

平成23年度戦略的基盤技術高度化支援事業

「次世代パワーデバイス向け革新的手法を用いた成膜技術の開発」

研究開発成果等報告書

平成25年 1月

委託者 関東経済産業局

委託先 株式会社さがみはら産業創造センター

目次

	ページ
第1章 研究開発の概要	2
1-1 研究開発の背景・研究目的および目標	2
1-2 研究体制	7
1-3 成果概要	11
1-4 当該研究開発の連絡窓口	13
第2章 装置開発	14
第3章 材料開発	16
第4章 成膜条件最適化	17
第5章 準量産機用試作機検討	20
第6章 全体総括	25

第1章 研究開発の概要

1-1 研究開発の背景・研究目的および目標

パワーエレクトロニクスによる電力制御技術を通じた地球環境対策、電力消費削減対策が注目されている。特に自動車(電気自動車 (EV)、ハイブリッド自動車 (HEV))、IT/CPU 電源、汎用インバーター、鉄道を始め様々な分野への導入により広範な効果が期待されている。

しかし、これら EV や HEV を駆動するインバーターIC には、低損失、高耐圧、高温動作可能を必要としており、現在用いられているシリコン(Si)の物性限界をはるかに凌ぐ物性値をもつ、シリコンカーバイド(SiC)を用いた IC の開発が進められている。SiC 基板においては世界の 90%以上を米国 Cree 社がほぼ独占供給しており、あらゆる産業用国内需要において、そのほとんどを Si ウェハの数十倍という高価な価格で海外からの輸入に頼っている。

SiC 単結晶基板作製技術は、基板成長や製作工程が特許やノウハウで守られており、同様あるいはそれ以上の性能を示す成膜プロセスを新たに簡単に見出すことが困難であることに他ならない。日本国内においても豊田中央研究所やデンソーでは RAF 法(Repeated a-Face 成長法)を用いた成膜方法にて非常に高品位な SiC 基板の結晶成長ができていますが、大口径化や低コスト化、さらなる高品質化が求められている。

当該研究開発では既存法に比べ、低温でありながら高品質に SiC 基板および単結晶膜を作成する新しい成膜手法を用いることにより、省エネルギーおよび生産コストの低減を目標とする。

従来技術では、一般にパワーデバイス用 SiC 単結晶基板は 1500℃を超え 2000℃近い温度での昇華法を用いた成膜が行われており、欠陥を限りなく少なく単結晶を得る為に、基板最表面に付着した核を種結晶まで移動させるマイグレーションエネルギーが必要であるが、そのエネルギーを得る為に 1500℃以上の高温が必要とされている。

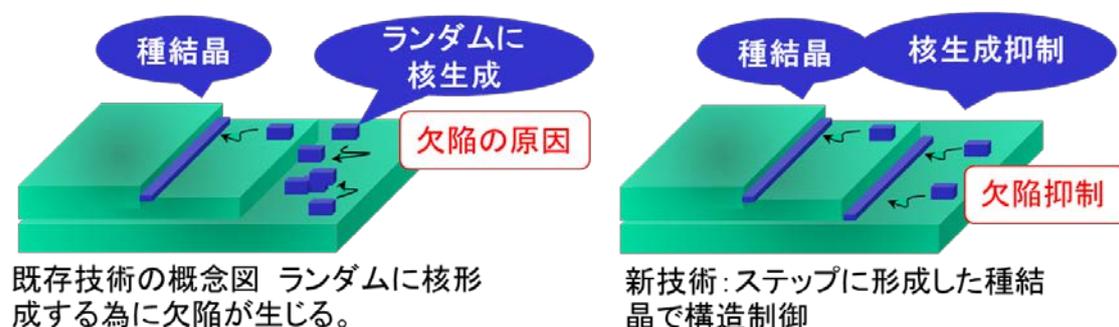


図1-1 核生成と成膜のメカニズム

このような高温においても装置としての強度や不純物拡散等を生じない工夫が必要であるために、部材に係る費用は非常に大きい。更に高温を維持するための熱源としての電力はもとより、長時間の成膜では高温下での真空維持等その製造コストは極めて高価であり、装置メンテナンスは非常に短い周期で行う必要がある。そこで我々は次に示す様な予備実験結果やシミュレーションソフトを用いた計算機実験を行い、それぞれ結果は上記課題解決の可能性を十分に示唆していると考えた。

【今までの予備実験での成果】

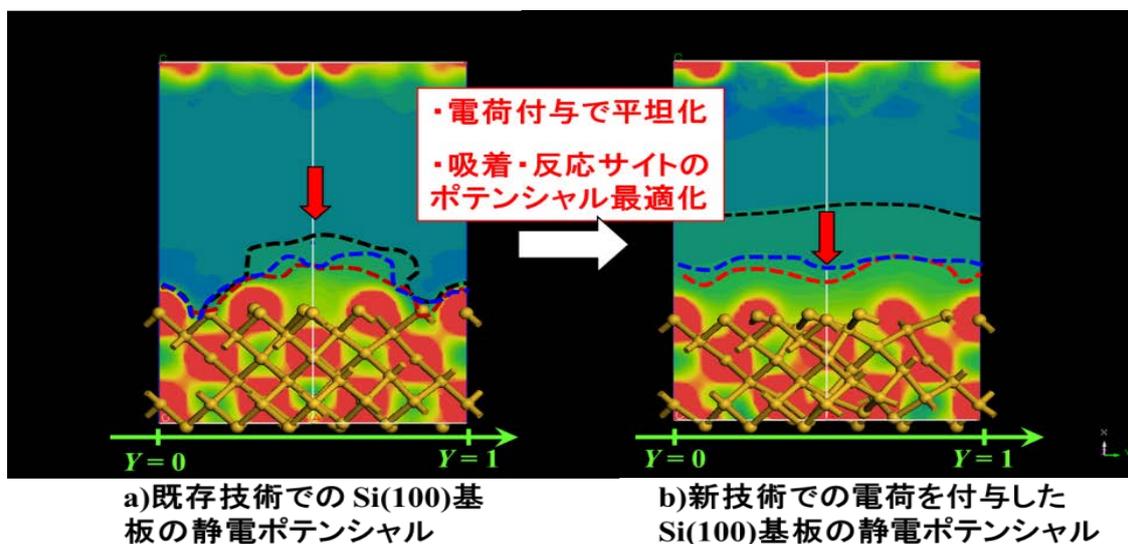
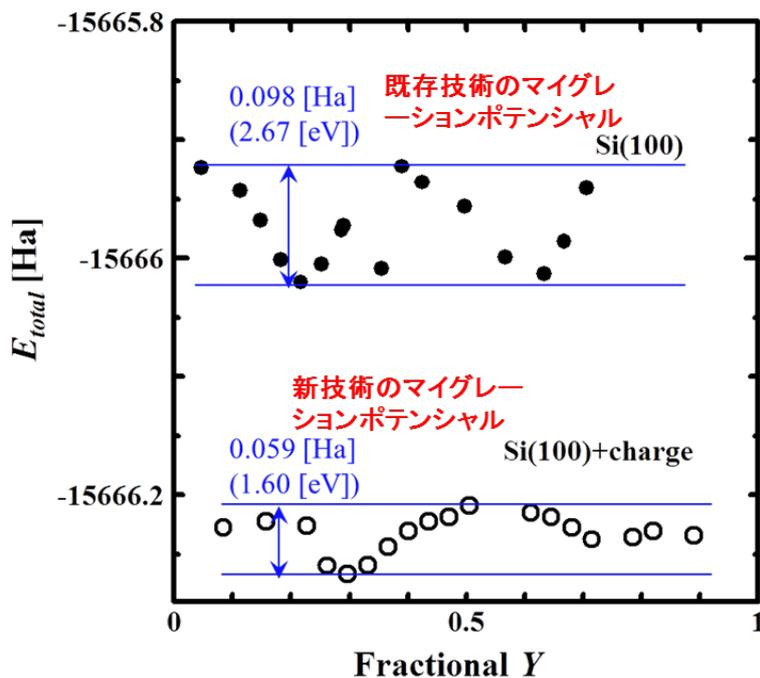


図 1-2 マイグレーションポテンシャル

我々の第一原理計算を用いたシミュレーション実験でも既存技術の状態ではマイグレーションポテンシャルが大きく、活性種がランダムに核生成する可能性を示唆している（図 1-1）。対して電荷を付与することによりこのマイグレーションポテンシャルは平坦になり活性種の移動は容易になる（図 1-2 右：新技術の表面状態）。通常の熱 CVD ではこの右図の状態を高熱により得ている為、1600°C 以上 2000°C 近い高温が必要である。SiC の基本骨格となる Si 上でのマイグレーションポテンシャルの第一原理計算では電荷付与により 1 eV 程度の低下がみられ活性種の基板表面移動が容易になったことがわかる（図 1-3）。

これを検証する為に実際に GaSe 結晶の成長を基板への電荷付与の有無で比較したところ、100°C 以上低温化した状態でも結集性は 2.5 倍に増加し、表面粗度も平坦化することができた（図 1-4）。

