

GRRM プログラムの半導体製造プロセスへの応用

(東京エレクトロン テクノロジーソリューションズ株式会社) 加藤 大輝

taiki.kato@tel.com

半導体はパソコンやスマートフォンなどの頭脳として機能する微細な電子回路である。この回路をシリコン基板に作るためには、配線の元となる金属・絶縁物を基板表面上に堆積する成膜プロセス、写真の原理で回路をマスクングする露光・現像プロセス、プラズマイオン衝撃により回路を切削加工するエッチングプロセスなどが必要である。成膜プロセスでは原子層堆積と呼ばれる技術が重要である。この技術は、前駆体ガスが気相分解せず表面反応のみを起こすことを前提としている。

本研究では GRRM プログラム^[1]を用いて、SiC 原子層堆積の候補物質である $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiH}_3$ (ビニルシラン)・ $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiCl}_3$ (トリクロロビニルシラン) の気相分解反応性を解析した。各分子に対し、単分子解離経路は ADDF、二分子会合経路は MC-AFIR を適用した。その結果、いずれの反応経路網でも $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiH}_3$ の方が $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiCl}_3$ よりも反応性が高いことがわかった。このことから、気相での反応不活性を前提とする SiC 原子層堆積には $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiCl}_3$ が適していることが明らかとなった。この GRRM 計算の際、探索反応経路数・計算時間は、従来の手動探索よりも効率的に行われた。例えば、 $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiH}_3$ の会合反応経路探索では、手動で 1 経路 (14 日)、GRRM で 16 経路 (4 日) である。講演では上記解析の詳細に加えて、他の半導体製造プロセスへの GRRM 応用事例についても紹介する。

[1] S. Maeda, Y. Harabuchi, Y. Osada, T. Taketsugu, K. Morokuma, K. Ohno, GRRM14, see http://grm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM/index_e.html (accessed date: August 19, 2017).

Association Paths Search — $\text{H}_2\text{C}=\text{CH}-\text{SiH}_3$

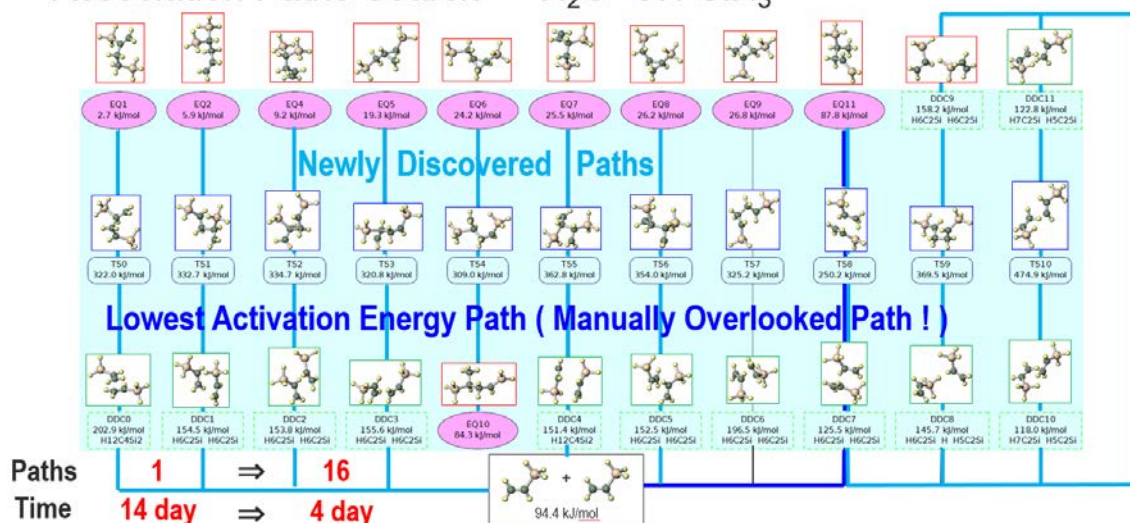


図 1. GRRM によるビニルシラン分子の気相会合反応解析 (MC-AFIR : B3LYP/6-31G**)