

シリカ砥粒を用いた α - Al_2O_3 基板の化学機械研磨メカニズム の第一原理計算による検討

First-Principles Investigation on Chemical Mechanical Polishing Mechanism of α - Al_2O_3 Substrate by Silica Abrasive Grain

東北大院工 ○尾澤 伸樹, 周 康, 會澤 豪大, 樋口 祐次, 久保 百司

Tohoku Univ. ○Nobuki Ozawa, Kang Zhou, Takehiro Aizawa, Yuji Higuchi, Momoji Kubo

E-mail: nobuki.ozawa@rift.mech.tohoku.ac.jp

窒化ガリウムの高品質化のためには, 成長基板となる単結晶サファイア (α - Al_2O_3) の原子レベルでの平坦化が強く求められている。しかし, サファイア基板を平坦化させる研磨加工には長い時間がかかるため, 研磨砥粒の性能を向上させる必要がある。そのため, サファイア基板の化学機械研磨プロセスを解明し, 高い研磨性能を有する新規砥粒を理論的に設計することが強く求められている。そこで, 本研究では SiO_2 砥粒によるサファイア基板の研磨プロセスを解明するために, 第一原理計算手法を用いて SiO_2 砥粒による単結晶サファイアの CMP プロセスについて検討を行った。

シリカ砥粒とサファイア基板との反応プロセスを明らかにするために, 第一原理計算を用いて, α - Al_2O_3 (0001) 面のステップ部分への SiO_2 砥粒の押し込み過程について検討した。水環境ではシリカ砥粒の表面は OH 終端されていると考えられることから, シリカ砥粒として $\text{Si}(\text{OH})_4$ クラスタを用い, 基板としては OH 終端した α - Al_2O_3 (0001) 面を用いた。また, 実験的に α - Al_2O_3 基板の研磨は表面のステップ部分から進行することがわかっていることから, 本研究では Fig. 1 のようなステップを有する α - Al_2O_3 (0001) 面モデルを採用し, ステップ部分の O 原子と $\text{Si}(\text{OH})_4$ クラスタの Si 原子が反応するように砥粒を押し込み, 構造最適化計算を行った。 $\text{Si}(\text{OH})_4$ クラスタを押し込んだ距離に対するステップ部分の Al-O 結合長の変化を Fig. 2 に示す。 $\text{Si}(\text{OH})_4$ クラスタによる押し込みの結果, Al-O 結合①においてその結合長が 1.92 Å から 2.46 Å にまで大きく伸長し解離する様子が明らかにされた。一方で, Al-O 結合②は 1.76 Å から 2.03 Å, Al-O 結合③は 1.89 Å から 1.93 Å まで伸張した。これは, 押し込み過程における $\text{Si}(\text{OH})_4$ との化学反応によって Al-O 結合が弱まり, Al-O 結合長が伸張

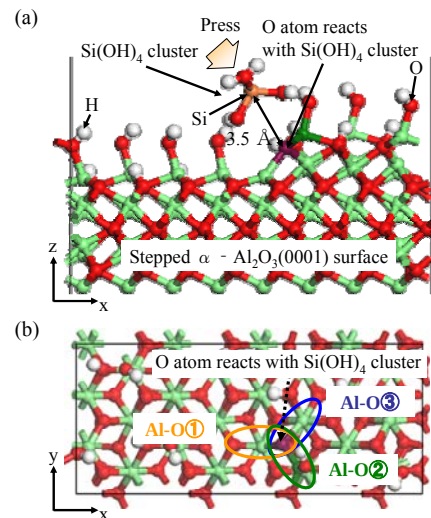


Fig. 1 Simulation model for polishing of a hydrated stepped α - Al_2O_3 (0001) surface by a $\text{Si}(\text{OH})_4$ cluster. (a) side view (b) top view.

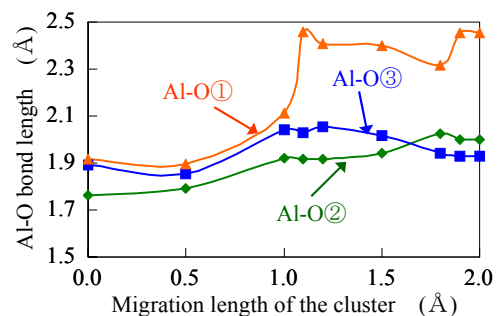


Fig. 2 Change in the Al-O bond length of the α - Al_2O_3 (0001) surface during the press process by a $\text{Si}(\text{OH})_4$ cluster.

したことを示している。

また, 経験的に水が存在しないとサファイア基板を研磨できないことが知られている。そこで, α - Al_2O_3 基板の研磨過程において, 水が果たす役割についても第一原理計算によって明らかにした。詳細については, 当日報告する。