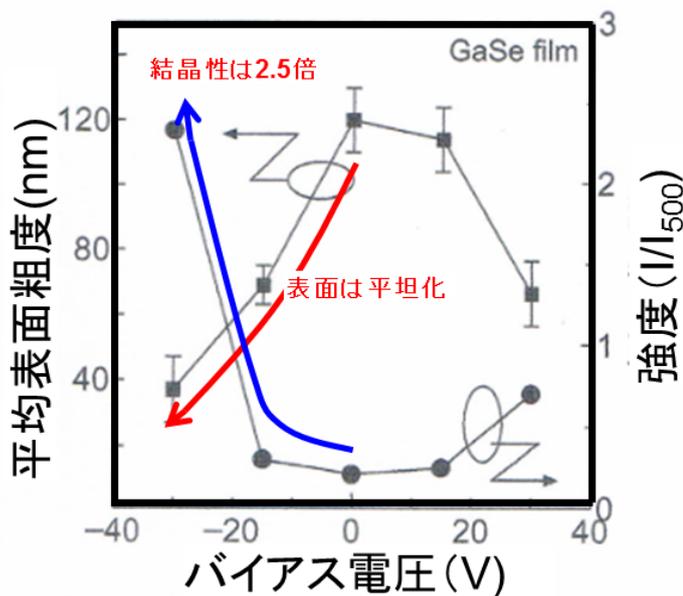
低温化することおよび基板へのバイアス印加により用いられる原料の成膜寄与率が増大する（基板への付着確率増大）、とともに、大口径化、高品質化が容易になり、低コスト化が可能となる。原料ガスの単位時間当たりの投入量を抑えた成膜が可能となる為、装置内にたまるデポ物やダストのクリーニング頻度やこれらに起因する装置トラブル頻度も低減でき、装置ランニングコストを大幅に低減できる。



Si上メチルのマイグレーションポテンシャル

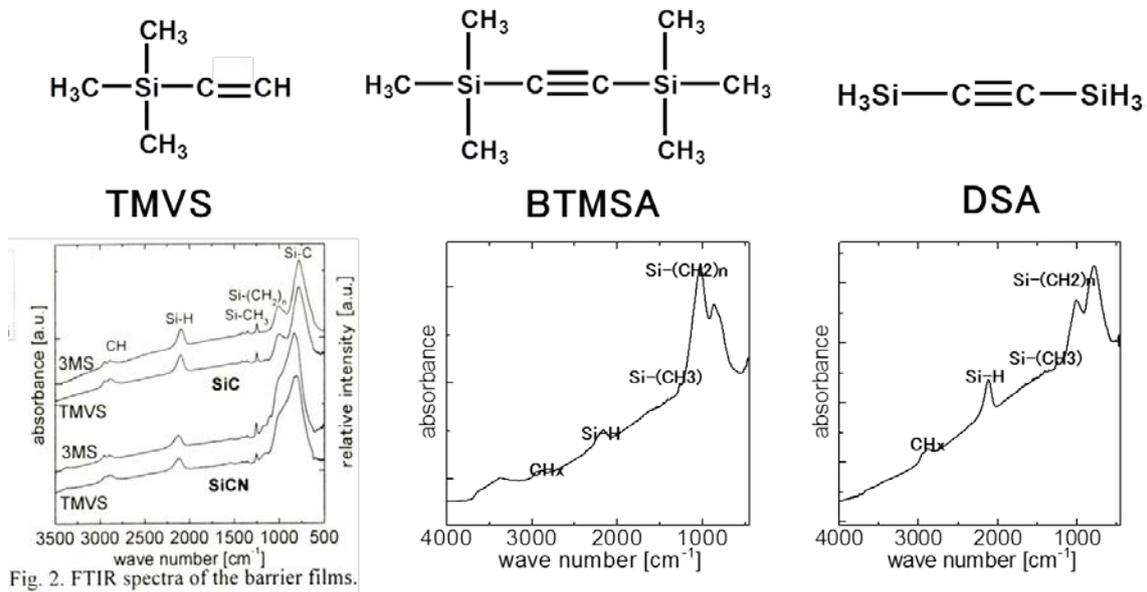
図1-3 マイグレーションポテンシャル

また弊社では CVD 用材料ガスの開発およびその成膜試験を社内で行っており、独自の開発および多くの大手川下製造業者より受託開発を受けている。熱 CVD における低温化については特に多くの要望があり、その中で化合物設計ノウハウを得ている。例えばプラチナ (Pt)、ニッケル (Ni)、コバルト (Co) は 140°Cでの熱 CVD に成功し、SiC 用材料については非常に反応性の強い化合物の合成および成膜に成功している。



500°Cバイアスなし条件を1とした場合の結晶性評価

図1-4 バイアスによる結晶性向上



3MSよりも高信頼性化

官能基変更で膜中の組成変化

水分吸着量の変化

図 1-5 官能基の違いによる膜組成の変化

プラズマ CVD にてアモルファス SiC を成膜するプロセスにおいて、一般的に用いられるトリメチルシラン (3MS : 図 1-6) と比較して、Si に結合した H をビニル基に変更したトリメチル新規 CVD 用化合物 AVSS を用いた場合、膜中に含まれる Si-(CH₂)基の含有量が増加し、デバイスとしての信頼性が向上するという報告があった。我々はこの報告を更に押し進め、より積極的に Si-(CH₂)を多く含むシリコンプリカーサーの開発を行い、実際に成膜試験を

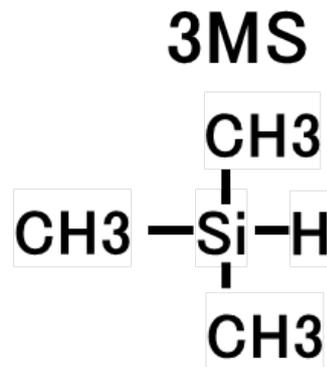


図 1-6 3MS の構造

行った。その結果ビストリメチルシリルアセチレン (BTMSA) を用いた場合、基本骨格である Si-C よりも Si-(CH₂)基を多く含む SiC 構造を得ることができた。膜密度も積極的にカーボンを導入したことから非常に低く、低誘電率 SiC を開発した。この結果とは対照的に同構造からメチル基を除害し水素に置換したジシリルアセチレン (DSA) を用いたところ、Si-(CH₂)基は BTMSA と比較すると少ないものの、通常用いる 3MS や TMVS よりはるかに多い Si(CH₂)基を含んだ SiC 膜を得た。この SiC 膜は膜密度も高く、低誘電率を示すことはなかったが通常のプラズマ CVD を行う基板温度の 350°C でプラズマソースパワーも 50W という非常に低エネルギー状態においても高密度な膜を得て

いることから DSA そのものが反応性が高く、基板表面での反応を促進したと考えるに至った。プラズマ CVD のような解離した化合物が平衡状態で遷移することの無い環境下においても上記のようなプリカーサー分子の構造を設計することによって、成膜後の構造の違いを意図的に出すことができるという結果を見出したことは画期的であった。

このような第一原理計算を用いた構造構築および成膜プロセス考案に関するノウハウと、用いる化合物の構造設計や最適化、その合成・精製に関するノウハウの統合を行うと共に、試験的な実験（シミュレーションおよびバイアス印加と温度の関係）により、以下のような性能およびコストの両面から非常に有効な新技術を考案し、最終的な研究開発を行う必要性と事業化の可能性を得た。

表 1 - 1 既存技術と新技術の比較

技術的な特徴	既存技術		新技術
	熱CVD	プラズマCVD	新技術
成膜温度	1600~2000℃必要	低温で可能	1000℃程度まで低減できる
成膜速度	結晶成長速度が遅い。	結晶成長速度が速い。	結晶成長速度が速い。
結晶	○	×	○
バイアス印加	不可	可能(ただしステージ)	可能(基板へ)
・装置コスト ・熱源 ・電源	・高い ・熱源用は直流電源で安価だが、装置のコンタミ対策必要 ・ただし高周波電源は不要	・高い ・直流電源と絶縁対策のみで安価。 ・高周波電源は高価	・安価に抑えられる。 ・熱源は比較的安価。 ・高周波電源は安価なもの
消費電力	高い	高い	比較的低い
製造コスト	高い	中	安価

