Key Words: Semiconductor device, Intrinsic stress, Buckling, Plate theory, Finite element analysis

# 1. 緒 言

近年、化学プロセスの高度化と加工技術の高精度化に伴い、ナノ・マイクロスケールでの微細構造が作製できるようになっている。半導体素子の開発はその典型例であり、製造プロセスの前工程で作製される微細パターン構造は、そのピッチ幅が年々縮小し、10 nm オーダーの領域に迫っている(1). しかし、そのような半導体素子の性能を左右する微細パターン構造では、矩形断面の極度なアスペクト比が要求されるため、座屈不良などに関する構造強度の低下が著しい(2),(3).

微細パターン構造の主な座屈因子として内部応力(真性応力)が挙げられる. 真性応力はマスク層と誘電体層間の格子不整合や結晶核の成長・合体などから誘起される原子スケール特有の現象である(4)-(7). 一方, 座屈は古典的に確立している力学的メカニズムであり, 比較的簡単な連続体モデルを用いて説明できる. 著者らは, 先行研究において, ドライエッチング中に生じる半導体微細パターン材の横うねり座屈を対象にした連続体表記による2層モデルを定式化し, 実験との比較評価から座屈荷重と波数の関係にある座屈点の予測手法を構築した(8). さらに, 真性応力の発生メカニズムを解明するため, 分子動力学法を用いたエッチングモデルを開発し, エッチング中におけるマスク層の酸化膜形成とそれに伴う真性応力の増加を明らかにした(9).

ナノサイズの微細構造を連続体表記の数理モデルで表現 する利点として例えば以下の事項が挙げられる.

- 1) 従来の力学的現象と原子論的現象を区別化できる.
- 2) すなわち,分子動力学法などを用いて計算した物性値を数理モデルに代入し,連成することができる.
- 3) 数理モデルを無次元化変数で記述することで、対象とする力学特性を包括的に理解することができる.

以上のように数理モデルを構築することで、原子レベルの研究展開や構造規格などの応用面において全体の見通しがよくなることが期待される.一方、数理モデルには近似がつきものであり、設定次第では解が実現象から乖離する場合がある.有限要素法(FEM)は上記のような問題を支援する有力なツールであり、詳細な構造解析によって数理モデルでは扱えない情報を補填できる.しかし、数値解のメッシュ依存性や特異点近傍の解析を繊細に取り扱う必要がある(10).

上記の研究背景より本研究では、真性応力によって誘起される微細パターン材の横うねり座屈に対する数理モデルの適用範囲を連続体力学の視点から議論する. 具体的には、数理モデルとして Föppl-von Kármán (FVK)の基礎方程式(II)、(I2)に基づき座屈点の探索問題を導出するが、その際に用いる薄板近似と一様に作用する真性応力の2つの仮定が、非常に薄いマスク層の場合においては必ずしも高精度な解にはならないことを FEM の解析結果から指摘する.

# 2. FVK 板理論に基づく 2 層モデル

一般的な FVK の弾性平板の大たわみ理論は、座標系を (x,y,z)とすると、z 方向の変位 w と応力関数 F (圧縮方向を正とする)を未知量とする次式の基礎方程式で示される $^{(11),(12)}$ .

$$D\nabla^4 w + \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} - 2 \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = p_z$$
 (1)

$$\frac{1}{Eb}\nabla^4 F + \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} - \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y}\right)^2 = 0 \tag{2}$$

ここで、 $p_z$ は外圧を表し、 $\nabla^4$ は以下の微分作用素を表す.

$$\nabla^4 = \nabla^2 \nabla^2 = \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4}$$
 (3)

また、b は板厚であり、E、v は平板のヤング率とポアソン比を、D は次式に示す平板の曲げ剛性をそれぞれ表す.

$$D = \frac{Eb^3}{12(1-v^2)} \tag{4}$$

いま、Fig.1 に示すような誘電体層とマスク層で構成した 2 層モデルに対して、マスク層のみに x 方向の圧縮応力 $\sigma$ が作用する問題を考える。座屈前変形が十分小さいと仮定すると式(2)は次式の平面応力問題に帰着される<sup>(12)</sup>.

