

1P11

低誘電率絶縁材料の材料設計

○神谷和明¹, 佐藤徹^{1,2}, 田中一義^{1,3}

¹ 京都大学大学院工学研究科 (〒615-8510 京都府京都市西京区京都大学桂)

² 京都大学福井謙一記念研究センター (〒606-8103 京都府京都市左京区高野西開町 34-4)

³ JST-CREST (〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

緒言

近年、大規模集積回路(LSI)の高性能化をめざし、LSIにおける配線の微細化が進んでいる。しかし、配線間隔が狭まることで絶縁層の寄生容量が増大し、寄生容量に由来する消費電力の増大や信号遅延が生じ、さらなる微細化の障害となっている。寄生容量は比誘電率に対して比例して増加するため、比誘電率 k が 2 以下の低誘電率絶縁材料(low- k 材料)の開発が現在さかんに行われている。

誘電率は配向分極・振動分極・電子分極の和で表されるが、LSI動作領域では配向分極の寄与はほぼ消失していると考えられ、また振動分極は電子分極ほど大きくないため、電子分極が分極の主な寄与であると考えられることができる。誘電率は分極率と密度の積に依存するため、誘電率を低下させるには分極率あるいは密度の低減が必要である。現在はケイ素系材料について密度を低減させることでlow- k を実現させる研究が盛んであるが、ケイ素は原子分極率が高いため分極率低減に限界がある。また、空隙の導入による密度の低減は、機械強度や耐熱性の観点から問題がある。

本研究では原子分極率の比較的小さい元素を用いて低分極率分子を設計した。計算にはGaussian03を用い、分子の構造最適化を行い、分極率の計算はCPHF法ならびにSOS法により行っている。計算方法は密度汎関数法B3LYPとし、基底関数系には6-31+G(d,p)を用いた。

結果と考察

一般的に、共役分子ではフロンティア軌道が非局在化しているため結合ごとの分極率の加成性は成り立たないが、今回設計したベンゼン系共役分子では適当な構造ユニットを単位とすることで、加成性が成り立つことがわかった。構造最適化の結果から、これは、隣り合う環同士が大きくねじれており、その結果鎖軸方向への共役が分断されたためであると考えられる。またこの構造ユニットから構成される大環状分子の分極率は、ユニット数の同じ鎖状分子の分極率よりやや低いことがわかった。分子モデリングの結果から、この大環状分子は鎖状分子よりかさ高く、低密度であると考えられるため、分極率だけでなく密度の点からも低誘電率材料として期待できる。

さらに分極率を低減するため、ベンゼンをBN置換したボラジンをを用いた分子を設計し、分極率計算を行ったところ、目標である $k = 2$ が実現可能である分極率の値を得た。また、材料

をより低密度化すること、ならびに実際に合成する際の反応制御のために、**t-butyl**基を導入した系について検討した。計算の結果、これらの分子は**HOMO-LUMO**エネルギーギャップがベンゼン系共役分子と比較して大きく、またフロンティア軌道が局在していることがわかった。フロンティア軌道が局在するとき、遷移双極子モーメント μ が減少し、エネルギーギャップが大きくなると分極率が小さくなるため、ボラジン系分子は低誘電率材料として期待できる。

当日は、分極率が小さく、ガラス転移温度が**300°C**以上であるトリアジン系分子[1]の計算結果と、MDシミュレーションにより密度を求め計算した誘電率を報告する予定である。

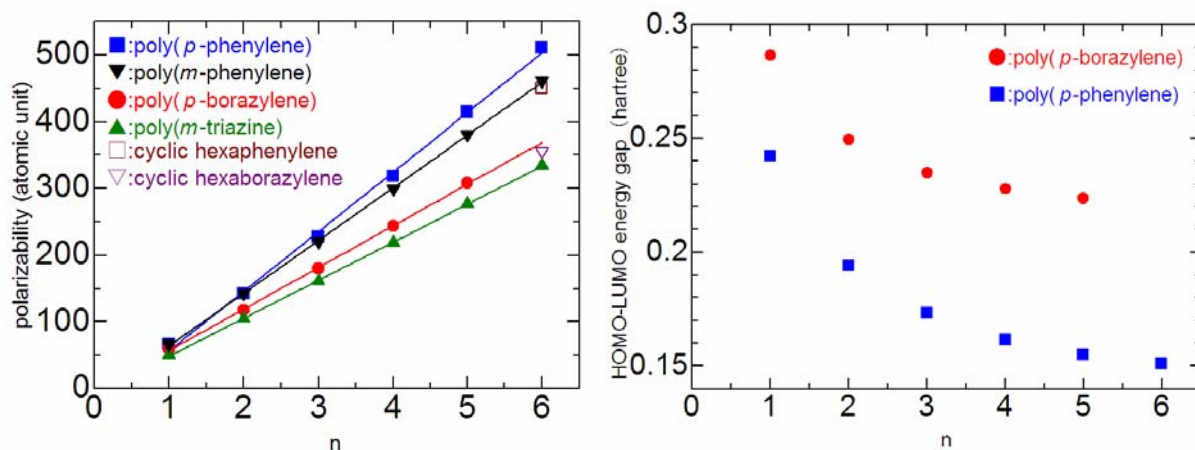


Fig.1. 構成ユニット数 (n) と分極率の関係 Fig.2. 構成ユニット数 (n) とエネルギーギャップ

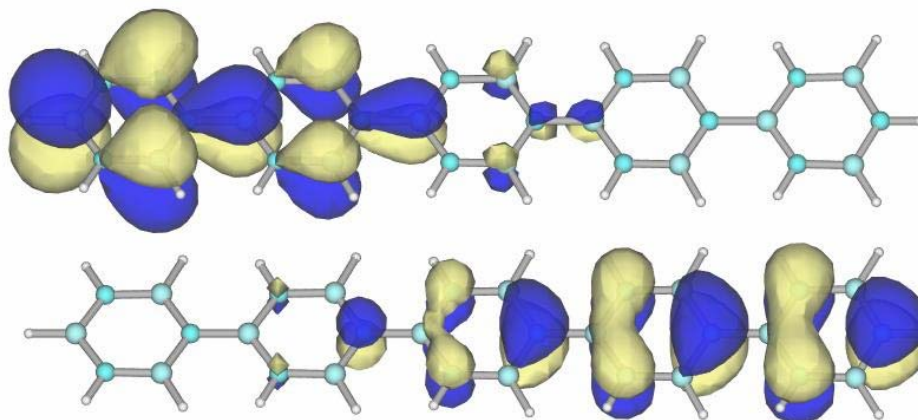


Fig.3. poly(p-borazylene)の HOMO(下)と LUMO(上)

参考文献

[1]E.Ekinci, *J.Pol.Res.***12**,205(2005)