この新技術を装置化しプロセスを実現するにあたって、概念を以下のように模式化し、既存装置との違いを理解し、装置の各部材や設計を行うことにした。

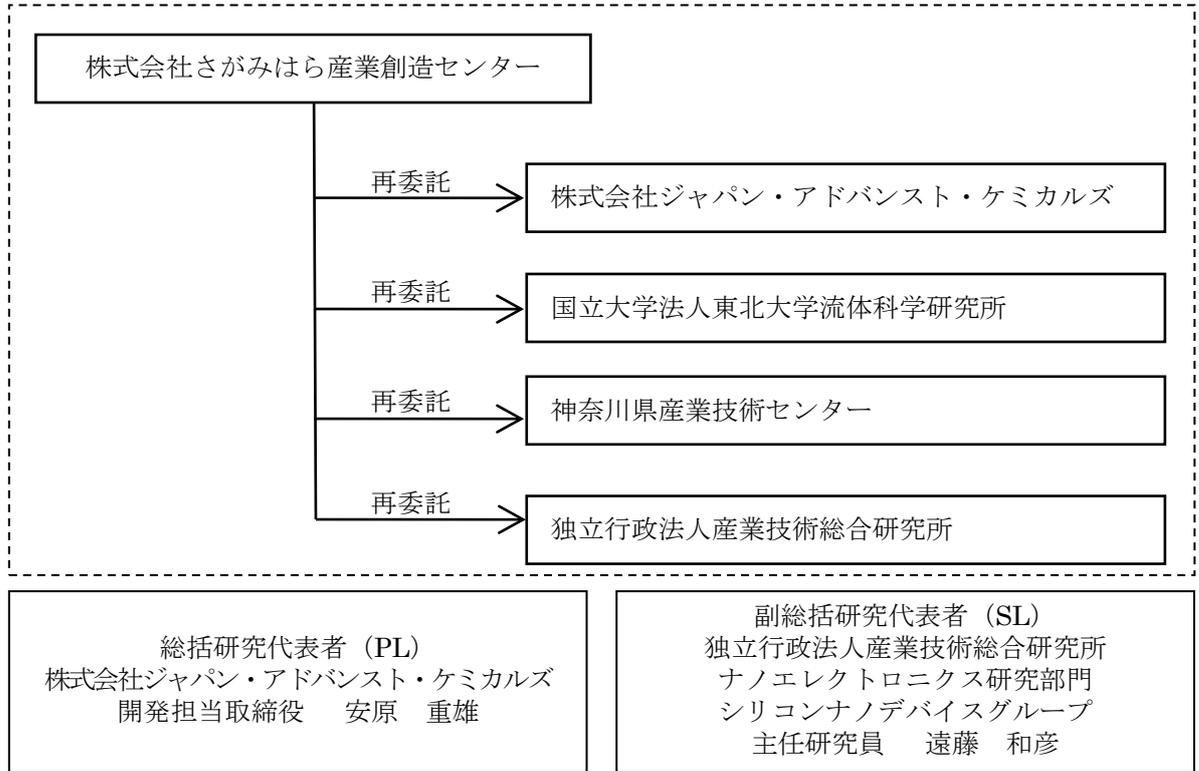
このような概念で装置を開発し、その装置とマッチングする材料開発を合わせて行い、成膜条件の最適化を行い、SiC 単結晶成長を目標とする。最終的には準量産用試験機的设计を行えるだけのノウハウやデータを得る。

1-2 研究体制

研究体制

(1) 研究組織及び管理体制

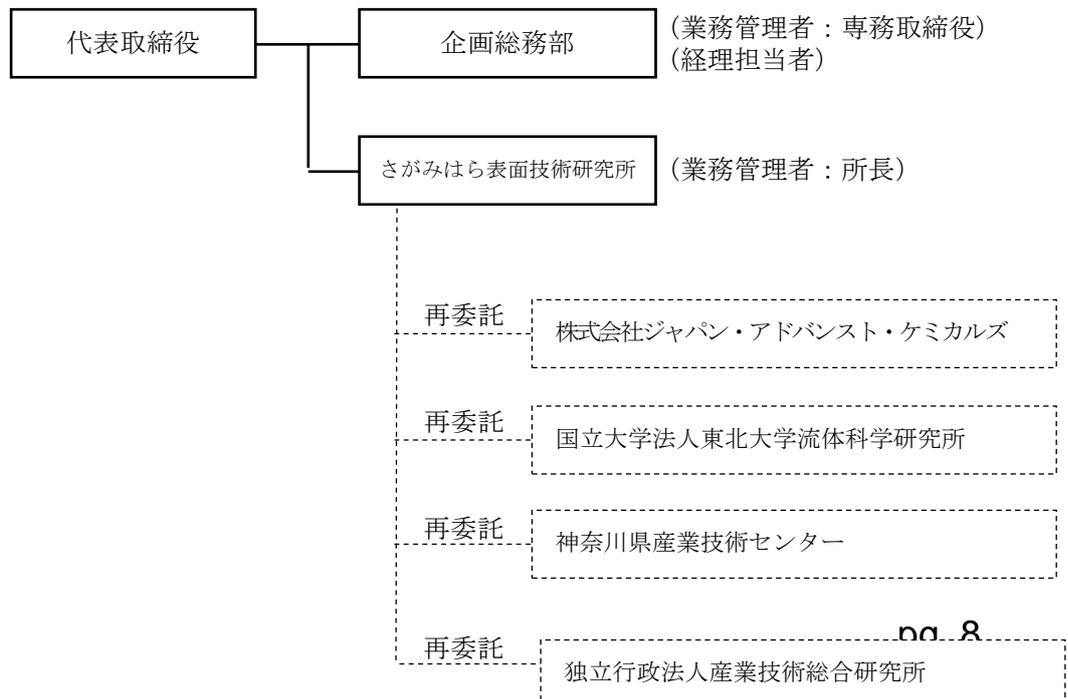
1) 研究組織（全体）



2) 管理体制

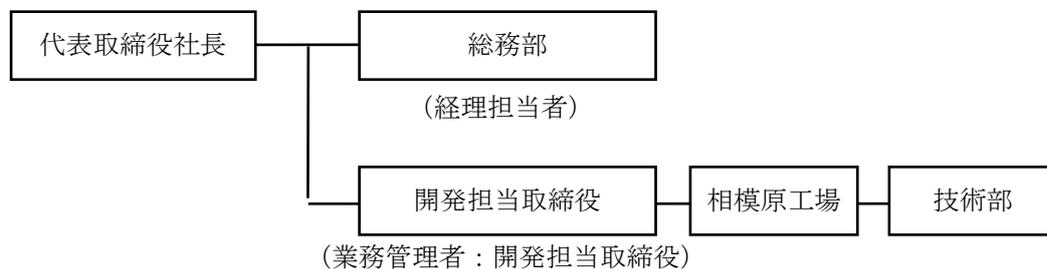
① 事業管理機関

[株式会社さがみはら産業創造センター]

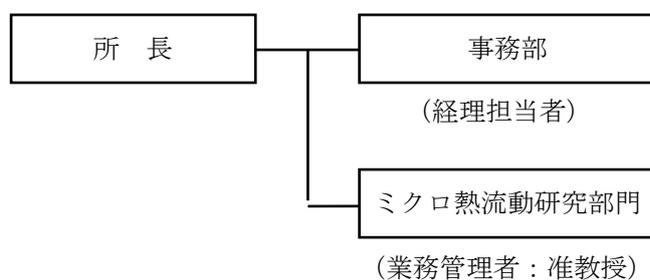


②再委託先

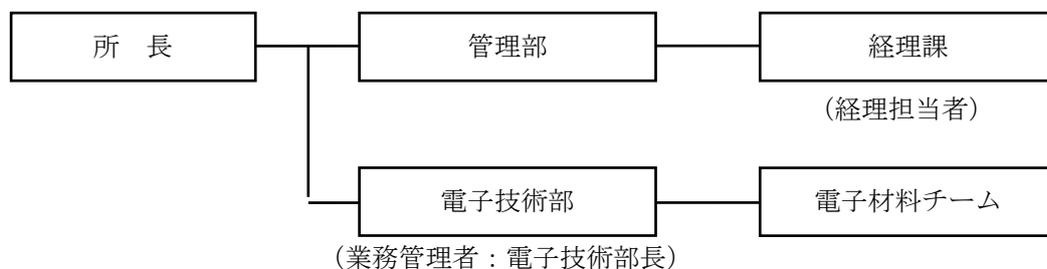
[株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ]



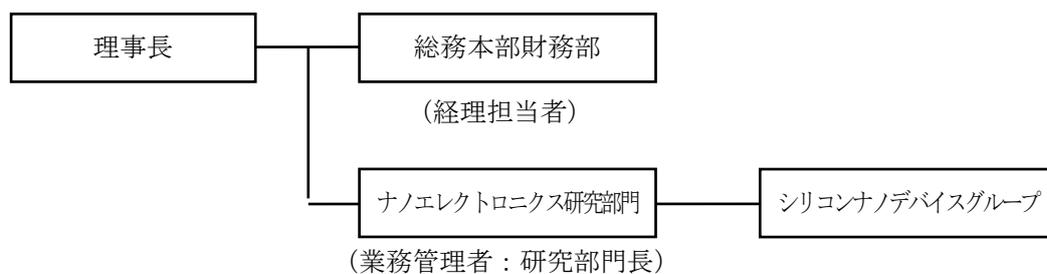
[国立大学法人東北大学流体科学研究所]



[神奈川県産業技術センター]



[独立行政法人産業技術総合研究所]



(2) 管理員及び研究員

【事業管理機関】株式会社さがみはら産業創造センター

①管理員

氏名	所属・役職
山本 満	専務取締役
稲垣 英孝	企画総務部 副部長
相場 美恵子	企画総務部 経理担当
須藤 理枝子	さがみはら表面技術研究所 所長
金澤 知恵	管理業務補助員

②研究員

氏名	所属・役職
須藤 理枝子 (再)	さがみはら表面技術研究所 所長
漢那 憲一	研究開発業務補助員

【再委託先】

(研究員)

株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ

氏名	所属・役職
安原 重雄	開発担当取締役
細川 聡	副社長
野津 定央	相模原工場長
國分 宏	技術部 技術担当
里吉 大二郎	技術部 技術担当
西山 浩也	技術部 技術担当

国立大学法人東北大学流体科学研究所

氏名	所属・役職
徳増 崇	マイクロ熱流動研究部門 准教授

神奈川県産業技術センター

氏名	所属・役職
金子 智	電子技術部 研究員

独立行政法人産業技術総合研究所

氏名	所属・役職
遠藤 和彦	ナノエレクトロニクス研究部門 シリコンナノデバイスグループ 主任研究員

(3) 経理担当者及び業務管理者の所属、氏名

(事業管理機関)