$$\nabla^4 F = 0 \tag{5}$$

さらに座屈直前まで $\sigma$ は $\gamma$ 方向に一様であると仮定すると,

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = 0, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial x \partial y} = 0, \quad \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} = \sigma b, \quad p_z = 0$$
 (6)

となり、式(5)は無視できる. よって式(1)と(6)を用いることで、Fig.1 で与えられた 2 層モデルの基礎方程式を次式のように表すことができる $^{(8)}$ .

$$\begin{cases} D_{d} \left( \frac{\partial^{4} w_{d}}{\partial x^{4}} + 2 \frac{\partial^{4} w_{d}}{\partial x^{2} \partial y^{2}} + \frac{\partial^{4} w_{d}}{\partial y^{4}} \right) = 0 & \left( 0 \le y \le h_{d} \right) \\ D_{m} \left( \frac{\partial^{4} w_{m}}{\partial x^{4}} + 2 \frac{\partial^{4} w_{m}}{\partial x^{2} \partial y^{2}} + \frac{\partial^{4} w_{m}}{\partial y^{4}} \right) + b\sigma \frac{\partial^{2} w_{m}}{\partial x^{2}} = 0 & \left( h_{d} \le y \le h \right) \end{cases}$$

$$(7)$$

ここで、下付添字 d および m は誘電体層およびマスク層を意味する.このとき、x,yおよび w e h で除した無次元化パラメータを考える.すなわち、

$$\hat{x} = \frac{x}{h}, \ \hat{y} = \frac{y}{h}, \ \hat{w} = \frac{w}{h}$$
 (8)

式(7)と(8)より以下の無次元化偏微分方程式を得る.

$$\begin{cases} \frac{\partial^4 \hat{w}_d}{\partial \hat{x}^4} + 2 \frac{\partial^4 \hat{w}_d}{\partial \hat{x}^2 \partial \hat{y}^2} + \frac{\partial^4 \hat{w}_d}{\partial \hat{y}^4} = 0 & \left(0 \le \hat{y} \le \kappa\right) \\ \frac{\partial^4 \hat{w}_m}{\partial \hat{x}^4} + 2 \frac{\partial^4 \hat{w}_m}{\partial \hat{x}^2 \partial \hat{y}^2} + \frac{\partial^4 \hat{w}_m}{\partial \hat{y}^4} + \Lambda \frac{\partial^2 \hat{w}_m}{\partial \hat{x}^2} = 0 & \left(\kappa \le \hat{y} \le 1\right) \end{cases}$$
(9)

ここで、 $\kappa = h_d/h$  であり、無次元化荷重 $\Lambda$ を以下で定義した.

$$\Lambda = \frac{\sigma b h^2}{D_{\rm m}} = \frac{12(1 - v_{\rm m}^2)\sigma}{E_{\rm m}} \left(\frac{h}{b}\right)^2 \tag{10}$$

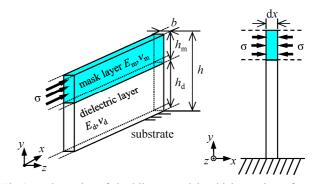


Fig.1 Schematics of the bilayer model, which consists of mask and dielectric ridges, fixed at the bottom.

微細パターン材のx方向の長さがhに対して十分長いとする.このとき、式(9)の面外たわみが次式のような波数 q の正弦波の解をもつと仮定する.

$$\begin{cases} \hat{w}_{d} = \xi_{d}(\hat{y})\sin q\hat{x} & (0 \le \hat{y} \le \kappa) \\ \hat{w}_{m} = \xi_{m}(\hat{y})\sin q\hat{x} & (\kappa \le \hat{y} \le 1) \end{cases}$$
(11)

式(11)を式(9)に代入することで、以下の常微分方程式を得る.

$$\begin{cases} \xi_{d}^{(4)} - 2q^{2}\xi_{d}'' + q^{4}\xi_{d} = 0 & (0 \le \hat{y} \le \kappa) \\ \xi_{m}^{(4)} - 2q^{2}\xi_{m}'' + (q^{4} - \Lambda q^{2})\xi_{m} = 0 & (\kappa \le \hat{y} \le 1) \end{cases}$$
(12)

