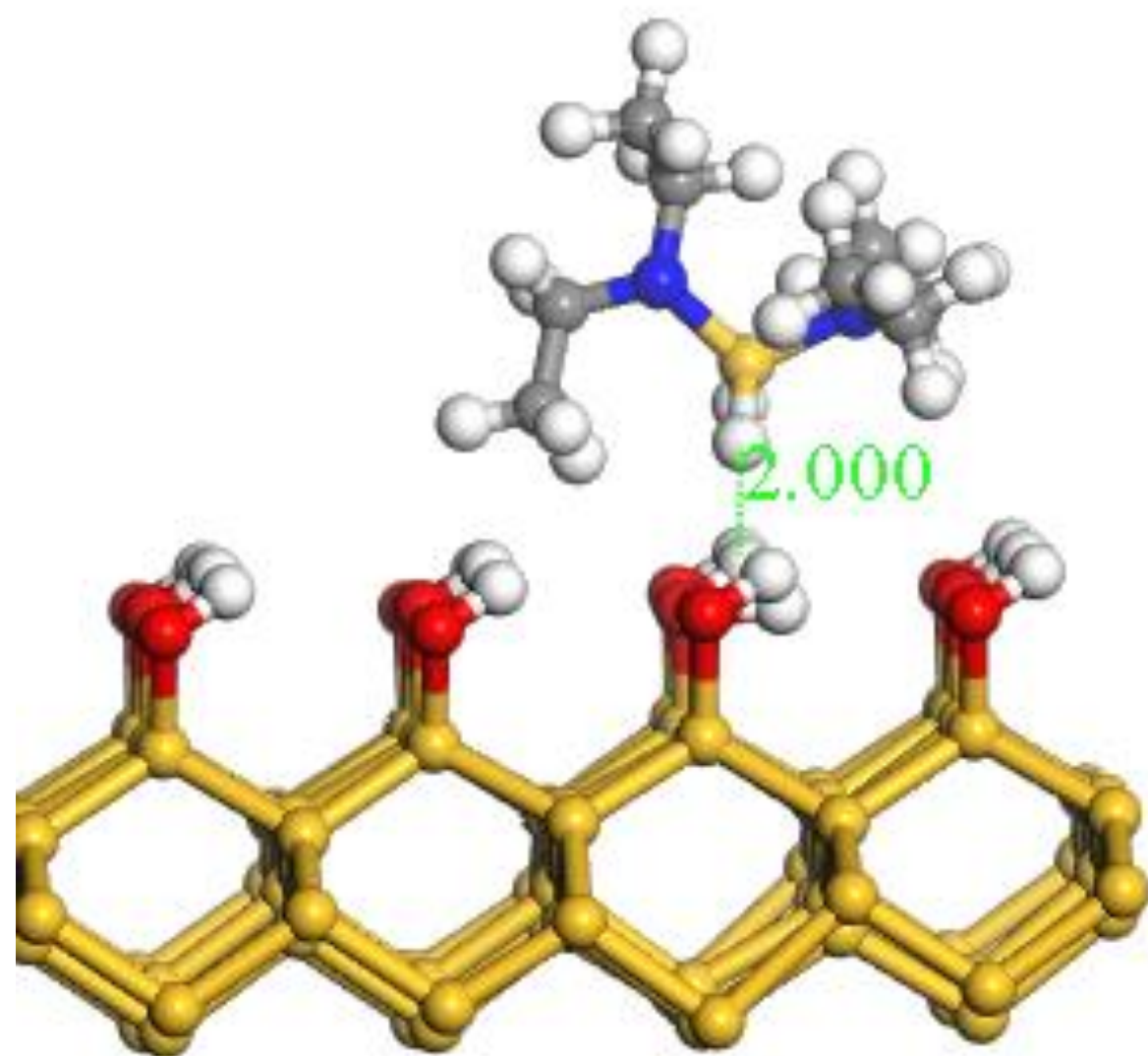


# 新規ALD前駆体の理論設計手法の確立に向けた 量子化学計算と実験の融合研究



BDEASを用いたALDプロセスの量子化学計算（遷移状態探索）

## ■ 研究概要

半導体製造工程における成膜プロセスにおいて、化学気相堆積（CVD：Chemical Vapor Deposition）法および原子層堆積（ALD：Atomic Layer Deposition）法は広く利用されている。ALD成膜の成功は前駆体に大きく依存しているが、その理論的な設計手段は確立しておらず、試行錯誤的な開発が行われている。本研究では、量子化学計算と実験を融合することで理論的設計手法の確立を目指し研究に取り組んでいる。

## ■ キーワード

半導体製造工程, ALD, 量子化学計算, DFT