ALD プロセス開発の課題とデータサイエンスへの期待

Challenges for ALD process development and expectations for data science

東大院工　°霜垣 幸浩

The Univ. Tokyo, °Yukihiro Shimogaki

E-mail: shimo@dpe.mm.t.u-tokyo.ac.jp

原子層成長（Atomic Layer Deposition，ALD）プロセスは，その原理に従えば，１サイクルで１モノレイヤーの薄膜成長が期待でき，温度や原料供給濃度に多少のふらつきがあっても，成長膜厚に変化はないので，精密な膜厚制御と再現性が期待できる。このことが，MOS トランジスタの高誘電率ゲート絶縁膜形成において, ALD を採用する動機となっていることは間違いない。また，段差被覆性に関しても，充分な時間をかければ，原理的にはアスペクト比が 1000 を超えるような構造にも均一に製膜できるため，DRAM キャパシタなどの 3 次元立体構造への製膜技術としても採用されている。さらに近年は，各種ガスバリアコーティングやマルチリソグラフィー用マスク材料など，幅広い応用が期待されている。また，ALD の逆反応として，１原子層ずつエッチングを行う ALE（Atomic Layer Etching）も，その選択性などから注目されている。

このような原子層プロセス（Atomic Layer Process，ALP）を最適に設計するには，原料ガスの吸着や反応ガスの表面反応に関する知見が重要である。ALD は気相反応の影響を考慮しなくて良いプロセスなので，実験的にも計算機科学的にも扱いやすい系である。各種その場観察や表面化学反応に関する量子化学計算などを活用して，上記の表面プロセスに関する知見が蓄積されることを期待したい。そのために留意すべき課題について，本講演で取り上げたい。

特に，新規原料ガス・反応ガスの開発にあたっては，計算機科学に対する期待は大きい。しかし，現状のコンピュータパワーでは，できることに限界がある。例えば，表面を再現するために，クラスターモデルが良く用いられるが，コンピュータコストを考慮すると 100 原子くらいで表面を模したクラスターを構成し，その上での反応を検討することが現実的である。このときの表面吸着サイトは 10〜20 くらいでしかなく，１分子が吸着しただけで 5〜10%の表面被覆率に相当する。実際の CVD プロセスでは 1%以下の添加ガスが製膜に大きな影響を与えることもあり，せめて 100 吸着サイトを再現できるような環境で，各種反応素過程の検討ができればと思われることもある。ただし，吸着サイトが 10 しか無いようなクラスターモデルでの検討であっても，プロセス最適設計に有用な知見は得られるので，現状の量子化学計算によるアプローチを否定するものではない。

本講演では，上記の観点から，実験的解析と計算機科学をうまく援用するデータサイエンスへの期待を述べたいと思う。

© 2019年 応用物理学会