いま,  $q^2 < \Lambda$ とすると,式(12)の一般解は次式のように表される.

$$\xi_{d}(\hat{y}) = P_{1}\hat{y}\exp(q\hat{y}) + Q_{1}\exp(q\hat{y})$$

$$+ R_{1}\hat{y}\exp(-q\hat{y}) + S_{1}\exp(-q\hat{y})$$
(13)

$$\xi_{m}(\hat{y}) = P_{2}\hat{y}\exp(\alpha\hat{y}) + Q_{2}\exp(-\alpha\hat{y}) + R_{2}\cos(\beta\hat{y}) + S_{2}\sin(\beta\hat{y})$$
(14)

ここで

$$\alpha = \sqrt{q^2 + q\sqrt{\Lambda}}, \ \beta = \sqrt{-q^2 + q\sqrt{\Lambda}}$$
 (15)

Fig.1 に示したように 2 層モデルは底面で完全固定されるため

$$(w_{\rm d})_{y=0} = 0, \left(\frac{\partial w_{\rm d}}{\partial y}\right)_{y=0} = 0$$
 (16)

となる. また、上面は自由境界であり、長手方向にモーメントおよびせん断力が作用しない. はじめに、曲げモーメントに対する自由境界条件から次式を得る.

$$D_{\rm m} \left( \frac{\partial^2 w_{\rm m}}{\partial y^2} + \nu_{\rm m} \frac{\partial^2 w_{\rm m}}{\partial x^2} \right)_{y=h} = 0 \tag{17}$$

次に自由表面におけるねじりモーメントとせん断力の関係 式から次式を得る.

$$D_{\rm m} \left( \frac{\partial^3 w_{\rm m}}{\partial y^3} + (2 - v_{\rm m}) \frac{\partial^3 w_{\rm m}}{\partial x^2 \partial y} \right)_{v = h} = 0$$
 (18)

無次元化した式(16)-(18)と式(11)を用いることで次式の関係式がそれぞれ得られる.

$$\xi_{d}(0) = 0, \ \xi'_{d}(0) = 0,$$
 (19)

$$\xi_{\rm m}''(1) - v_{\rm m} q^2 \xi_{\rm m}(1) = 0, \tag{20}$$

$$\xi_{m}^{(3)}(1) - (2 - \nu_{m})q^{2} \xi_{m}^{\prime}(1) = 0 \tag{21}$$

同様に、2層間の界面でたわみの連続性が保障されるので、

次式の関係式が得られる.

$$\xi_{\rm d}(\kappa) = \xi_{\rm m}(\kappa), \ \xi_{\rm d}'(\kappa) = \xi_{\rm m}'(\kappa)$$
 (22)

$$\gamma \left\{ \xi_{\rm d}''(\kappa) - \nu_{\rm d} q^2 \xi_{\rm d}(\kappa) \right\} = \xi_{\rm m}''(\kappa) - \nu_{\rm m} q^2 \xi_{\rm m}(\kappa) \tag{23}$$

$$\gamma \left\{ \xi_{d}^{(3)}(\kappa) - (2 - \nu_{d}) q^{2} \xi_{d}^{\prime}(\kappa) \right\} = \xi_{m}^{(3)}(\kappa) - (2 - \nu_{m}) q^{2} \xi_{m}^{\prime}(\kappa) \tag{24}$$

ただし、 $\gamma = D_d/D_m$ とする.

