MERITインターンシップ（国内）報告書

理学系研究科物理学専攻
MERIT 12期生
久保 祐貴

1. インターンシップ概要

期間
2024/10/1-2024/10/31
受入れ先
東京エレクトロン テクノロジーソリューションズ株式会社 シミュレーション技術開発部

2. 実習概要

本インターンシップは、山梨県韮崎市にある東京エレクトロンテクノロジーソリューションズ株式会社穂坂事業所にて対面で実施した。インターンシップの打ち合わせでは、私の大学院での研究内容であるデータ同化構造決定法を、受入れ先での長年の課題へ応用する指針について議論を行った。インターンシップは毎日8時間程度行った。インターンシップ期間の最後に、シミュレーション技術開発部のメンバーと指導教員に対して最終報告会を行った。また、期間中には東京エレクトロンで開発された半導体製造装置や、開発中の装置を見学する機会をいただいた。

3. 研究内容

3.1. 背景

受入れ先で長年取り組まれている技術開発アイテムの一つとして、アモルファス膜が挙げられる。半導体製造プロセス中で成膜される薄膜の大部分はアモルファス構造を有しており、これらの膜質を予測することはプロセス・装置開発において重要な技術となるが、現在までに原子スケールでの構造モデリング手法は十分に確立されていない。そこで本インターンでは、私が普段大学院で開発を行っているデータ同化のアプローチに基づいて、既存の構造モデリング手法を改善することが可能かどうか検討した。

3.2. 方法・結果

赤外分光法では、材料の原子スケールの構造情報を、その構造に固有の振動特性から読み取ることができる。本インターンシップでは、実験データとしてIRスペクトルを活用するデータ同化構造モデリングの可能性について検討を行った。まず、アモルファスのモデル構造を第一原理分子動力学法によるメルトクエンチによって複数用意し、それぞれの構造のIRスペクトルを評価した。ここでは、計算量の都合から第一原理分子動力学計算によって双極子モーメントの時間変化を追跡し、その自己相関関数のフーリエ変換を行うことでIRスペクトルの評価を行った。計算で得られたスペクトルと実験データとの一致は概ね良好でありながらも、一部のピークの再現性についてはモデル間でわずかに異なる様子が確認された。これらのモデル間でエネルギーには大きな差がなかったことから、データ同化との組み合わせによってよりもっともらしいモデル構造が得られる可能性が示唆された。

4. 所感

今回のインターンシップではアモルファス構造のモデリング、及び得られた構造のIRスペクトルの計算に取り組みました。普段馴染みのない計算もあったためにインターンシップの開始直後には躓くことも度々ありましたが、シミュレーション技術開発部の方々の手厚いサポートのおかげで、当初の想定よりも早いペースで計算を進めることができ、さまざまな知見を得ることができました。インターンシップ中は原子シミュレーション以外にプラズマシミュレーションの方ともお話しできた上に、自分にはこれまで馴染みがなかった半導体製造プロセスのお話をたくさんお伺いすることができ、充実したインターンシップになったと考えております。また、開発中の装置を見学させていただく機会や、アカデミアの人材とは異なる観点を持つ方々も含めたディスカッションの機会をいただいたことで、実際に企業での研究開発の現場を体感することができました。

5. 謝辞

本インターンシップを実施する機会をくださった東京エレクトロンテクノロジーソリューションズ株式会社の皆様に感謝申しあげます。本インターンシップの実施にご協力いただき、インターン期間中直接ご指導していただいたシミュレーション技術開発部部長の松隈正明様、生活面等で様々なサポートをしていただいた人事部の保坂由紀様、他のシミュレーション技術開発部メンバーの皆様には大変お世話になりました、深く御礼申し上げます。また、本インターンシップの実施を承認してくださった指導教員の常行真司教授、副指導教員の大越慎一教授に感謝いたします。最後に、このような素晴らしい機会をご提供下さったMERITプログラムに感謝申し上げます。