

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2016～2018

課題番号：16H02305

研究課題名(和文)窒化ガリウムウエハの加工メカニズム解明と高能率・高品位テープCMP研磨法の開発

研究課題名(英文) Investigation of CMP Mechanism of GaN Wafer and Development of High-Efficiency & High-Quality CMP Machine using Fixed Abrasive Tape

研究代表者

厨川 常元 (Kuriyagawa, Tsunemoto)

東北大学・医工学研究科・教授

研究者番号：90170092

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 34,700,000円

研究成果の概要(和文)：GaN基板表面からGa原子が分離する際の反応ダイナミクスを量子分子動力学シミュレーションで可視化した。その結果、OH基終端ナノダイヤモンド(ND)砥粒が、GaNのCMP加工においてGa原子を引き抜きやすく高い化学反応活性を示すこと、またOHラジカル援用により表面Ga原子が脱離しやすくなることが明らかとなった。これらの知見に基づき、ND含有CMPテープを作成するとともに、ナノバブルの超音波圧壊を用いてOHラジカルを発生させテープCMP加工が可能な装置を試作した。GaN研磨実験の結果、表面粗さの悪化、加工変質層の増加を伴わず、加工レートが精製水使用時と比較して約2.7倍に向上することを確認した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、化学的に安定なGaN基板の表面から効率的にGa原子を分離させるためにはどのようにしたら良いかを量子分子動力学シミュレーションで可視化し、その知見に基づき作用砥粒や加工環境を決定しようとする独創的、かつ本質的な試みである。また従来のCMP加工は遊離砥粒加工法であるため必然的にバッチ加工となり、高能率化の点で不利である。そこで本研究では、この最終遊離砥粒研磨加工を固定砥粒化したCMPテープにより置き換え、高能率加工を実現しようとするものである。さらに磨耗したCMPテープは次々と送り出すことにより常に新面での加工が可能となるため、工具管理も容易になる。本成果は工学的、工業的意義が大きい。

研究成果の概要(英文)：The reaction dynamics of the Ga atom separation from the GaN substrate surface were visualized with quantum molecular dynamics simulation. The calculation results revealed that hydroxyl-terminated nanodiamond (ND) abrasive grains easily extract the Ga atoms of the GaN substrate in chemical mechanical polishing (CMP) process and exhibit high chemical reaction activity. The calculation also clarified that OH radical assistance actively helps the surface Ga atoms detach of the GaN substrate. Based on these findings, we developed an ND-containing CMP tape and a prototype of the tape CMP processing capable of generating hydroxyl radicals via ultrasonic-assisted implosion of ultrafine bubbles. The results of polishing experiments of the GaN substrates with these inventions showed that the processing rate increased about 2.7 times compared with the case of using purified water without deterioration of the surface roughness and increase of the damaged layer.

研究分野：精密加工学

キーワード：GaN CMP ナノバブル 分子動力学シミュレーション テープ研磨加工 紫外線援用加工 OHラジカル
サブサーフェスダメージ

様式 C-19、F-19-1、Z-19、CK-19（共通）

1. 研究開始当初の背景

シリコン Si の限界を超えるパワーエレクトロニクスデバイス用新材料として炭化珪素 (SiC) や窒化ガリウム (GaN) 等の半導体材料が注目されている。特に GaN デバイスは、白色 LED での実用化が始まり、一般照明用やヘッドライトなどの車載用光源として普及が進んでいる。さらには今後ますます需要が伸びると予想される電気自動車やエアコンなどで使用されるパワーデバイスへの適用も検討が始まっている。しかしながら GaN デバイスの普及を加速させるためには、高品質かつ大口径の GaN 基板(ウエハ)を低価格で製造する技術の確立が必須である。しかし GaN 材料は Si 材料と比較して高硬度で、化学的に安定であるため加工時間が 100~150 時間と一桁近く長くなっている。さらに材料自体も高価であるため、低コストでの基板加工が困難で、大きな問題となっている。本申請はウエハ製造最終工程である仕上げ研磨工程に関するものである。