式(13)と(14)の一般解および式(19)-(24)の 8 組の境界条件から次式の行列方程式を得る<sup>(8)</sup>.

$$M(q, \Lambda, \kappa)n = 0 \tag{25}$$

ここで、M は  $8\times8$  の行列関数、n は次式に表す不定係数のベクトルである.

$$\mathbf{n} = \{ P_1 \ Q_1 \ R_1 \ S_1 \ P_2 \ Q_2 \ R_2 \ S_2 \}^{\mathrm{T}}$$
 (26)

式(25)の行列関数 M を用いて以下の問題を考えることにより、固定された $\kappa$ における系の座屈点を求めることができる.

find 
$$(\Lambda, q)$$
 such that  $\det M(\Lambda, q, \underline{\kappa}) = 0$  (27)

2 層モデルはx 方向に十分長いことを仮定しているため、式 (27)によって求めた座屈点の波数 q もしくは波長 $\lambda$  (= $2\pi h/q$ ) とそれに対応する $\Lambda$ は連続な集合となる. なお、本研究では Maple<sup>TM</sup> (Ver. 18.02)を用いて式(27)の問題を求解する.

# 3. 有限要素モデル

本章では、2章で説明した数理モデルと比較するためのFEM に基づく解析モデルについて説明する。解析モデルをFig.2に示す(以降,便宜的にリッジ構造と呼ぶ)。また本解析で用いる2種類の形状の寸法をTable 1に整理する。ここで,形状1は文献値<sup>(8)</sup>を参考にしたマスク層の厚さが小さい一般的な微細パターン材の形状を表し,形状2は提案した2層モデルの薄板近似が両層にて十分成立する理想的な形状を表す。解析モデルの境界条件として底面の全節点を完全固定する。また,リッジ構造の $X_1$ 方向の両端断面に位置する全節点を $X_2$ - $X_3$ 面内に拘束することによって,座屈固有値解析によって生じる座屈モードの波数(第2章で用いた波数qと異なる)が0.5刻みの離散値を取るようにする(Fig.4参照)。

本解析では、マスク層に作用する真性応力を表現するために、それと等価な熱応力を与える。すなわち、両端が固定されたマスク層を熱膨張させることによってマスク層に Xi 方

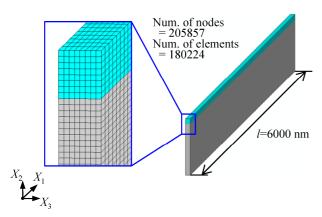


Fig.2 Example of the finite element model (Model 1 with b = 23 nm).

Table 1 Dimension parameters of the finite element models.

	h <sub>m</sub> (nm)	$h_{\rm d}$ (nm)	К	b (nm)	l (nm)
	26	258	0.908	10	6000
C1 1	26	258	0.908	15	6000
Shape 1	26	258	0.908	23	6000
	26	258	0.908	31	6000
Shape 2	100	500	0.833	10	6000

Table 2 Material parameters of the mask and dielectric layers.

	E (GPa)	ν	$\sigma(\text{MPa})$	$\alpha(K^{-1})$
mask	122.0	0.3	1000	8.197×10 <sup>-6</sup>
dielectric	12.8	0.3	_	_

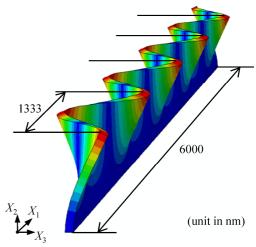


Fig. 3 Example of the calculated buckling mode for Shape 1 with b = 23 nm.

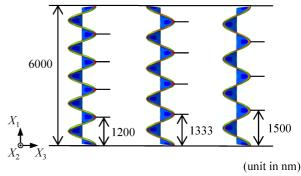


Fig.4 Top views of the three types of buckling modes for Shape 1 with b = 23 nm; (a)  $\lambda = 1200$  (=6000/5) nm, (b)  $\lambda = 1333$  (=6000/4.5) nm, (c)  $\lambda = 1500$  (=6000/4) nm.

向の圧縮応力を作用させる。圧縮応力の大きさは文献値<sup>(8)</sup>を参考に  $1000 \, \mathrm{MPa}$  とし、 $0 \, \mathrm{CC}$  を初期温度として、 $1000 \, \mathrm{CC}$  になったときに  $1000 \, \mathrm{MPa}$  の圧縮応力が作用するようにマスク層の線形膨張係数を決定する。本解析で用いたマスク層および誘電体層の材料定数を Table 2 に整理する。 Table 2 よりマスク層のヤング率は誘電体層のヤング率の約 10 倍とし、ポアソン比は各層とも 0.3 とする。有限要素解析ソフトウェアAbaqus  $^{\mathrm{TM}}$  (Ver. 6.14-1)を用いて、各形状の要素分割に対して 2 種類の要素(C3D8 要素および C3D8I 要素)を適用する。前者

