

分子動力学法によるシリコン酸化膜へのシリカ砥粒付着挙動解析

Analysis of adhesion behavior of a silica abrasive grain to silicon oxide film by molecular dynamics simulations

荏原製作所¹, 慶應大理工² ○増谷 浩一¹, 大淵 真志¹, 濱田 聡美¹,
三上 益弘², 高東 智佳子¹

Ebara Corp.¹, Keio Univ.², Koichi MASUYA¹, Masashi OBUCHI¹, Satomi HAMADA¹,
Masuhiro MIKAMI², Chikako TAKATO¹

E-mail: masuya.koichi@ebara.com

【はじめに】CMP 装置における研磨後洗浄の技術開発を効率的に進めるために、水溶液中におけるシリコンウェーハ酸化膜へのシリカ砥粒の付着挙動を評価する事は重要である。水溶液中における微小粒子の分散・凝集の理論としては DLVO 理論が古くから用いられているが、物体表面同士が接触している状態を扱うことができない問題がある[1]。そこで本研究では、原子の運動を直接シミュレーションする分子動力学法によって、砥粒とウェーハの接触も考慮した付着挙動の評価を目的とする。

【計算方法】分子動力学法を用いて、砥粒とウェーハ酸化膜の表面間距離に対する自由エネルギーを計算し、付着挙動を評価する。Fig.1 に分子動力学法で用いた分子モデルを示す。分子動力学法のソルバーとして LAMMPS[2]を用い、力場として ReaxFF を用いた。自由エネルギーの計算にはアンブレラサンプリングおよび WHAM を用いた。

【計算結果】Fig.2 に砥粒とウェーハ酸化膜の表面間距離に対する自由エネルギー (PMF) を示す。ウェーハ近傍では自由エネルギーが高くなり、砥粒が接触による反発力を受ける様子が再現できた。また、自由エネルギーは酸化膜から 0.6 nm 付近で極小値を持ち砥粒はウェーハ酸化膜上で安定位置を持つこと、および安定位置より遠方では弱い引力を受ける事がわかった。

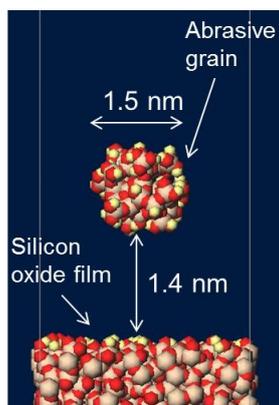


Fig.1 The molecular model. Water molecules are not shown.
(Red : Oxygen, Yellow : Hydrogen, Beige : Silicon)

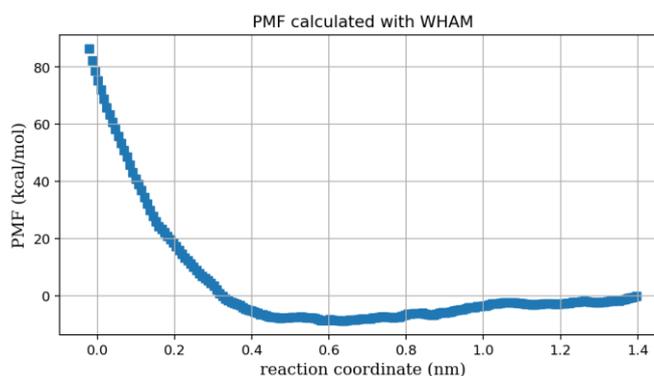


Fig.2 PMF along the reaction coordinate. The reaction coordinate is defined as the distance from the silicon oxide film surface in the z-axis direction.

【参考文献】 [1] 増谷他, 精密工学会春季大会(2018).

[2] S. Plimpton, J. Comp. Phys., 117, 1-19 (1995), <http://lammps.sandia.gov>.