株式会社さがみはら産業創造センター

(経理担当者)	企画総務部	副部長	稲垣 英孝
	企画総務部	経理担当	相場 美恵子
(業務管理者)	専務取締役		山本 満
	さがみはら表面技術研究所	所長	須藤 理枝子

(再委託先)

株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ

(経理担当者)	総務部	経理担当	岡本 央
(業務管理者)		開発担当取締役	安原 重雄

国立大学法人東北大学流体科学研究所

(経理担当者)	事務部	経理係長	鈴木 朋広
(業務管理者)	マイクロ熱流動研究部門	准教授	徳増 崇

神奈川県産業技術センター

(経理担当者)	管理部 経理課経理課	主査	小原 由紀子 齋藤 玲子
---------	------------	----	-----------------

(業務管理者) 電子技術部 部長 日高 直美

独立行政法人産業技術総合研究所

(経理担当者) 総務本部財務部 経理室 経理室長 井佐 好雄
山口 洋二

(業務管理者) ナノエレクトロニクス研究部門 研究部門長 金丸 正剛

(4) 他からの指導・協力者

研究開発推進委員会 委員

氏名	所属・役職	備考
安原 重雄	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 開発担当取締役	PL 委
遠藤 和彦	独立行政法人産業技術総合研究所 ナノエレクトロニクス研究部門 シリコンナノデバイスグループ 主任研究員	SL
須藤 理枝子	株式会社さがみはら産業創造センター さがみはら表面技術研究所 所長	委
細川 聡	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 副社長	委
野津 定央	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 相模原工場長	委
國分 宏	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 技術部 技術担当	委
里吉 大二郎	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 技術部 技術担当	委
西山 浩也	株式会社ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 技術部 技術担当	委
徳増 崇	国立大学法人東北大学流体科学研究所 マイクロ熱流動研究部門 准教授	
金子 智	神奈川県産業技術センター 電子技術部 研究員	
鈴木 孝和	独立行政法人産業技術総合研究所 イノベーション推進本部 産業技術指導員	アドバイザー
松永 範昭	株式会社東芝セミコンダクター&ストレージ社 新規市場開拓プロジェクトチーム 参事	アドバイザー
中田 修	特許業務法人大貫小竹国際特許事務所	アドバイザー

プロジェクト参加企業、事業管理者、学識者等で構成される開発委員会を組織し、プロジェクトの円滑な推進のために開発の進捗状況などを管理し、経済産業省への報告の承認を行った。

1-3 成果概要

各項目の当所設定した目標に対する達成度は以下の通りである。

①「装置開発」

- ・ 1000°Cの加熱に長時間耐える装置開発に成功した。
- ・ 基板表面へのバイアス印加を行える機構を設置することができた。
- ・ 真空チャンバー内で化合物の活性化とイオン化を行なえる機構が機能していることが確認できた。

②「材料開発」

- ・ 各種材料のシミュレーション結果により、SiC 低温成膜用の材料ガスとして「ビニルシラン」が最適であることが判明した。
- ・ この材料の特性評価結果から、当初目標である以下の項目を満たすことが確認できた。
 - 500～1000°Cで有効な活性種を発生させること。
 - DSC 測定時に 200°C以下で熱暴走しないこと。
 - 量産時に 200 円/g 以下であることと。
 - 1年以上の長期保存が可能なこと

③「成膜条件最適化」

- ・ パワーデバイス用 4H-SiC 結晶を膜中に確認することができた。
現状単結晶を得られてはいないが、結晶比率を向上させ欠陥密度を低下させることが今後の課題である。
- ・ 当該研究開発で新規開発材料ガスにより高速成膜を可能にする条件を見出し、数百 nm/min の成膜を実現し目標である 30%短縮を達成した。
- ・ 熱源の集中と高効率化により低コスト・低消費電力な装置構造を確立した。

④「準量産機用試作機検討」

- ・ 上記3課題をすべて満たせる装置・構成部品・材料の選定を終了した。
- ・ 開発した装置は成膜条件最適化の検討とともに改良を重ね、当初の目標を達成できるものとなった。
- ・ 更にシミュレーションによる装置の最適化に関する知見を合わせることで、試作機検討を可能にするとともに、評価を行える環境を整えた。
- ・ 準量産機について、量産規模に応じた柔軟な設計を可能とする基本構造を確立した。

1-4 当該研究開発の連絡窓口

事業管理機関 須藤 理枝子

所属・役職 株式会社さがみはら産業創造センター

さがみはら表面技術研究所所長

住所：神奈川県相模原市中央区上溝 1880-2 SIC3-3114

電話：042-707-9091

総括研究代表者（PL） 安原 重雄

所属・役職 (株)ジャパン・アドバンスト・ケミカルズ 開発担当取締役

住所：神奈川県相模原市中央区田名 3131-4

電話：042-762-3120

副総括研究代表者（SL） 遠藤 和彦

所属・役職 独立行政法人産業技術総合研究所・主任研究員

住所：茨城県つくば市梅園 1-1-1

電話：029-861-3857

第2章 装置開発

1000℃以上の高温で成膜を行う装置に対してウェハーに対する電圧印加を行う必要がある。ウェハー表面に形成されるシース或いは電荷によるマイグレーションポテンシャルの効果をj得る為には、SiC プリカーサーから熱分解により生じる中性ラジカルをイオン化する或いは電子を付与する必要がある。よってその効果が期待できる熱電子放射ユニットを図1のように開発し、装置に設置した。

成膜を繰り返すことによって、加熱用 SiC ヒーターへのデポ物が原因でヒーターの短絡を生じている可能性があることと、ヒーターやヒーター付近へのデポ物そのものの除去を短期間に繰り返すことは製造プロセス上コスト高を招くことから、その原因を取り除くための対策を検討し、差動排気ラインを増設した。

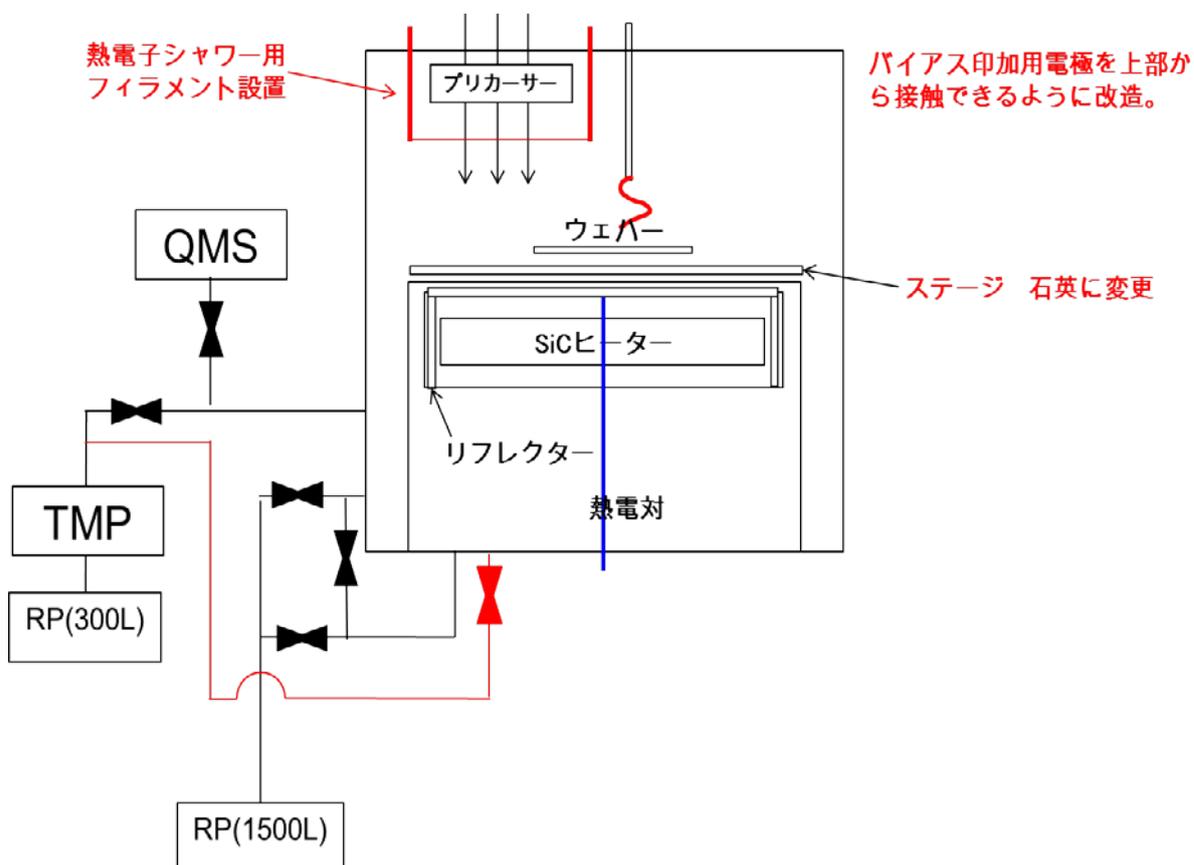


図1 高温高電圧印加成膜装置

高温成膜装置と高バイアス印加

表 1 高電圧印加試験結果

圧力 DC(V) (Torr)	0.01	0.1	0.15	0.25	0.50	1.0	1.5	2.0
+50	○	○	○	○	○	○	○	○
-50	○	○	○	○	○	○	○	○
+100	○	○	○	○	○	○	○	○
-100	○	○	○	○	○	○	○	○
+120	○	○	○	○	○	○	○	○
-120	○	○				○	○	○
+200	○	○	X	X	X	X	X	X
-200	○	○				○		X
+400	○		X	X	X	X	X	X
-400	○					○	○	