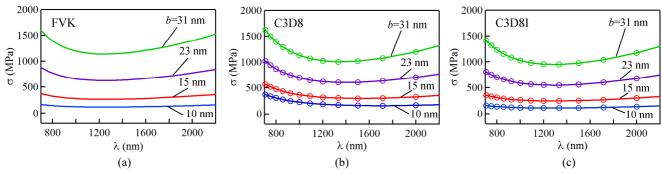


Fig. 5 Relationship between buckling stress  $\sigma$  and wavelength  $\lambda$  for Shape 1 with the different thicknesses b; (a) the bilayer model based on FVK plane theory, (b) FEM model with C3D8-type elements, and (c) FEM model with C3D8I-type elements.

Table 3 Comparison of the bilayer model with the FEM model with C3D8I-type elements for Shape 1 with b = 10 nm and 31 nm.

Wavelength (nm)		750.00	800.00	857.14	923.08	1000.00	1090.91	1200.00	1333.33	1500.00	1714.29	2000.00
Wavenumber		8	7.5	7	6.5	6	5.5	5	4.5	4	3.5	3
Theory ( $\sigma$ ) (MPa)	b=10	154.65	145.31	137.12	130.17	124.62	120.66	118.62	118.94	122.43	130.62	146.58
C3D8I diff. (%)		-2.82	-3.08	-3.39	-3.72	-4.07	-4.45	-4.80	-5.11	-5.31	-5.47	-5.74
Theory ( $\sigma$ ) (MPa)	b=31	1486.17	1396.44	1317.68	1250.93	1197.57	1159.59	1139.90	1143.04	1176.52	1255.26	1408.64
C3D8I diff. (%)		-11.15	-11.83	-12.60	-13.46	-14.39	-15.33	-16.21	-16.90	-17.26	-17.20	-16.71

は3次元8節点の1次要素であり、後者はその非適合要素である.うねり座屈の主な変形モードは曲げ変形であるから、 非適合要素の方が高精度な解を期待できる.

本解析モデルに対して温度(すなわち、マスク層の  $X_1$  方向の圧縮応力)を負荷パラメータとして座屈固有値解析を行い、固有値から求められる座屈応力 $\sigma$ と波長 $\lambda$ の関係を求める. なお、波長は対応する座屈モードによって表現されるうねり変形から求められる. 形状 1 における典型的な座屈モードの形状を Fig.3 に示す. Fig.4 に示すように、本解析で得られる座屈モードの波数は、境界条件に依存し、0.5 刻みで離散的になる.

#### 4. 解析結果と考察

はじめに、異なる幅の形状1における座屈応力と波長との関係を調べる.FVK 理論に基づく2層モデルと2種類の要素タイプ(C3D8 要素およびC3D8I 要素)で要素分割したFEMモデルとの解析結果をFig.5(a)-(c)にそれぞれ示す.FEM解析では、波数は0.5刻みの離散値として得られるため、解析点は印○で表される.全てのモデルにおいて、リッジ幅が増加すると座屈応力値が全体的に増加する.また、各曲線は下に凸な形状をしており、最小の座屈応力値が物理的に最も起こりやすい座屈点となる.しかし、最小値近傍の波長の変化に対する座屈応力の変化量は非常に小さいため、実際には波長は初期不整量などで大きくばらつくことが予測できる.次に2種類の要素タイプを比較すると、すべての波長に対してC3D8要素の座屈応力の方がC3D8I要素の座屈応力よりも大きい傾向がみられる.これは、C3D8要素の FEMモデルの解析においてせん断ロッキングが生じていることを示唆する.