従来から Si ウエハの研磨工程には化学機械研磨法（以下 CMP; Chemical Mechanical Polishing）が用いられてきた。これは化学的な除去作用で大きな加工量を確保し、機械的作用で平坦性を担保する複合加工法である。例えば、Si 基板では強アルカリ環境下でコロイダルシリカ粒子を用いて研磨が行われている。しかし GaN 単結晶は化学的に安定であるため、Si 基板と比較して極端に加工能率が低下する。

そこで本研究では GaN 基板に作用させる砥粒の種類により、どのような反応が生じ、GaN 基板表面からどのように Ga 原子が分離していくのかを、量子分子動力学シミュレーションを用いて解明するとともに、その知見に基づく加工法の提案、並びにそれを実現させるための加工装置の開発を行う。最初に Ga 原子を効率的に引き抜くために必要な OH ラジカルを大量に生成させ、加工局部に長く滞在させる手法を開発する。次に効率的に Ga 原子を引き抜くことができる砥粒の選定、並びにそれを樹脂フィルム上に固定させた CMP テープを開発する。最後に OH ラジカルを供給しながら CMP テープを GaN 基板に押しつけ研磨するテープ CMP 加工装置を開発する。なお、このような試みはまだ行われておらず、全く新しいものである。

2. 研究の目的

GaN 半導体基板の高エネルギー・高品位最終仕上げ研磨加工を実現するために、量子分子動力学法による GaN 基板表面の反応ダイナミクス解明と、その知見に基づく加工法の提案、並びにそれを実現させるための加工装置の開発を目的とする。

最初に Ga 原子を効率的に引き抜くために必要な OH ラジカルを大量に生成させ、加工局部に長く滞在させる手法を開発する。次に効率的に Ga 原子を引き抜くことができる砥粒の選定、並びにそれを樹脂フィルム上に固定させた CMP テープ(化学機械作用を誘起する砥粒を固定化した研磨テープという意味で、以下、CMP テープと称する)を開発する。最後に OH ラジカルを供給しながら CMP テープを GaN 基板に押しつけ研磨するテープ CMP 加工装置を開発する。そして研磨加工時間 1 時間以内を実現する。

3. 研究の方法

本研究は、GaN 基板表面から Ga 原子が分離する際の反応ダイナミクスを量子分子動力学シミュレーションで可視化、その知見に基づき作用砥粒種を決定、CMP テープを作成し、これまでにない全く新しい高エネルギー加工法を提案するものである。

(1) Ga 原子引き抜き過程の反応ダイナミクス解明と最適砥粒選定：

量子分子動力学シミュレーションを用いて、OH ラジカルが GaN 基板表面への影響に関しても検討する。そして GaN 基板表面からの Ga 原子引き抜き過程の可視化を行うとともに、どのような砥粒種が高エネルギーに Ga 原子を引き抜くことが可能かに関して検討する。

(2) OH ラジカルの高濃度発生供給装置の設計試作：

OH ラジカルは寿命が極めて短いため、加工部近傍に大量に高密度で供給する方法の開発が必要不可欠である。本研究では、加工液として使用する酸素水や過酸化水素水への深紫外線を照射する方法、加工液中に空気や酸素のウルトラファインバブル(以下ナノバブル)を発生させる方法などを試みる。さらにはこの二つの手法を同時に実行する場合についても検討する。

(3) CMP テープ、並びにテープ CMP 加工装置の設計試作：

(1)で検討した最適砥粒を、PET (ポリエチレンテレフタレート) 樹脂フィルム上に均一塗布し、固定砥粒化した研磨テープ(以下、CMP テープと称する)を試作する。またそれを連続供給するための装置、GaN 基板を高速回転反転運動させる装置を組み込んだテープ CMP 加工装置を試作する。

(4) テープ CMP 加工シミュレーション：

研磨条件を最適化するために、CMP テープやコンタクトホイールの弾性変形を考慮した砥粒切れ刃軌跡を、統計的研削加工理論を用いて解析する。

(5) 研磨実験、並びに研磨性能、加工ダメージ評価：

実際に GaN 基板をテープ CMP 加工し、その研磨特性に関して検討する。表面粗さ、平坦度などの幾何学的な評価に加え、微小硬度、フォトルミネッセンスによる加工変質層の分布測定を行う。

