

量子分子動力学法による LED 用サファイア基板の 化学機械研磨シミュレーション

○會澤 豪大, 河口 健太郎, 樋口 祐次, 尾澤 伸樹, 久保 百司
東北大学大学院工学研究科附属エネルギー安全科学国際研究センター
(〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

【緒言】サファイア($\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$)は、青色 LED の材料である GaN のエピタキシャル成長用基板などに用いられている。GaN のエピタキシャル成長では素子と基板との間の接続が LED の発光出力に大きく影響するため、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の原子レベルでの平坦化が必須である。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の平坦化には、 SiO_2 砥粒が用いられており、化学的作用と機械的作用で研磨する化学機械研磨(Chemical Mechanical Polishing (CMP))が重要な役割を果たしている。生産性の観点から $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の研磨速度の向上が強く望まれており、そのためには $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の CMP プロセスの詳細な理解が必要である。しかし、化学反応と機械研磨が複雑に絡み合う CMP プロセスを実験的に直接観測することは困難である。そこで本研究では、Tight-binding 量子分子動力学法により、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の CMP プロセスの解析を行った。

【方法】研磨シミュレーションのモデルを Fig. 1 に示す。表面形状が研磨効率に与える影響を評価するために、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面が平坦な場合(Fig. 1(a))と $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面にステップがある場合(Fig. 1(b))を計算した。Fig. 1 の緑色の線が $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 最表面を示し、Fig. 1(b)の緑色の線が凸となっている部分がステップである。水環境下では $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面が水和されているため [1], $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面上を H 及び OH で終端した。 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面下部の原子を固定し、 SiO_2 砥粒の上部の原子に z 軸方向に一定の圧力 0.6 GPa をかけながら x 軸方向に 25 m/s で強制移動させた。

【結果】Fig. 2(a)に $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面が平坦な場合、Fig. 2(b)に $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面にステップがある場合の 55 ps 後のスナップショットを示す。表面が平坦なモデルの研磨では、砥粒表面の OH 基と $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面の OH 基が反発することで砥粒が $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面上を滑り、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ が研磨されなかった(Fig. 2(a))。一方、表面にステップがあるモデルでは、ステップ部分の Al 原子が $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面から脱離し、研磨された(Fig. 2(b))。このプロセスではまず、 SiO_2 砥粒の Si 原子と $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ ステップ部分の O 原子が相互作用することでステップ部分の Al-O 結合が弱まった。次に、弱まった Al-O 結合が水分子との化学反応により Al-OH, O-H の形に解離した。そして、生成された Al-OH が SiO_2 砥粒の Si-OH と縮合反応し、水分子と Al-O-Si 結合が生成された。その後も SiO_2 砥粒と水分子により Al-O 結合が解離し、最終的に Al 原子が SiO_2 砥粒に結合する形で研磨された。 SiO_2 砥粒と結合する形で研磨されることは、実験による報告と一致している [2]。
 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面が平坦な場合と $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 表面にステップがある場合の比較により、 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 基板の CMP プロセスでは、基板表面のステップ部分が優先的に研磨されることを明らかにした。当日は、 SiO_2 砥粒の研磨性能向上を目的とした SiO_2 砥粒にドーパントを加えた場合の解析結果も報告する。

【参考文献】 [1] H. L. Zhu et al., J. Mater. Res., 504 (2005) 20.
[2] J. Werner et al., Wear. 239 (1994) 176.

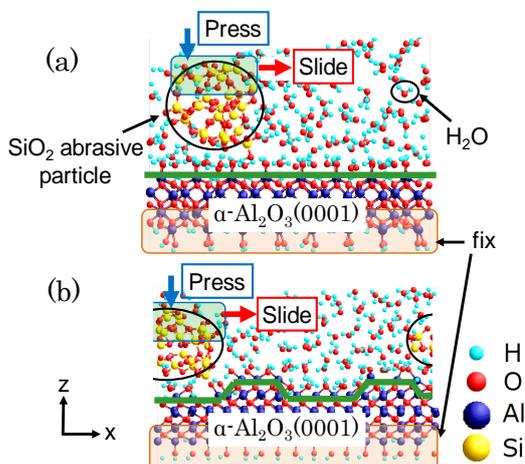


Fig. 1 CMP simulation models of the (a) flat and (b) stepped $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ surfaces with the SiO_2 abrasive particle.

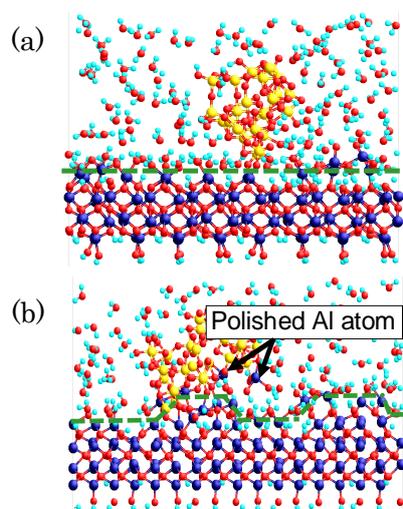


Fig. 2 Snapshots of the CMP simulations on the (a) flat and (b) stepped $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3(0001)$ surfaces at 55 ps.