2 層モデルの理論解と C3D8I 要素の FEM モデルの数値解

を定量的に比較するために、リッジ幅 10 nm と 31 nm において各波長に対応した両モデルの差を Table 3 に整理する. FEMモデルから求まる座屈点は、構造の全長(l=6000 nm)に依存して取り得る波長が決定される. この離散的な波長に対して両モデルの解を比較すると、リッジ幅 10 nm と 31 nm ともに数値解が理論解を下回っていることが確認できる. 特にリッジ幅 31 nm の数値解に対しては各波長で10%以上の誤差が生じているが、これは板厚の増加に伴うせん断変形の影響と考えてよい. その理由は、面外変形(w)によって面内応力( $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$ ,  $\tau_{xy}$ )のみが生じる FVK の基礎方程式の特徴に依拠する(式(1)と(2)を参照). 一方、リッジ幅 10 nm の場合にみられる誤差の詳細については後述する.

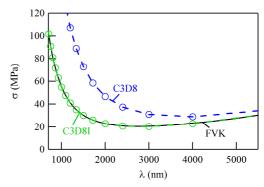


Fig.6 Comparison of the solutions obtained from Shape II. The solutions of the bilayer model and FEM model with C3D8I-type elements are consistent.

次に、形状 2 における座屈応力と波長の関係を Fig.6 に示す. 前述したように、本形状においてもせん断ロッキングの 効果による C3D8 要素と C3D8I 要素との数値解析解の差が顕

著にみられる. 一方, 2 層モデルの理論解と C3D8I 要素の FEM モデルの数値解は広範囲の波長においてよく一致して いる. すなわち, 薄板近似が両層にて十分成立する理想的な 形状では, FEM で求めた座屈点を FVK 理論でも高い精度で 求解できることがわかる.

以降では、形状2の結果と異なり、一般的な微細パターン構造を表す形状1の解析解がFVK理論とFEMモデルで一致しない理由をより詳細に考察する.

各形状のリッジ幅に対するマスク層, 誘電体層および全体の高さの比率(アスクペクト比)を Table 4 に示す. 形状 2 は、マスク層と誘電体層ともにアスペクト比が 10 以上となる. Fig.6 で議論したように、形状 2 では短波長から長波長まで FVK 理論と FEM 解析がよく一致していたため、アスペクト比が 10 を基準として薄板近似が成立するかどうかが判断できる. 一方、形状 1 の場合、リッジ幅が大きくなると全体のアスクペクト比が 10 前後になるため、板厚の効果が無視できなくなる. Table 3 にてリッジ幅が 10 nm と 31 nm で比較したとき、31 nm の FEM 解析結果の方が FVK 理論との差が拡大したのは板厚の影響といえる. しかし、リッジ幅が 10 nm の形状 1 は全体のアスペクト比が約 30 あるにも関わらず、応力値が最小となる座屈点で FVK 理論と 4.8%の誤差が生じていた. この結果は板厚の効果だけでは説明できない.

Table 4 において形状 1 のマスク層のアスペクト比に注目すると、各リッジ幅において小さい値をとっていることがわかる。そこで次に、微細パターン材のマスク層に真性応力が作用しているときの内部応力状態について調べる。 Fig.7 にリッジ幅 23 nm の形状 1 と形状 2 について、温度 1000  $^{\circ}$  に相当する真性応力(すなわち約 $^{\circ}$ 1000 MPa)が作用したときのリッジ断面における各応力分布を示す(なお、変形量は非常にわずかであり、この図を用いて議論することはできない)。 Fig.7(a)は各形状の $\sigma_{i1}$ を表し、両形状ともに $^{\circ}$ 1000 MPa 前後の真性応力が分布していることが分かる(FEM 解析では圧縮応力を負としている)。このとき、マスク層断面に生じる $\sigma_{i1}$ 

の平均値を計算すると、形状 1(b=23 nm)のときは-1004.6 MPa、形状 2 のときは-1000.6 MPa となり、想定した真性応力の値から大きく変化していないことがわかる。なお他のリッジ幅に関する $\sigma_{\Pi}$  の平均値を Table 5 に示す。すなわち、マスク層底面にヤング率の小さい誘電体層を連結させた場合においても $\sigma_{\Pi}$  の平均値はほとんど影響を受けない。一方、応力分布をみると底面に 1050 MPa を超える圧縮応力が生じているが、両形状とも底面近傍に集中しており、この局所化した圧縮応力が系の座屈荷重値を大きく下げるとはいえない。