高温熱 CVD 装置において、ウェハに外部からの電源を接続し高電圧を印加する試験を行った（表 1）。電圧を上げると、成膜室内の圧力によって放電することが分かる（X は放電）。0.1Torr 以下であれば概ねプラスマイナス 200 ボルトであれば放電しない。1Torr 程度まで圧力が上がるとプラスマイナス 100 ボルト程度までしか印加出来ないことが分かった。また同様な試験を熱電子放射ユニットを通電した状態でも行ったが、放電の有無について差は無かった。

第3章 材料開発

材料ガスの構造計算

一般的に用いられ、もっとも単純な構造をしたモノメチルシラン（1MS）について第一原理計算を用いて各結合エネルギーを計算した（図2）。

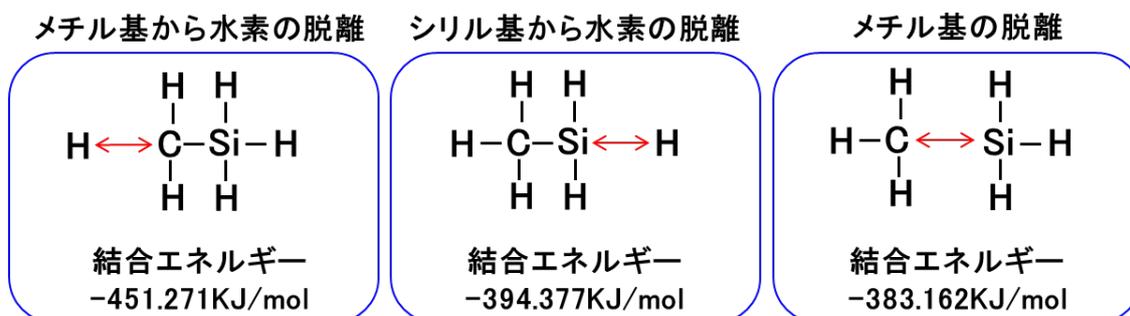


図2 第一原理計算を用いたメチルシランの結合エネルギー

SiC を形成する上でメチルシランから C-H 結合および Si-H 結合が解離し、C-Si ラジカルが出来ることが必要である。或いは CH₃-Si や C-SiH₃ のような解離後の化合物(ラジカル)が生成し、基板に吸着・反応することによって更なる分解が進むというようなメカニズムが必要である。成膜速度向上のためには前者のような C-Si ラジカルが生成するのが望ましい。日々化合物合成を行い、化合物の分解過程を調べている経験からは CH₃-Si ラジカルが生成する可能性が高いと考えた。

だが計算結果からは予想に反して CH₃-SiH₃ の C と Si 結合が最も結合エネルギーが低く最初に切れる結合であることが示唆された。このことから一般的なメチルシラン化合物は SiC 成膜には不適と考えられる。

ここで新規 CVD 用化合物 AVSS が、合成原料の豊富さおよび合成方法の簡便さなどから、メチルシランに次ぐ有望な材料であると考え計算を行った。

計算では想定通り、C-Si 結合よりも Si-H 結合が結合エネルギーが低く、SiC 成膜に必要な C-Si 結合を残すことができるという計算結果を得た。幸いこの新規 CVD 用化合物の合成に係る原料や合成方法において大きな変更はなく、比較的安価な手法を用いることができた。試作試験を繰り返したところ、収率 95%をコンスタントに得た。この場合の製造原価を計算した。

製造価格

現状の原価計算では少量バッチ式合成において、原材料コストがグラム単価 136 円、人件費を含めた製造コストが 250 円/g と出ている。反応が単純である為、量産時の製造コストは原料調達コストを抑制出来ることも合わせると十分 200 円/g での製造が可能と考える。

また比較的低温で成膜出来ていることから明らかではあるが、新規 CVD 用化合物

AVSS 単体での熱反応性を試験したところ、300℃にて急激な熱分解を生じていることを突き止めた。

4章 成膜条件最適化

成膜試験

新規 CVD 用化合物 AVSS をプリカーサーとして 800℃～1100℃における各条件での成膜試験を行った。成膜時のチャンバー圧力は 1.5 Torr 以下で行い、バイアス印加はプラスマイナス 100 ボルト、成膜圧力が 0.1Torr 以下では 200V まで印加した。各成膜条件は以下の通り(表 3)で、膜厚は膜厚測定を行い、最大膜厚を表記した。非常に高速な成膜が出来ていた。

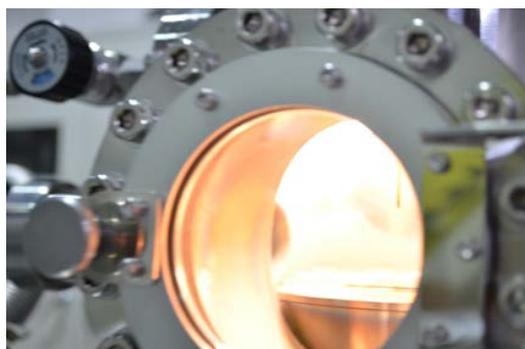


図 3 成膜の様子

表 3 成膜条件

サンプル番号	流量 (sccm)	温度	電圧印加	成膜時間	圧力	膜厚	膜厚速度 (nm/min)
#1	100	900℃	0	5min	0.1Torr	3295nm	659
#2	100	900℃	100V	5min	0.1Torr	2902nm	580
#3	100	900℃	0	5min	0.05Torr	1047nm	209
#4	100	900℃	100V	5min	0.05Torr	1549nm	310
#5	100	1000℃	0	5min	0.05Torr	2323nm	465

Si-H、C-H 等未反応官能基が不純物として含まれていたが、900℃以上の成膜ではこの未反応官能基に関するピークが消滅し SiC のシャープなピークのみを観測した。また 1000 cm⁻¹ 近辺にあったショルダーも消失し、単一の SiC 膜になっていると考えられる。更に 1100℃まで昇温し成膜時の真空度を 4.3x10⁻³Torr まで到達させて成膜を行った。FT-IR の結果を図 4、図 5 に示す。

この高温高真空サンプルにおいて、Si-H や C-H が消失したことを受け、結晶性確認の為に XRD の測定を行ったところ、設定温度 1000℃以上のサンプルで 4 H-SiC の結晶性を確認した(図 6、図 7)。