4. 研究成果

本研究では、GaN 基板表面から Ga 原子が分離する際の反応ダイナミクスを量子分子動力学シミュレーションで可視化した。その結果、OH 基終端ナノダイヤモンド (ND) 砥粒が、GaN の CMP 加工において最も Ga 原子を引き抜きやすく、高い化学反応活性を有する砥粒であることが明らかになった。また OH ラジカルを援用することにより、砥粒と基板間の結合が起点となって表面 Ga 原子が脱離しやすくなることが明らかとなった。これらの知見に基づき、ナノダイヤモンド含有 CMP テープを作成するとともに、ナノバブルの超音波圧壊を用いて OH ラジカルを発生させる研磨液供給が可能なテープ CMP 加工装置を試作した。この加工装置を用いて GaN の研磨実験を行った結果、表面粗さの悪化、加工変質層の増加を伴わず、加工レートが精製水使用時と比較して約 2.7 倍に向上することを確認した。以下に概要を示す。

(1) Ga 原子引き抜き過程の反応ダイナミクス解明と最適砥粒選定：

量子分子動力学シミュレーションを用いて、OH ラジカルが GaN 基板表面への影響についても検討した。そして GaN 基板表面からの Ga 原子引き抜き過程の可視化を行うとともに、どのような砥粒種が高効率に Ga 原子を引き抜くことが可能かに関して検討した。

ND 砥粒を用いた中性環境における Tight-binding 量子分子動力学法による OH ラジカル援用 GaN CMP シミュレーションを行った。その結果を図 1 に示す。その結果、砥粒・基板間結合が起点となって表面 Ga 原子が脱離する研磨メカニズムが明らかになった。また 第一原理計算によるエネルギー解析の結果より、溶液が塩基性環境の場合、基板よりも砥粒表面の OH 基の方が 0⁻に変化しやすいことを明らかにした。さらに 0⁻で終端した砥粒は、OH 基で終端した砥粒よりも基板と結合しやすいことが明らかになった。以上より、塩基性環境下では OH⁻の作用によって、砥粒・基板間結合を形成しやすくなり、研磨を促進することが示唆された。

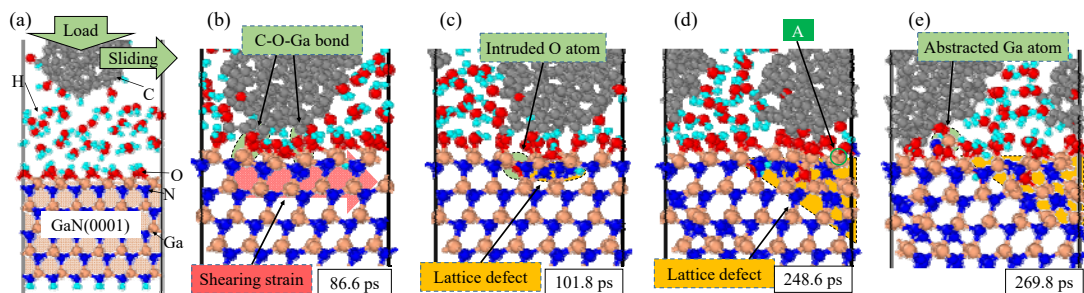


図 1 Tight-binding 量子分子動力学法による ND 砥粒を用いた GaN CMP シミュレーション

(2) OH ラジカルの高濃度発生供給装置の設計試作：

OH ラジカルの寿命は極端に短いため、加工部近傍に大量に高密度で供給する方法の開発が必要不可欠である。本研究では、当初は加工液として使用する酸素水や過酸化水素水への深紫外線を照射する方法、加工液中に酸素やオゾンのウルトラファインバブル (以下ナノバブル) を発生させる方法を試みた。

図 2 に紫外線照射による GaN 表面酸化のメカニズムを示す。紫外線を GaN に照射により GaN の表面が励起されヒドロキシラジカル ($\cdot\text{OH}$) が発生する。このヒドロキシラジカルは極めて短命であるが酸化力が非常に強いラジカルとして知られており、これが GaN 表面と反応することで表面に酸化膜が生成される。この酸化層は GaN 母材より硬度が低く、容易に加工されるものと予想される。