Table 4 Aspect ratios of the layer thicknesses to ridge width for Shape 1 or 2.

	b (nm)	$h_{ m m}/b$	$h_{ m d}/b$	h/b
	10	2.60	25.8	28.4
C1 1	15	1.73	17.2	18.9
Shape 1	23	1.13	11.2	12.3
	31	0.84	8.32	9.16
Shape 2	10	10	50	60

Table 5 Average values of  $\sigma_{22}$  over the cross-section of mask layer.

		Sha	Shape 2		
b (nm)	10	15	23	31	10
Ave. of $\sigma_{22}$ (MPa)	1002.4	1003.3	1004.6	1006.1	1000.6

Fig.7(b)-(d)の応力分布に注目すると、各応力( $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$ ,  $\sigma_{23}$ ) ともに無視できない大きさの応力が作用していることがわかる. 特に、Fig.7(b)の形状 1 では、両側のリッジ壁に大きな引張応力 $\sigma_{22}$  が作用している一方で、それらとバランスを保つように内部では圧縮応力 $\sigma_{22}$  が広域に分布している. このような特殊な応力分布の状態は真性応力特有の現象といえ、体積膨張しようとするマスク層の底面を誘電体層上面に強

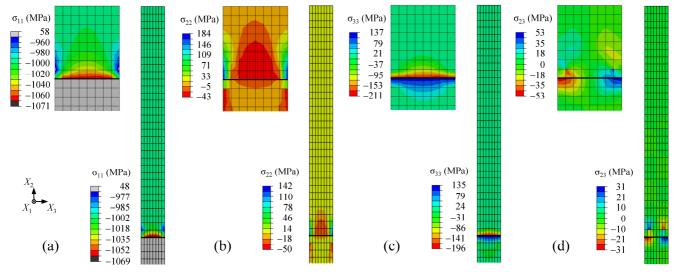


Fig. 7 Stress distribution of the cross section of Shape 1 with b = 23 nm (left upper side) and Shape 2 (right side) at the temperature of 1000 °C, which corresponds to applied internal stress ( $\sigma \approx 1000 \text{ MPa}$ ); (a)  $\sigma_{11}$ , (b)  $\sigma_{22}$ , (c)  $\sigma_{33}$  and (d)  $\sigma_{23}$ .

制的に固定する状況を考えることで理解できる。他方,第2章で定式化した2層モデルでは、FVK理論の基礎方程式において応力関数を考慮しないようy方向に一様な応力を仮定した(式(6)参照)。すなわち,2層モデルにはリッジの厚さ方向を考慮しない薄板近似に加えて、マスク層の高さ方向に対する応力分布も考慮しない近似が入っている。この点が Fig.7の形状1のリッジ断面にみられる応力分布と背反する。特に、リッジ内部に分布する  $X_2$  方向の圧縮応力は、柱のオイラー座屈のような因子として系の座屈点に影響を与えると考えられる。同様に形状2においても $X_1$  方向および $X_2$  方向に対して各応力( $\sigma_{22}$ ,  $\sigma_{33}$ ,  $\sigma_{23}$ )が変化しているが、マスク層が十分高いためそれらの応力分布の領域は限定される。ゆえに、系全体でみると座屈応力値に影響を与える因子にはならない。

# 5. 結 言

本研究では、半導体微細パターン材の面外うねり座屈を対象として、FVKの平板の大たわみ理論に基づく2層モデルの理論解とFEMモデルの数値解とを比較することで、2層モデルにおける薄板近似と一様な真性応力の圧縮作用に関する2つの仮定が座屈応力に及ぼす影響を検討した.