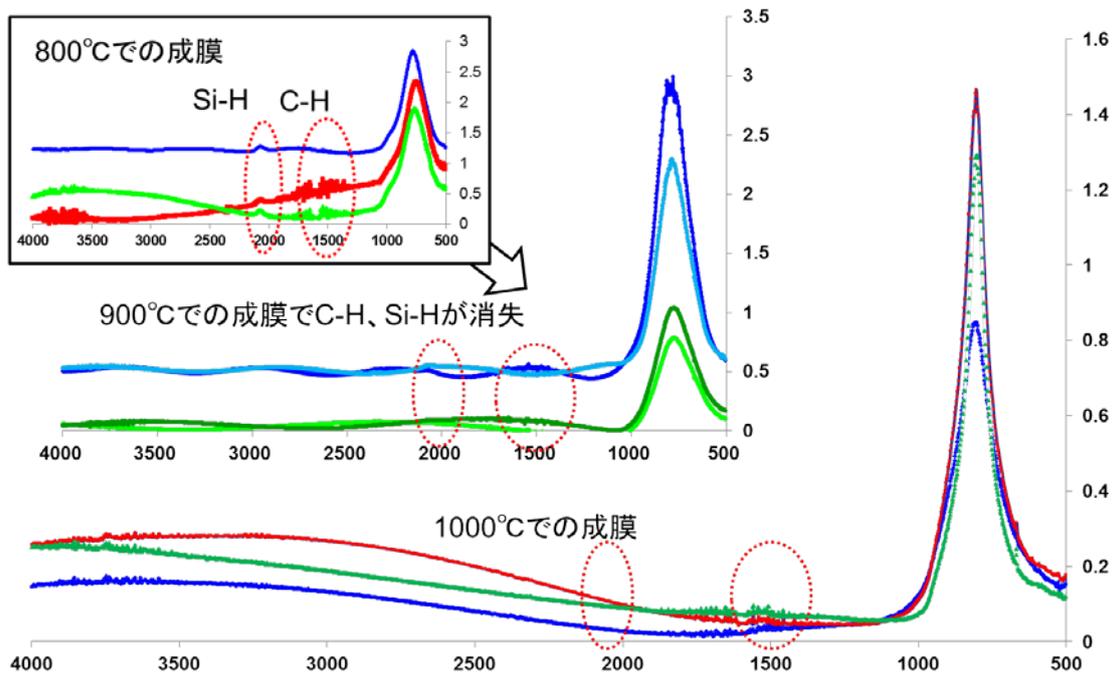


図4 1000°CでのSiC成膜のIRによる組成分析

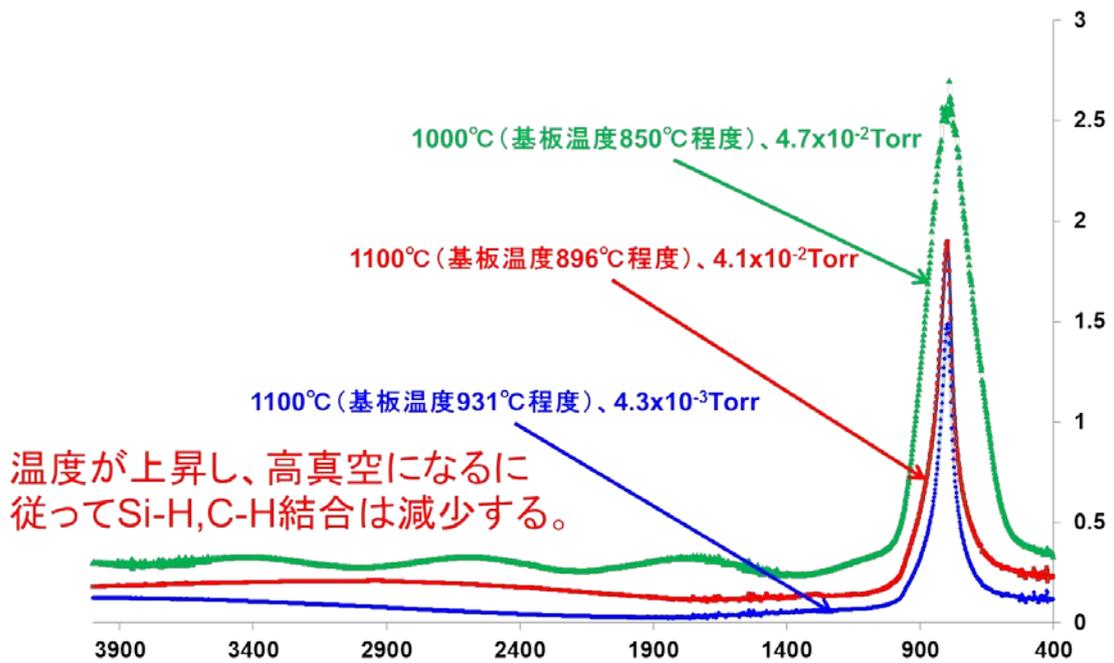
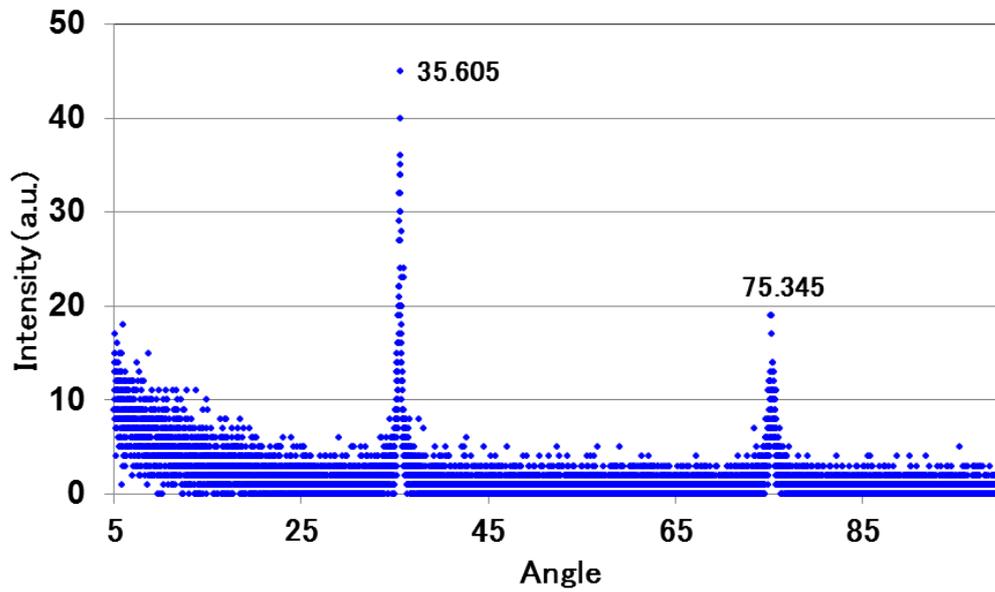


図5 1100°Cでの成膜と高真空化の影響



Si-Crystal社製SiC(4H)基板のXRDスペクトル

図6 市販されている4H-SiCのXRDスペクトル

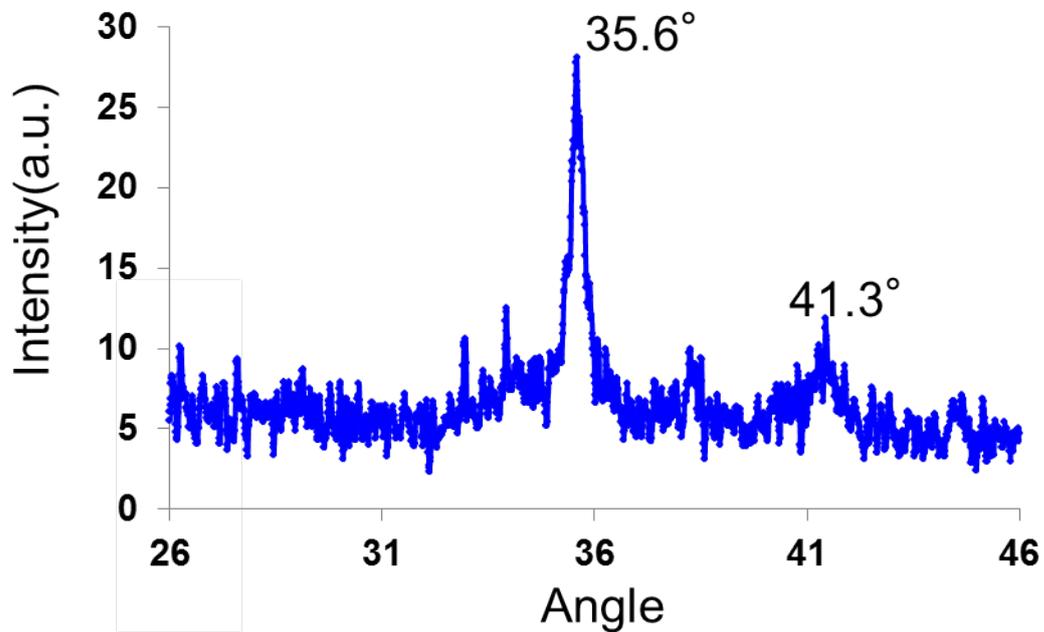


図7 当該研究開発で得たSiC膜のXRDスペクトル

第5章 準量産機用試作機検討
成膜プロセスのシミュレーションについて

Si-C ラジカルを容易に発生することのできる新規 CVD 用化合物 AVSS ガスを見出したが、この化合物は非常に反応性が高く、高温では容易に分解してしまう。また装置コストや装置ランニングコスト低減が今後単結晶基板製造とその事業化には重要であることから、計算による成膜環境試験を行った。まず装置外壁、ガス導入口及び排気ポート等基本データと成膜時のガス流量およびヒーター容量を変数として与えた計算を行った。

