

汎用機械学習ポテンシャルを用いた TiN 成膜中 H<sub>2</sub> purge の効果の解析The effect of H<sub>2</sub> purge during TiN film formation analyzed

## using universal machine learning potential

東京エレクトロンテクノロジーソリューションズ<sup>1</sup>, Tokyo Electron America, inc.<sup>2</sup>大阪大学<sup>3</sup> °門田 太一<sup>1</sup>, 吉田 美結<sup>3</sup>, 村上 透唯<sup>3</sup>, 森川 良忠<sup>3</sup>, 李 虎<sup>2</sup>Tokyo Electron Technology Solutions Limited<sup>1</sup>, Tokyo Electron America, inc.<sup>2</sup>, Osaka university<sup>3</sup>°Taichi Monden<sup>1</sup>, Miyu Yoshida<sup>3</sup>, Toi Murakami<sup>3</sup>, Yoshitada Morikawa<sup>3</sup>, LI HU<sup>2</sup>

E-mail: taichi.monden@tel.com

## 【背景】

窒化チタン(TiN)は優れた電気伝導性、機械的強度、熱的安定性などの観点から半導体の電極、配線材料として幅広い工程に使われている。TiN の低抵抗化の手段の一つとして四塩化チタン(TiCl<sub>4</sub>) flow と NH<sub>3</sub> flow のサイクルのシーケンス中に H<sub>2</sub> パージを導入することが有効である。本研究では H<sub>2</sub> purge のメカニズムを汎用機械学習ポテンシャル PFP[1]を用いた分子動力学(MD)計算と NEB 法による活性化エネルギー計算から検証した。

## 【シミュレーション】

Fig.1(a)に TiN (110) 5×3×3 Slab 表面に H を 30 個終端させた状態から 550degC で 0.25fsec×1Mstep MD 計算を実施した際の表面 H の原子数の推移を示す。この結果から MD の時間内では H は安定して終端を維持していることがわかる。Fig.1(b)に H 終端なしの同結晶面に H<sub>2</sub> を 30 個 0.25fsec×3.3Mstep かけて照射した際の表面終端 H の原子数を示す。この結果から、未終端の(110)面に H<sub>2</sub> flow することで TiN 表面が H 終端状態になることが分かった。その他(100)面、(111)面についても MD 計算を実施しており、(100)面は H<sub>2</sub> purge を実施しても H 終端されないこと、(111)面は H の吸脱着には反応障壁があり MD 計算の時間内では挙動が検証できないことが分かった。

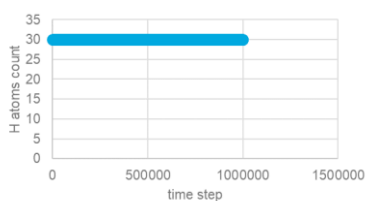


Fig.1(a) H 終端表面の MD 解析

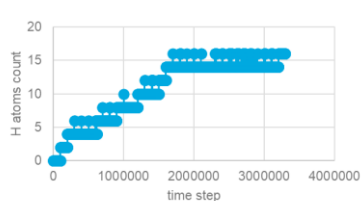


Fig.1(b)未終端表面へ H2 flow MD 解析

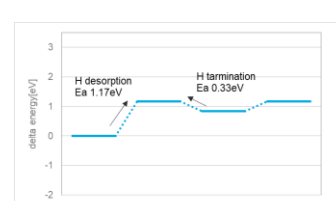


Fig.2 H の吸脱着 NEB 計算

Fig.2 に H 終端された TiN (110)面上からの H 原子 2 個が H<sub>2</sub> となって脱離するときのエネルギー障壁を NEB 法を用いて解析した結果を示す。この結果から(110)面上からの H<sub>2</sub> の脱離は 1.2eV 程度であり、N<sub>2</sub> 雰囲気などで 1sec など MD より長時間側では H<sub>2</sub> の脱離が見られる可能性がある。

以上の MD による短時間(nsec)の挙動と NEB の結果から H<sub>2</sub> パージによって TiN(110)の結晶面上での H 終端がコントロールできることが分かった。MD で解析できなかった(111)面の挙動などは大阪大学森川研究室での kinetic Monte Carlo 計算で検証を進めている。

[1] S.Takamoto, et al. , Nat Commun 13, 2991(2022)