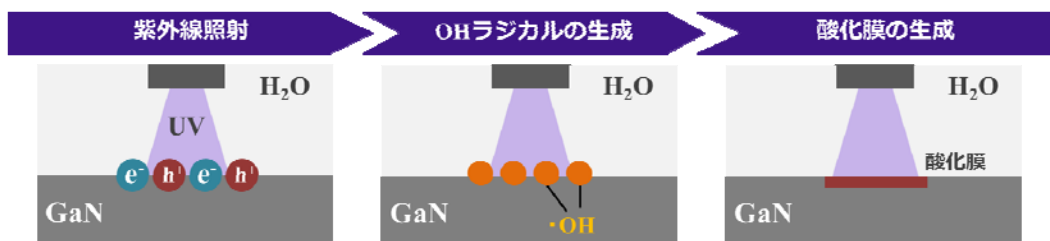


図 2 紫外線による GaN 表面酸化のメカニズム

紫外線照射を行いながらテープ研削実験を行った。その実験装置を図 3 に示す。紫外線最適照射条件下でテープ研削を実施した結果、表面粗さの悪化、加工ダメージの増加を伴わずに加工レートが約 1.2 倍に向上することを確認した。

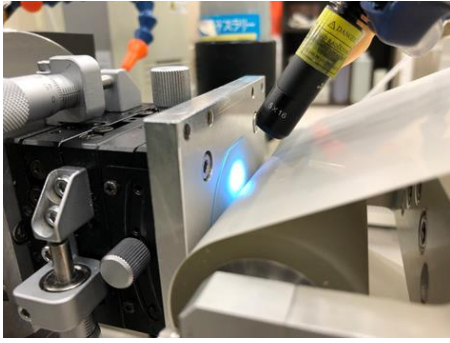


図3 紫外線照射によるテープ研磨実験

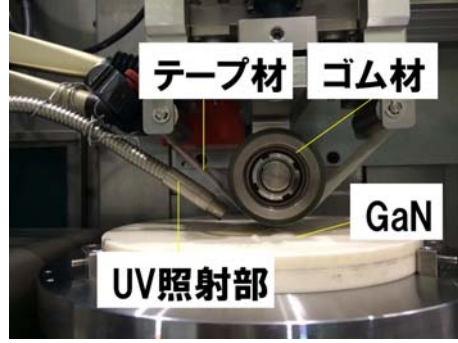


図4 テープ研削装置のテープ供給部

次により効率的にOHラジカルを生成するために、ウルトラファインバブル（UFB、ナノバブル）を発生させ、それを超音波で圧壊させる方法を考案した。その結果、直径約100nmのUFBを約5億個/mLの密度で発生させ、それを1MHzの超音波振動により圧壊させ、加工部に供給する装置を試作した。OHラジカルの発生量は、電子スピン共鳴（Electron Spin Resonance、以下ESR）測定法より定量評価した。その結果、OHラジカルが大量に生成（ 11×10^{-6} mol/L以上）していることが確認された。

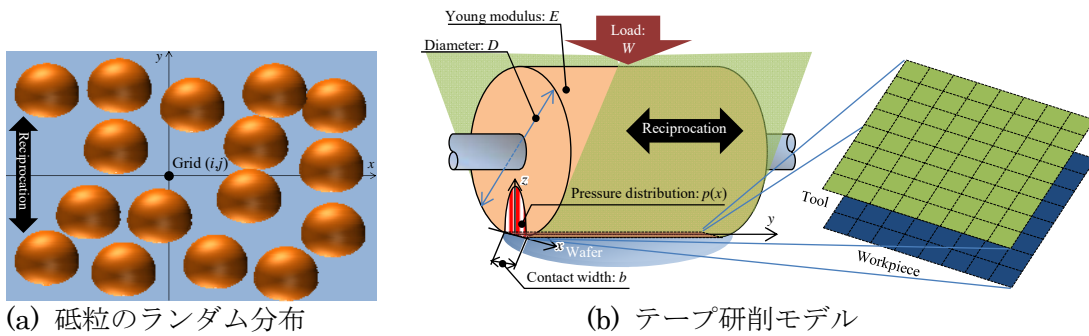
(3) CMPテープ、並びにテープCMP加工装置の設計試作：

(1)で検討したND砥粒を、PET（ポリエチレンテレフタレート）樹脂フィルム上に均一塗布し、固定砥粒化した研磨テープ（以下、CMPテープと称する）を試作した。またそれを連続供給するための装置、GaN基板を高速回転反転運動させる装置を組み込んだテープCMP加工装置を試作した。そのテープ供給部を図4に示す。

