

ALD 用高蒸気圧金属錯体の開発と反応性の予測

Development of high vapor pressure metal complexes for ALD and prediction of their reactivity

東大院工¹, ダイキン工業², ○(P)佐藤登¹, 星谷尚亨², 山内昭佳², 匂坂重仁², 岸川洋介²,
(D)呉宇軒¹, (P)山口潤¹, 筑根敦弘¹, 霜垣幸浩¹

The Univ. of Tokyo¹, DAIKIN Industries, LTD², °N. Sato¹, N. Hoshiya², A. Yamauchi², S. Sagisaka²,
Y. Kishikawa², Y. Wu¹, J. Yamaguchi¹, A. Tsukune¹, and Y. Shimogaki¹

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

ALD (Atomic Layer Deposition) は複雑な 3 次元構造に対して原子層レベルで均一な膜を形成出来るため、半導体製造プロセスにおいて注目されている。ALD では金属原料として有機金属錯体が多く用いられている。ALD による製膜特性は金属錯体の種類によって大きく変わるので、様々な新規金属錯体の開発が行われている。ALD は成長表面での原料吸着飽和を利用した気相プロセスであるため、飽和吸着を促すために原料を高濃度供給する必要があり、そのため高い蒸気圧の金属錯体が求められる。一つの新規金属錯体の合成には数か月以上の開発期間を要するため、候補物質を全て合成・検討することは難しい。一方、蒸気圧を予測する手法の一つに Lin らによる COSMO-SAC(Conductor-like Screening Model-Segment Activity Coefficient) 法がある。我々は COSMO-SAC 法にいくつかの修正を施し、高精度に蒸気圧を推算する方法を確立した。本講演では蒸気圧の高い Co 金属錯体を予測し (Fig. 1)、さらにニューラルネットワークポテンシャルを利用して (Matlantis™)、候補物質の反応性を解析した結果 (Fig. 2) を報告する。

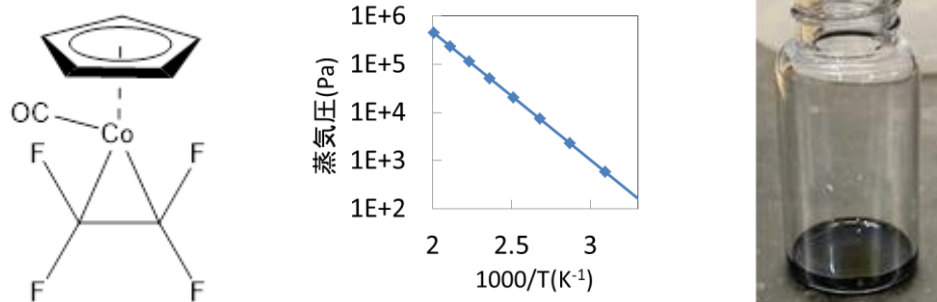


Fig. 1 Estimated vapor pressure (mid) and synthesis status (right) of the Cobalt complex (left)

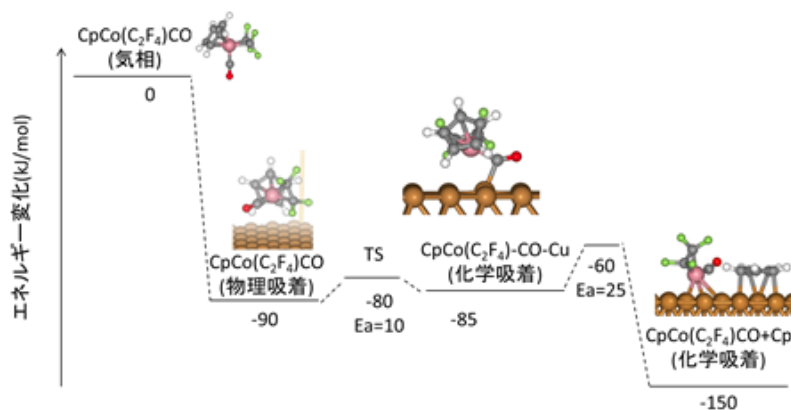


Fig. 2 Analysis of surface adsorption behavior of Co complexes using neural network potential.