

<p>1. 利用の概略</p> <p>1) 利用目的・内容 半導体デバイスの微細加工に関わる表面反応メカニズムを、分子シミュレーション技術を活用して解明する。今年度は、密度汎関数理論 (DFT) を用いた第一原理分子動力学により、Si 結晶中に CF 分子を入射させた際の表面反応解析を実施した。</p> <p>2) 利用意義 (産業利用の観点から) 本システムの選定理由として、第一原理計算が現実的な計算時間で実行可能な計算機であることに加えて、外部研究機関との共同研究を想定した計算機リソースであることが必要であった。弊社内において、このような計算機環境を用意することは困難であり、今回、スパコンシステムを利用することにより効率的な第一原理計算と共同研究を遂行することができ、本システムを利用した価値は十分に得られた。</p> <p>3) スーパーコンピューターを利用する必要性 本研究では、反応率を統計値として算出するため、様々な原子配置や分子入射条件の下で OpenMX コードによる DFT 計算を実行する必要がある。構造緩和の 1 計算あたり、数十ノードで約 1 日かかることから、スーパーコンピューターによる大規模な並列計算機環境が必要であった。</p>
<p>2. 成果の概要</p> <p>1) 本利用で得られた成果 (成果が得られなかった場合はその理由) ※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。 (①. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他)</p> <p>半導体微細加工に多く用いられる反応性イオンエッチングプロセスを模擬し、Si 結晶表面に高エネルギー CF 分子を入射させた反応解析を行った。 高い運動エネルギーを与えた C 原子、F 原子、CF 分子を Si (001) 表面に入射させ、表面反応過程を第一原理 MD によって計算した。入射エネルギーや入射角度を変えるだけでなく、入射条件毎に入射位置を変えた 32 から 64 ケースの計算を実行し、反応率を統計値として算出した。全ての計算を合わせると数百ケースの計算量に及ぶ。 計算された原子の軌道から、反射・分子解離・侵入・表面吸着などに分類した「反応マップ」を作成した。反応マップにおいて入射位置による相関がみられる場合には化学反応が、見られない場合は物理スパッタが支配的である。斜入射時には直入射時とは異なる反射・解離反応が起きること、原子入射と分子入射では反応マップ上の相関に明確な差が出ること、などを明らかにした。 本研究成果は、2018 年 11 月に開催された The 40th International Symposium on Dry Process (DPS2018) にてポスター発表した。</p>
<p>2) 社会・経済への波及効果の見通し 微細加工技術は 3 次元メモリデバイスなど先端半導体デバイスの実現に必要なキー技術である。計算科学の活用により、微細加工の表面反応メカニズムの理解を深め、高精度な制御手法を実現する。結果として、5G 通信や IoT 技術を支える 3 次元メモリデバイス等の研究開発や継続的な生産・供給に寄与していく。</p>
<p>3) その他の成果 特になし。</p>

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。