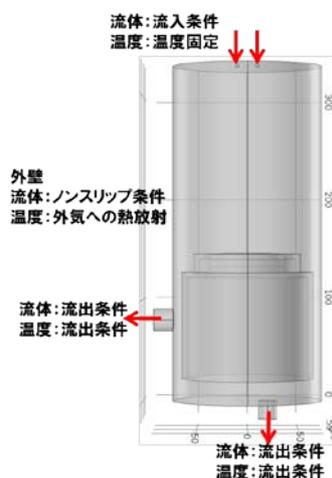


図8 成膜チャンバー内のガス流速計算と熱伝導の予測：基本設計

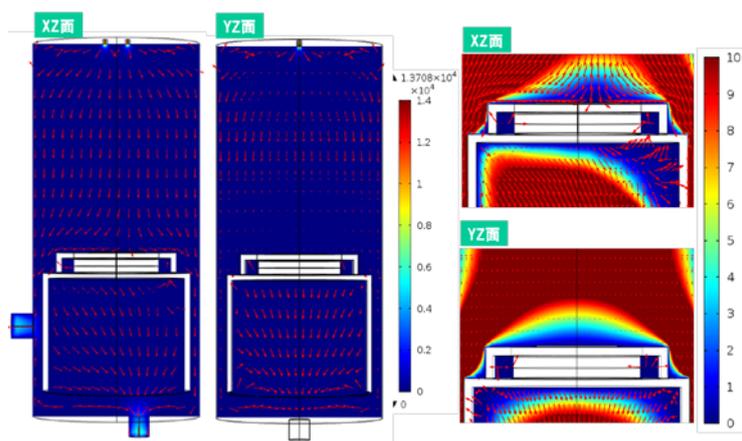


図9 チャンバー内流速分布計算結果 100sccm

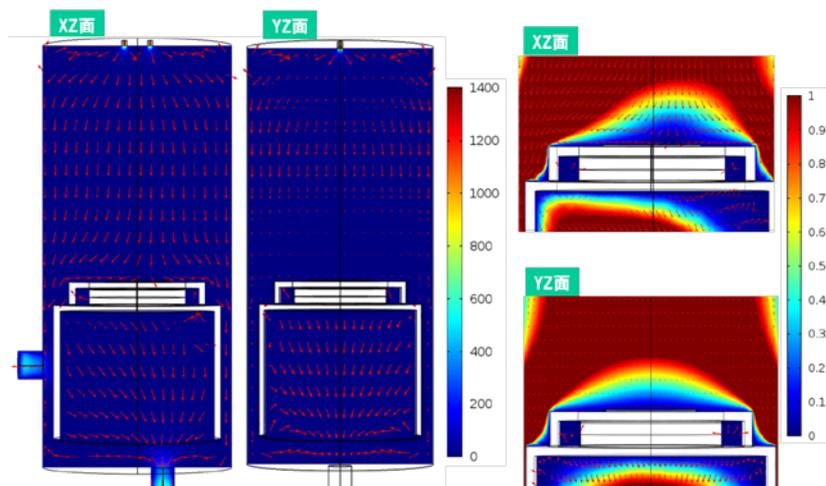


図10 チャンバー内流速分布計算結果 10sccm

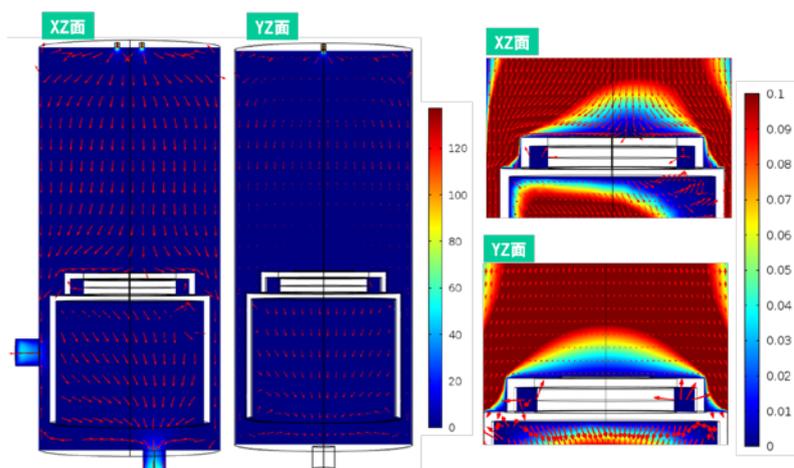


図 1 1 チャンバー内流速分布計算結果 1sccm

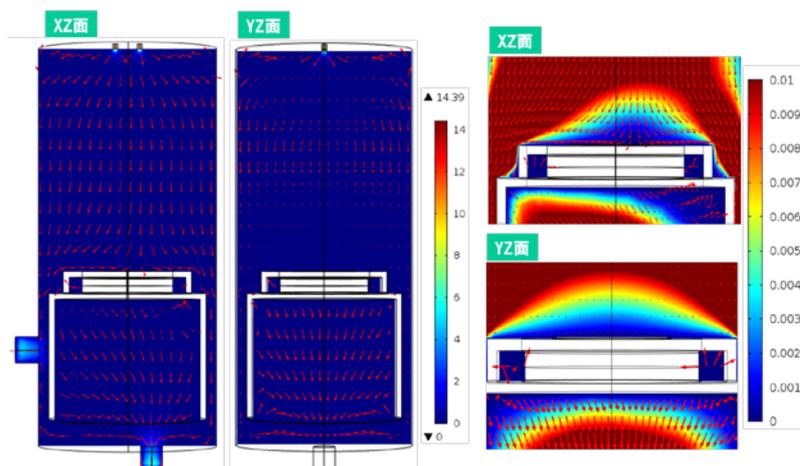


図 1 2 チャンバー内流速分布計算結果 0.1sccm

100 sccm から 0.1 sccm の各ガス流速においても、流速に変化はなく、ほぼ同じ流れ方をしている。しかしウェハー上でのガスの流速は YZ 面については中央から均一にひろがっているものの、XZ 面に関しては若干中心部分からのずれが生じている。ガスを排出するポートの位置やガス導入口の位置等を検討し中央部分からの均一な分散を行いたい。実際にウェハー上に堆積した膜は中央から若干 X 軸で排気口側にずれていることからこの計算結果は正確であった。

次に図 1 3 にヒーター容量 1500w 時の熱拡散状況のガス流量依存性に関する計算結果と図 1 4 にガス流量を 100sccm に固定した場合のヒーター容量依存性を示した。

ヒーター容量 1500w 時にはガス流量の大きな変化にもかかわらず熱はヒーター回りに集中し、装置外壁にもほとんど逃げることなく、ウェハーの加熱に使われることが分かった。実際に装置外壁温度の測定では 200℃～300℃の間で推移しており、この計算結果が正確であることを示している。

更にガス流量を 100sccm に固定した場合、ヒーター容量は 1500w 以上でなければウェハーを 1000℃以上に加熱することは出来ないことを示している。この点に関しては現在ヒーターが 1kw 程度であり実測でシリコンウェハー温度が 960℃出ていることからガス流量を下げた検証が必要である。