はじめに、FVK の基礎方程式に対して一様な真性応力が作用していることを仮定すると、応力関数の平面応力問題に関する方程式が無視できることを示した。そして、その仮定の下で2層モデルの基礎方程式を定式化し、系の座屈点として無次元化座屈荷重と波数を探索する問題を導出した。

次に、真性応力を熱膨張によって生じる熱応力の形で表現した FEM モデルを構築し、C3D8 要素と C3D8I 要素を用いた2種類の要素分割から微細パターン材の座屈固有値解析を実施した。解析結果より、C3D8 要素ではせん断ロッキングが起こり、C3D8I 要素よりも高い座屈応力が生じることがわかった。一方、2層モデルと C3D8I 要素の FEM 解析を比較したところ、マスク層と誘電体層の両層にて薄板近似が十分成立する形状では、理論解と数値解がよく一致した。しかし、リッジ幅に対してマスク層が薄い、すなわちアスペクト比が小さい形状では理論解と数値解が一致しないことをわかった。そして、座屈応力値を低下させる因子として、リッジの厚さ方向の応力分布に加えて、高さ方向の応力分布の影響が大きいことを明らかにした。

得られた知見は、真性応力に起因する半導体微細パターン材の座屈予測の高精度化を進めるとともに、ナノ・マイクロスケールにみられるような極度なアスペクト比をもつ微細構造に対して連続体モデルとして適用可能な範囲を検討できる有用な情報であると考える.

# 謝 辞

本研究は、科学研究費補助金の若手研究(A)(25709001)の助成により行われたものであり、ここに記して謝意を表する.

#### 参考文献

 2015 International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2015, http://www.semiconductors.org/main/2015\_

- international\_technology\_roadmap\_for\_semiconductors\_itrs/, last accessed September 2016.
- (2) M. Darnon, T. Chevolleau, O. Joubert, S. Maitrejean, J.C. Barbe, J. Torres: Undulation of sub-100 nm porous dielectric structures: A mechanical analysis, Appl. Phys. Lett., 91(2007), p.194103.
- (3) N. Possémé, T. David, T. Chevolleau, M. Darnon, Ph. Brun, M. Guillermet, J.P. Oddou, S. Barnola, F. Bailly, R. Bouyssou, J. Ducote, R. Hurand, C. Vérove, O. Joubert: Porous SiOCH integration: Etch challenges with a trench first metal hard mask approach, ECS Trans., 34(2011), pp.389–394.
- (4) B.W. Sheldon, A. Rajamani, A. Bhandari, E. Chason, S.K. Hong, R. Beresford: Competition between tensile and compressive stress mechanisms during Volmer-Weber growth of aluminum nitride films, J. Appl. Phys., 98(2005), 043509: 1–9.
- (5) R.W. Hoffman: Stresses in thin films: The relevance of grain boundaries and impurities, Thin Solid Films, 34(1976), pp. 185–190.
- (6) K. Cholevas, N. Liosatos, A.E. Romanov, M. Zaiser, E.C. Aifantis: Misfit dislocation patterning in thin films, Phys. Status Solidi B, 209(1998), pp.295–304.
- (7) E. Johlin, N. Tabet, S. Castro-Galnares, A. Abdallah, M.I. Bertoni, T. Asafa, J.C. Grossman, S. Said, T. Buonassisi: Structural origins of intrinsic stress in amorphous silicon thin films, Phys. Rev. B, 85(2012), p.075202.
- (8) H. Tanaka, T. Hidaka, S. Izumi and S. Sakai: Onset of wiggling in a microscopic patterned structure induced by intrinsic stress during the dry etching process, J. Appl. Mech., 81(2014), 091009: 1–8.
- (9) 田中展, 井上優, 高本聡, 波田野明日可, 泉聡志: 分子動力学法を用いた半導体微細パターン材のアモルファスシリコン層における酸化膜形成解析と真性応力評価, 材料, 75(2016), pp.127–134.
- (10) 泉聡志, 酒井信介: 理論と実務がつながる 実践有限要素法シミュレーション―汎用コードで正しい結果を得るための実践的知識, 2010, 森北出版.
- (11) R.A. Van Gorder: Analytical method for the construction of solutions to the Föppl-von Kármán equations governing deflections of a thin flat plate, Int. J. Nonlinear Mech., 47(2006), pp.1-6.
- (12) 半谷裕彦: 平板構造シリーズ1 平板の基礎理論, 1995, 彰国社.