



第71回 応用物理学会春季学術講演会 注目講演プレスリリース

2024年 3月 18日

デジタルツインを用いた高効率TSV用低GWPガスの開発

High Efficiency Development of Low-GWP Gasses for TSV Process Using Digital Twin

半導体デバイス開発におけるTSV用低GWPガスを開発 三次元集積化技術の環境負荷低減に新たな一歩

ダイキン工業株式会社 化学事業部¹ テクノロジー・イノベーションセンター²

○高倉 陽平¹, 下薄 拓実², 中村 浩貴², 岡本 鈴佳², 野尻 康弘¹, 熊谷 修¹, 林 久貴¹

E-mail: youhei.takakura@daikin.co.jp

【発表概要】

- ・半導体デバイス開発の三次元集積化技術（TSV加工）において用いられる、 $c\text{-C}_4\text{F}_8$ ガスを代替し得る、高効率・低環境負荷のガスを開発
- ・独自開発のデジタルツイン技術を導入した仮想実験によって、現実では245時間かかる実験プロセスを0.5時間に短縮
- ・実験による評価で、堆積速度（DR）において $c\text{-C}_4\text{F}_8$ ガスに対する優位性を確認し、ガス種によってDRに影響を与える装置パラメータが異なり、ガス種ごとに装置パラメータを最適化する重要性を示した。

ダイキン工業株式会社 化学事業部の研究グループは、半導体の三次元集積化技術におけるSi貫通電極（TSV）加工に用いられる、低環境負荷の代替ガスの開発を行った。従来のTSV加工で主流の $c\text{-C}_4\text{F}_8$ と SF_6 ガスは、その高い地球温暖化係数（GWP）が環境への負荷を増加させるため、より低GWPの代替ガスの開発が求められている。この課題に対応するため、同研究グループは、GWPが1未満の C_3F_6 、 $\text{CHF}=\text{CHF}$ 、 $\text{CH}_2=\text{CF}_2$ を新たな代替ガス候補として選定し、それぞれの物理化学的特性とTSV加工への応用可能性を検討した。代替ガスの評価には、デジタルツイン技術を用いた仮想実験が行われ、広範囲なガス条件下での堆積速度（DR）を比較した。実験による検証の結果、 $\text{CHF}=\text{CHF}$ と $\text{CH}_2=\text{CF}_2$ が従来の $c\text{-C}_4\text{F}_8$ に対して優れた性能を示すと共にガス種によって最も影響を与える装置パラメータが異なることが明らかになった。

【詳細】

環境負荷の低いガスを用いて三次元集積化技術を実現する

半導体デバイスの微細化・高集積化技術は、現代の情報化社会の維持と発達を実現する上で欠かせないものになっている。しかし、半導体素子の微細加工技術によってさらなる高集積化を実現しようという従来のアプローチは限界を迎えつつある。トランジスタは物理的な微細化の限界に近づいているという指摘もなされてきた。こうした状況下で「チップレット（※1）」などに代表される、従来の微細化に頼ることなく、集積化を実現する技術「三次元集積化技術（※2）」が注目を集め、導入が進められている。

代表的な三次元集積化技術にシリコン基板の垂直方向に集積化加工を行う「シリコン貫通電極技術（Through-Silicon Via:TSV、TSV加工）」があり、半導体デバイス開発において多用されている。問題視されているのは、TSV加工において用いられるデポジションガス（※3）の環境負荷である。「TSV加工においては、 $c\text{-C}_4\text{F}_8$ ガスによる保護膜堆積と、 SF_6 ガスによるエッチングを交互に繰り返すことで基板に対し垂直方向に加工を行う『Boschプロセス』が主流ですが、 $c\text{-C}_4\text{F}_8$ と SF_6 はともに地球温暖化係数（GWP）が高いという問題があります（ $c\text{-C}_4\text{F}_8$ ：10200、 SF_6 ：24300）」と開発者らは話す。

「環境負荷の低いTSV加工用デポジションガスは、三次元集積化技術の普及とともにその導入が進むため、環境負荷低減において大きなメリットがあります。それが今回の高効率TSV用低GWPガス開発のモチベーションです」（開発者ら）

