

GCMC法を用いたAS-ALDにおけるCu上の小分子阻害剤(SMI)とTMAの競合吸着解析

着目の成膜パラメータ(温度、圧力)にて多分子競合吸着性の評価が可能です

測定法 : 計算科学・AI・データ解析

製品分野 : LSI・メモリ、パワーデバイス、製造装置・部品

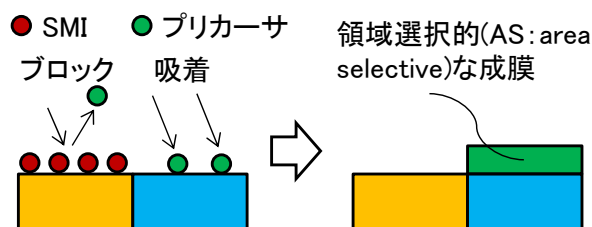
分析目的 : 不純物評価・分布評価

概要

領域選択的原子層堆積(AS-ALD)において、小分子阻害剤(SMI)は基板表面でのプリカーサ吸着の表面選択性を制御します。SMIは、基板の非成長表面への不要な堆積を防止し、成膜プロセス中の薄膜形成に重要な役割を果たします。本事例ではGCMC(グランドカノニカルモンテカルロ)法を用いて、Cu(111)表面におけるSMI(アニリン、ピリジン)とTMA(トリメチルアルミニウム)の単分子および2分子種の競合吸着量の予測をしました。本解析は、分子の立体効果まで含めた吸着特性の評価に有効です。

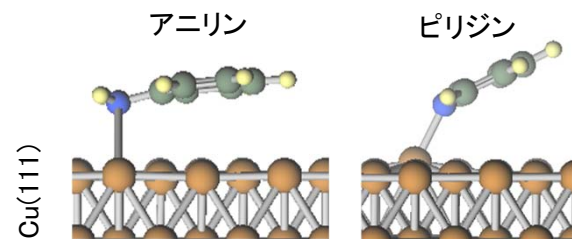
データ

小分子阻害剤(SMI: small molecule inhibitors)



SMIは非成長表面と相互作用することで、堆積反応を抑制し、成膜の領域選択性を実現するために有効です。

計算結果



分子動力学計算から得られた典型的な吸着構造

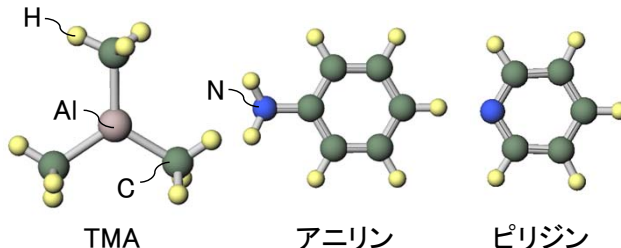
アニリンは基板に対しほぼ平行に吸着し、ピリジンは斜めに吸着する様子が見られました。

Cu(111)への分子の吸着エネルギー(eV)

アニリン	ピリジン	TMA
-1.62	-1.13	-1.28

吸着エネルギーより、ピリジンよりアニリンの方が、Cu(111)との相互作用が強いことが分かります。

計算モデル



アニリン、ピリジン(SMI)とTMA(プリカーサ)の、常温(297.15 K)、常圧(1 bar)時のCu(111)基板への吸着特性を解析しました。

①単分子の平衡吸着量(nmol/cm²)

アニリン	0.098
ピリジン	0.148
TMA	0.101

単分子の平衡吸着量は、必ずしも吸着エネルギーの大小関係と相関せず、分子の体積や吸着構造の影響を受けることが示唆されます。

②SMI、TMAの競合時の平衡吸着量(nmol/cm²)

	SMI吸着量	TMA吸着量
アニリン	0.063	0.051
ピリジン	0.088	0.062

SMI、TMAの競合吸着において、アニリンはピリジンよりも優れた阻害効果を示すと予測されます。アニリン、ピリジン、TMA間の相互作用や、温度、圧力などの成膜パラメータの影響を定量的に評価することが可能です。



✓ 分子の立体効果まで含めた競合吸着特性の評価はSMIの合理的な選択、設計に有用です。

分析サービスで、あなたの研究開発を強力サポート！

一般財団法人
MIST 材料科学技術振興財団

TEL : 03-3749-2525 E-mail : info@mst.or.jp
URL : <https://www.mst.or.jp/>