(4) テープ研削加工シミュレーション：

研磨条件を最適化するために、CMPテープやコンタクトホイールの弾性変形を考慮した砥粒切れ刃軌跡を、これまで研究代表者らが行ってきた統計的研削加工理論を用いて解析した。

図5(a)のようにテープ内にランダムに粒子が存在し、その平均値（期待値）が均一であることを仮定した場合、図5(b)の格子点における切削高さはポアソン分布に従う。その切削高さだけ材料が除去されるとし、連続的に砥粒を作用させることでテープ研削を模擬した。図6が計算結果と実験結果であり、左右の縦軸は除去量の実験値と計算値を示している。値の絶対値には大きな差異があるが、その傾向は一致していることが確認できる。



(a) 砥粒のランダム分布

(b) テープ研削モデル

図5 テープ研削加工シミュレーション

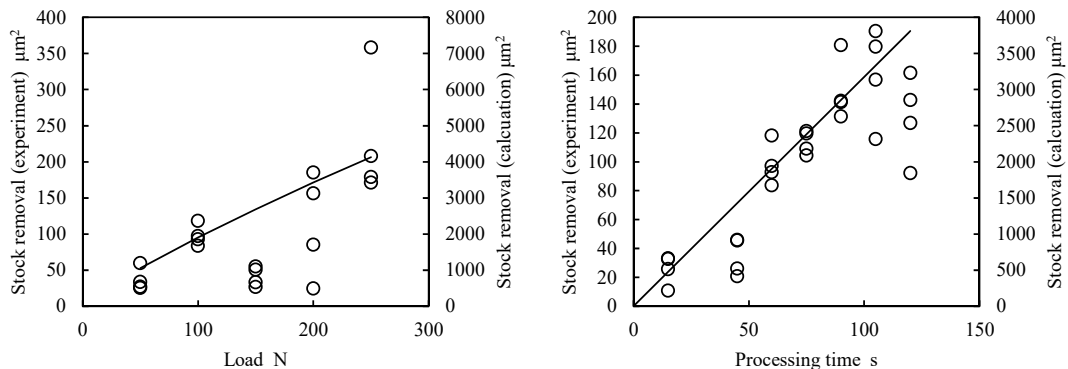


図6 テープ研削加工シミュレーション結果と実験値との比較

(5) 研磨実験、並びに研磨性能、加工ダメージ評価：

実際に GaN 基板をテープ CMP 加工し、その研磨特性に関して検討した。その結果、図 7 に示すように超音波援用 UFB 水を利用する事で、表面粗さの悪化 (3D 表面粗さ計で測定)、加工変質層 (PL 測定) の増加を伴わず、加工レートが精製水使用時と比較して約 2.7 倍に向上することを確認した。

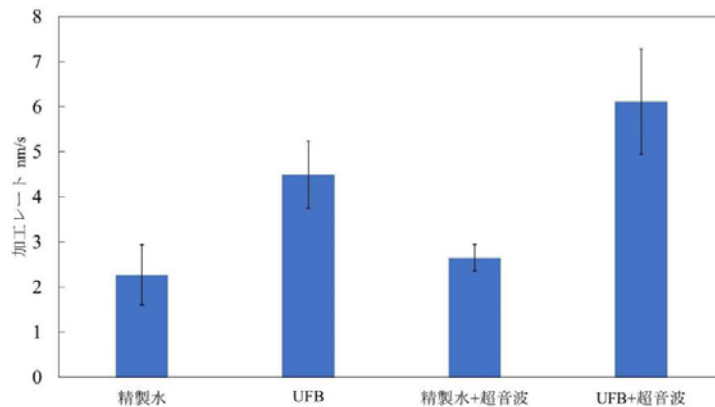


図 7 加工液ごとの加工レート

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 2 件)

- ① 鷹巢良史、嶋田慶太、水谷正義、厨川常元、GaN のスクラッチ加工におけるクラック発生機構の研究、砥粒加工学会誌(査読有り)、61 (7)、(2017)、392-397.
- ② 鷹巢良史、嶋田慶太、水谷正義、厨川常元、単結晶窒化ガリウム (GaN) 基板の高速高精度加工法の開発 (紫外線援用テープ研削法の提案)、砥粒加工学会誌(査読有り)、63 (11)、(2019)、569-574.