※1 **チップレット（Chiplet）** 微細加工技術に代わる設計手法として近年注目を集めている。ひとつの大きな集積回路（IC）を複数の小さなモジュール、すなわちチップレットに分割し、それらを高度に統合し、パッケージ化することで性能向上を図る新しい設計手法。

※2 **三次元集積化技術** 従来の平面の微細化ではなく、トランジスタなどを垂直方向に積層し、半導体デバイスの集積度を大きくする技術。

※3 **デポジションガス** 薄膜製造や半導体製造における化学気相成長（CVD: Chemical Vapor Deposition）や物理気相成長（PVD: Physical Vapor Deposition）などのプロセスで薄膜の堆積に使用されるガス。

デジタルツインの仮想実験を用いて、実際に高性能を発揮するガス探索を実現

ダイキン工業の研究グループが高効率TSV用低GWPガスの開発で導入したのが、「デジタルツイン（※4）」を用いた高効率のガス探索だった。このガス探索のプロセスの特長は、効率化された

実験に基づいて構築された「予測モデル」によって、デジタルツイン上で網羅的な仮想実験を行うというものだ。

まず研究グループは、化学的見地から、デポジションガスの性能指標となる堆積速度において、既存のc-C₄F₈を上回る性能を持つ代替ガス候補を探索した。その結果、GWPが1未満のC₃F₆、CHF=CHF、CH₂=CF₂を代替ガス候補として選定した。続いて、少ない実験回数で最適なパラメータ設定を取得するために「実験計画法（※5）」を用いた。これにより、実際の実験の装置パラメータであるICP電力、プロセス圧力、バイアス電力、ガス流量を、19条件選定し、それらの条件のもとに実際の実験を行った。実験は、量産でTSV加工を行う際に使用されているのと同型の実験装置（図1）を用いて、Poly-Si膜上に保護膜を堆積させてデータの収集を行った。

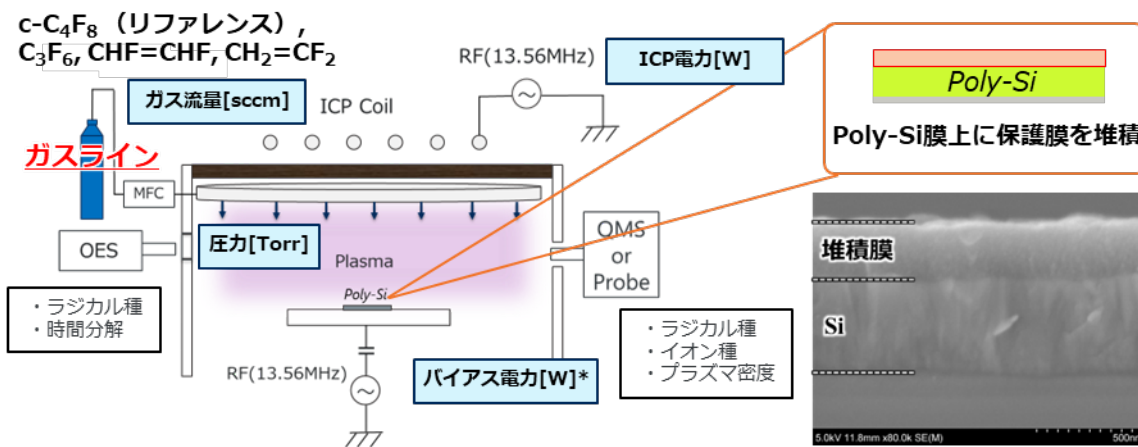


図1: 実験装置の概略図

次に研究グループは、実験結果から、装置パラメータより堆積速度を予測する「予測モデル」を構築。この予測モデルを用いて、実際のプロセス条件を再現したデジタルツインを構築しデジタル空間上で490通りもの仮想実験を網羅的にを行い、堆積速度の分布を算出した。この仮想実験結果を実際の実験装置で実証したところ、候補ガスがc-C₄F₈に対し、高い堆積速度を持つことが明らかになった（図2）。