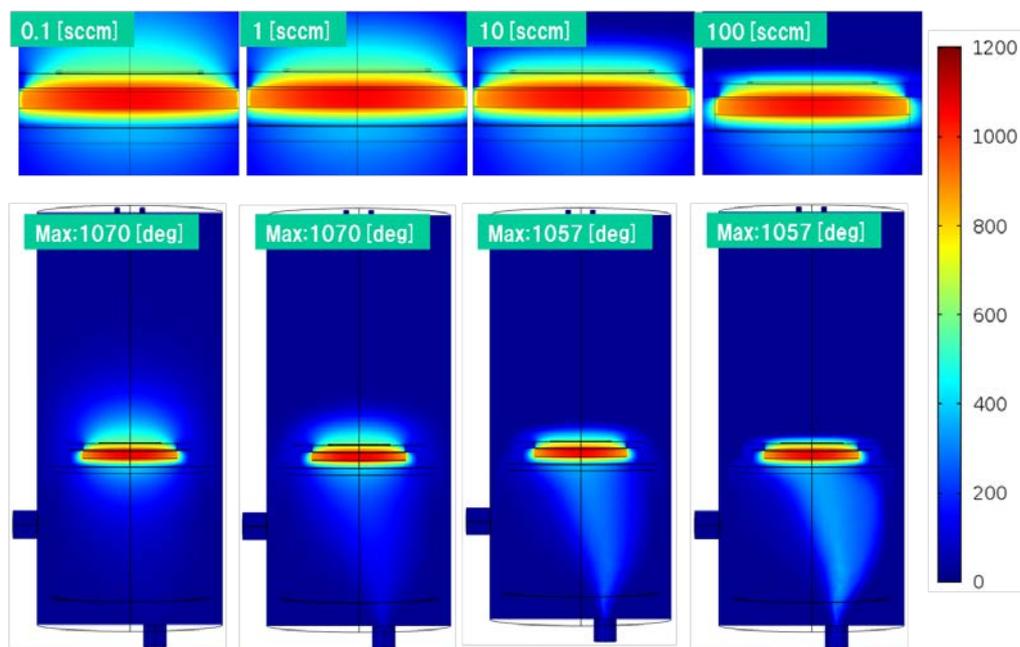


図 1 3 チャンバー内温度分布 0.1~100sccm @ 1500w

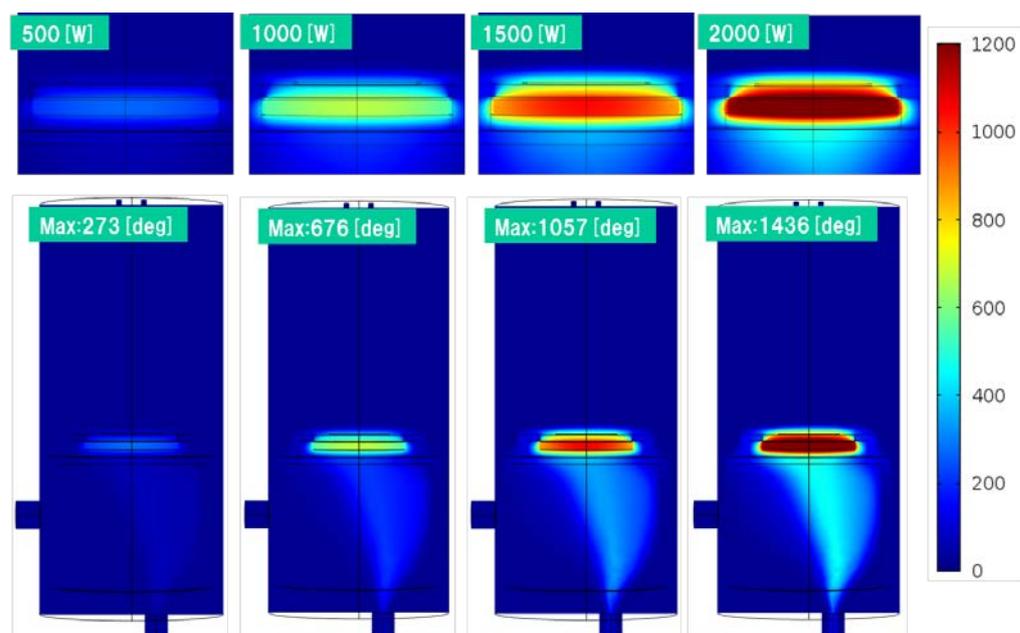


図 1 4 チャンバー内温度分布 500~2000w @ 100sccm

次に Si 基板近傍にて分子が分解し、基板表面に付着、反応する様子について計算による予測試験を行った。

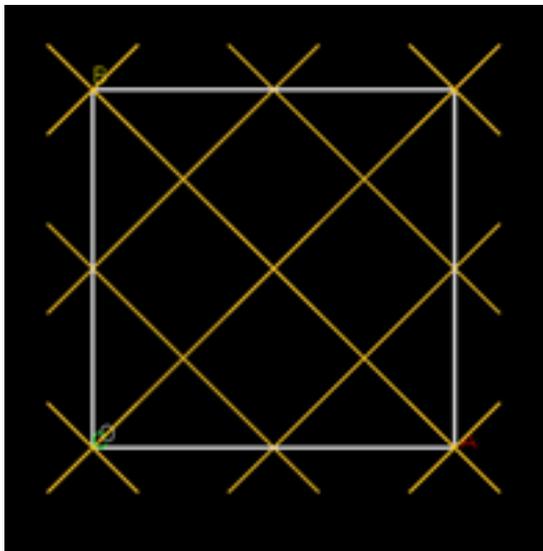


図 1 5 シリコン界面を形成し最適化

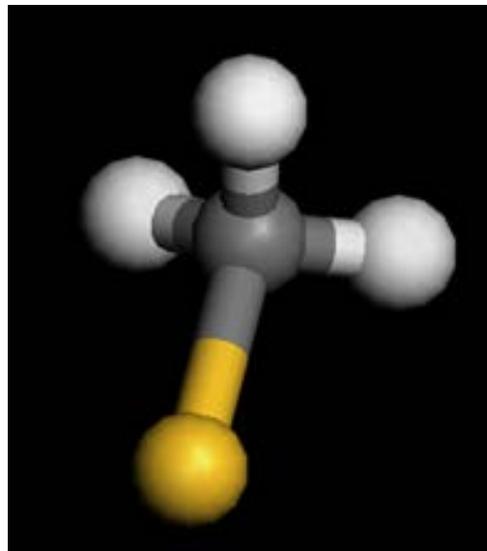


図 1 6 CH₃-Si ラジカルを形成

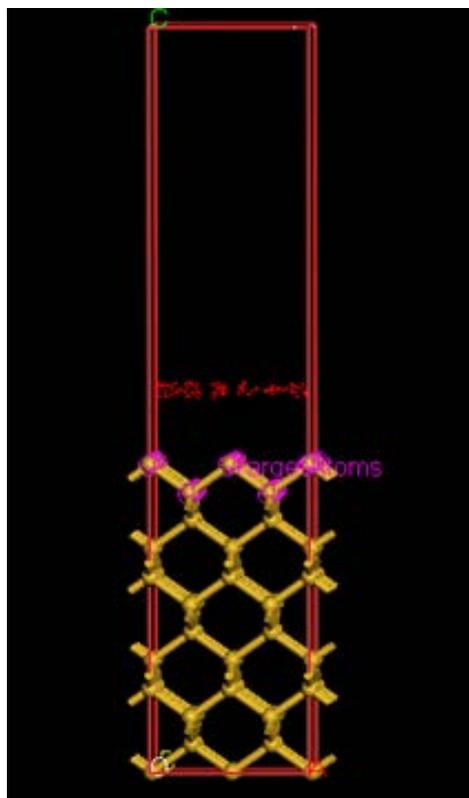
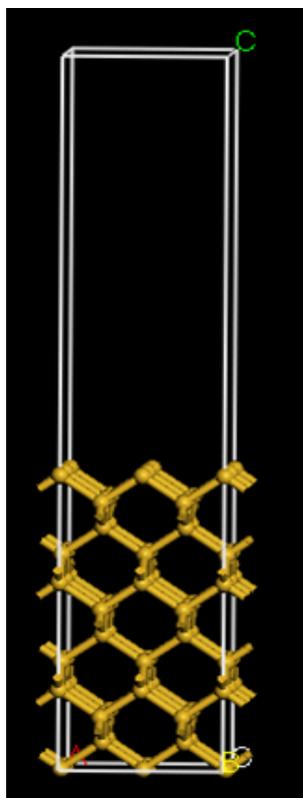


図 1 7 シリコンを 2 x 2 構造に作製し、アニーリングした。

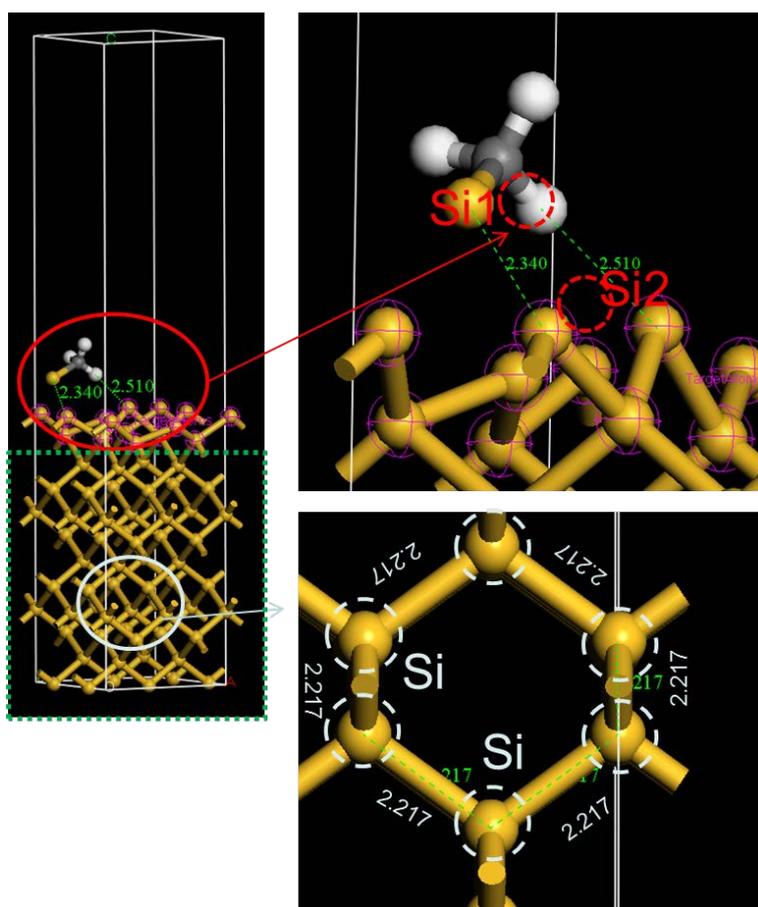
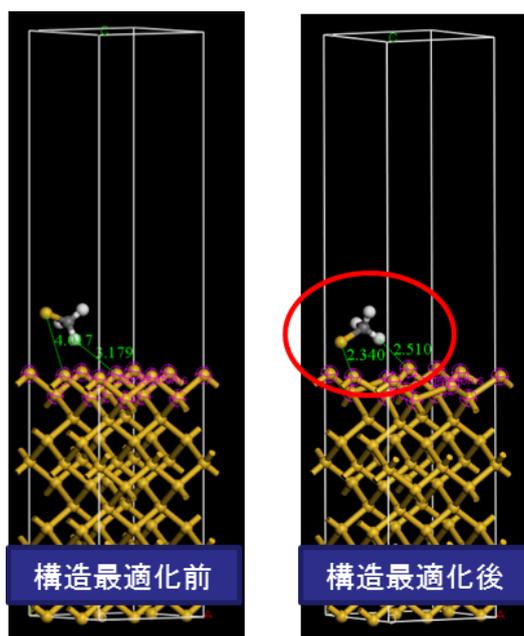


図18 吸着させ更に構造最適化した。

先の計算では成膜チャンバーに流入した材料ガスが基板表面まで到達する際にどのように温められるのかを検討出来るまでに至った。次に基板表面数ナノメートルまで接近した際にどのように分子が吸着・反応するのか、どの部位にたどり着くのかのミクロな計算を行った。複雑な計算になるため、本件ではまだメチルシランを想定した計算を行っているが、この場合においても基板に到達し、反応が生じる際に基板表面でのシリコン原子のずれや結合距離が変動することが分かる。また吸着する分子においても最適なサイトに吸着する為に基板表面で分子の回転が生じる可能性を示唆しており、成膜時の表面反応が基板表面から数オングストロームの領域で生じていると考えられる。この知見から新たな計算結果から新規 CVD 用化合物 AVSS とその分解したラジカル、熱電子放射によるイオン化の影響等を引き続き計算と実験の両面から精度を上げた試験を行う。

第6章 全体総括

本研究開発は原材料の分子設計、合成、精製の化学分野と半導体薄膜合成の半導体工学、更にはそれらを第一原理計算により正確に数値化する計算科学を融合した新しいアプローチである。各分野の専門家が互いに理解し合いながらハイリスクな新しい単結晶成膜技術の創造に邁進した。

その結果、用いる化合物の選択および設計はスムーズに行うことができ、安価な装置であるにもかかわらず、非常に高温での長時間の成膜を可能にした。更には初期的ではあるがデバイスとしての評価まで行うことが出来たことは、異なる 3 分野の密接な集合体ゆえの成果と言える。

今回の主な業績は

- ・ 計算により目的化合物の探索を短期間で行えるシステムを構築できた。
- ・ 計算によりその成膜プロセスおよび装置環境の最適化が可能となり、条件変更を迅速に行えるプラットフォームを獲得した。

この成果をもとに本件の事業化を早急に進めたい。