[学会発表] (計 14 件)

- ① 鷹巢良史、次世代半導体・窒化ガリウムウェハの高効率・低ダメージ加工、2019 年度精密工学会秋季大会シンポジウム資料集、(2019)
- ② 木村颯太、反応力場分子動力学シミュレーションによる窒化物半導体基板のナノバブルを用いた化学機械研磨プロセスの検討、2019 年度精密工学会春季大会学術講演会、(2019)
- ③ Souta Kimura, Molecular Dynamics Simulations on Chemical Mechanical Polishing Process of Nitride Substrate with Nanobubble, ICACC19(Florida, USA)、(2019)
- ④ Yoshimasa Aoyama, Molecular Dynamics Investigation for Chemical Effects of Nanobubble Collapse on Precision Polishing, Pacsurf2018(Hawaii, USA)、(2018)
- ⑤ 木村颯太、計算科学手法を用いた窒化物半導体基板の化学機械研磨プロセスの検討、トライボロジー会議 2018 秋、(2018)
- ⑥ Yoshimasa Aoyama, Effects of Shockwave-Induced Nanobubble Collapse on Precision Polishing (Molecular Dynamics Study)、the 9th Multiscale Materials Modeling (Osaka)、(2018)
- ⑦ 五十嵐拓也、ステップを有する GaN 基板モデルを用いた化学機械研磨プロセスの計算科学的検討、2018 年度精密工学会春季大会学術講演会、(2018)
- ⑧ 尾澤伸樹、計算科学シミュレーションによる化学機械研磨プロセスにおけるマルチフィジックス現象の解明、2017 年度精密工学会春季大会学術講演会、(2017)
- ⑨ Takuya Igarashi, Computational Analysis of Chemical Mechanical Polishing Process for GaN Substrate with Step Structure, WINDS17、(2017)
- ⑩ 五十嵐拓也、計算科学手法を用いた GaN CMP における砥粒-基板間の化学反応機構の検討、2017 年度精密工学会春季大会学術講演会、(2017)
- ⑪ Takuya Igarashi, First-principles Calculations of High Efficiency Abrasive Grain for GaN Chemical Mechanical Polishing, 41st International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites、(2017)
- ⑫ Kentaro Kawaguchi, Polishing Simulation of Gallium Nitride Substrate Assisted by Chemical Reactions with Hydroxyl Radicals, 41st International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites、(2017)
- ⑬ 五十嵐拓也、計算科学手法を用いた GaN CMP において高い化学反応活性を有する研磨砥粒の検討、2016 年度精密工学会秋季大会学術講演会、(2016)
- ⑭ Yoshifumi TAKASU, Study of crack generation process in scratching of gallium nitride (GaN)、The 4th International Symposium on Micro/Nano Mechanical Machining and

Manufacturing、(2016)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕

○出願状況(計1件)

① 特開 2018-182071

名称：研磨方法

発明者：厨川常元、水谷正義、上木原伸幸、片岡秀直

○取得状況(計0件)

〔その他〕

ホームページ等(該当なし)

6. 研究組織

(1) 研究分担者

研究分担者氏名：水谷 正義

ローマ字氏名：(MIZUTANI, Masayoshi)

所属研究機関名：東北大学

部局名：大学院工学研究科

職名：准教授

研究者番号(8桁)：50398640

研究分担者氏名：嶋田 慶太

ローマ字氏名：(SHIMADA, Keita)

所属研究機関名：東北大学

部局名：大学院工学研究科

職名：助教

研究者番号(8桁)：30633383

研究分担者氏名：久保 百司

ローマ字氏名：(KUBO, Momoji)

所属研究機関名：東北大学

部局名：金属材料研究所

職名：教授

研究者番号(8桁)：90241538

研究分担者氏名：今野 豊彦

ローマ字氏名：(KONNO, Toyohiko)

所属研究機関名：東北大学

部局名：金属材料研究所

職名：教授

研究者番号(8桁)：90260447

(2) 研究協力者

該当なし

※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。