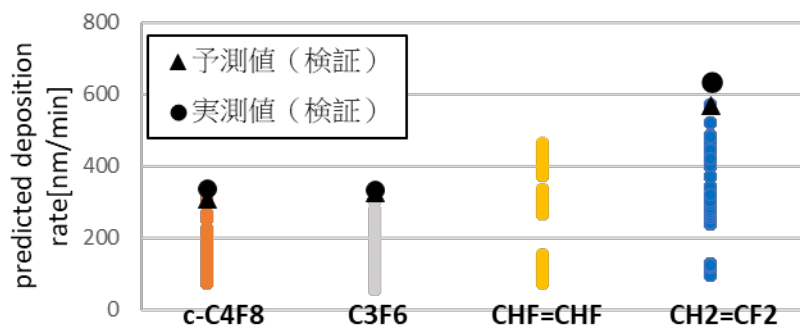


図2: 実験結果 縦軸に堆積速度の値、横軸がガス種を示す。

「一般的な代替ガスの探索は、基本的にはレファレンス（現在、デポジションガスとして使用されているc-C₄F₈）で用いられている条件の周辺を探る局所最適解のアプローチをとります。しかしデジタルツインを用いることで、ガスの探索を広い条件空間で行う事ができるため、大域的最適解を求めることができると同時に、実験の時間も245時間から30分程度に短縮することに成功しました」と開発者らは振り返る。

さらに研究グループは、堆積速度に影響を与える装置パラメータがガス種によって異なることも明らかにし、それをc-C₄F₈およびC₃F₆のパーフルオロ系ガスではICP電力とガス流量が、CHF=CHF、CH₂=CF₂のHFO（ハイドロフルオロオレフィン）系ではガス流量であると結論づけた（図3）。

「私たちは今、従来からの微細化・高積層化向けのガス開発に加え、環境負荷を低減したり、高効率でエネルギーを利用するための『環境性能』を重視した研究開発にも力を入れています。今回はデジタルツイン技術によって、私たちのもつ化学の知見と、環境負荷低減の効果を最大化できたことが非常に大きな成果だと考えています」（開発者ら）

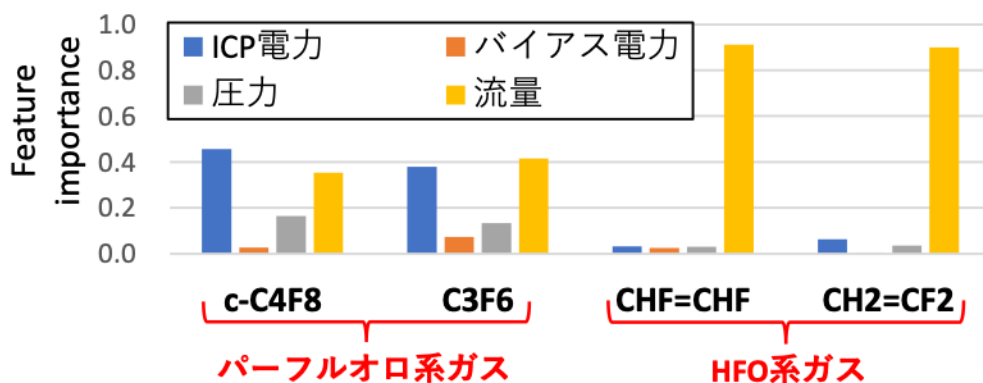


図3: 実験結果

※4 デジタルツイン (Digital Twin) コンピュータ上で再現された仮想的（ではあるが、現実と同等の効果を持つ、もうひとつの現実）なオブジェクト、システム、またはプロセスを指す。デジタルツインを活用することで、分析、シミュレーション、最適化、メンテナンスなどを実行でき、現在は製造業、建築、都市計画、医療、自動車産業など、さまざまな分野での利活用が進んでいる。

※5 実験計画法 数理統計学の応用分野。対象について、特定因子の効果の有無を調べるといったことを通し、高効率な実験計画および分析方法を研究する。