

# CFD法によるホットワイヤ水素化条件の検討

日大生産工 ○清水耕作

## 1 まえがき

半導体産業ではデバイスの超微細化・超薄膜化や高集積化に伴い、半導体プロセス工程における正確な薄膜形成技術はますます重要となっている。特に電気特性が極めて均一である薄膜を作製する技術は重要である。

本研究では、均一化技術の一環としてHWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition)法を用いて均一に水素を行う条件について流体力学シミュレーション<sup>1)3)</sup>することによって検討する。

## 2 実験

HWCVD法はプラズマを用いない新しい低温薄膜法である。本研究では水素ガスのみを流すことによって半導体膜を水素化する手段として用いる。反応炉中にタングステンを張り、1100～1300℃に加熱する。ここで水素ガスを導入することで熱分解反応で原子状の水素にし、を作製し、半導体薄膜上に輸送し、欠陥を終端する。

この技術では図1のSi薄膜中の欠陥準位を水素Hで終端できることから、欠陥準位を極端に減少させることができ、デバイスの性能を向上させることができる。

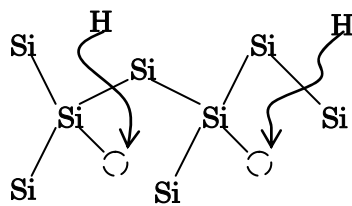


図 1.水素化处理

## 2 実験方法および測定方法

シミュレーションは、図2に示す反応炉モデルを用いて行われた。このモデルは、半導体形成装置としては典型的な構成である。一方タングステンワイヤは、簡単のため、1本

のみとした。本研究ではガスの流れを可視化できるCFD(Computational Fluid Dynamics)法を用いて反応チャンバ内での圧縮性流体の流れ及びガスの反応をシミュレーションし、解析評価を行う。

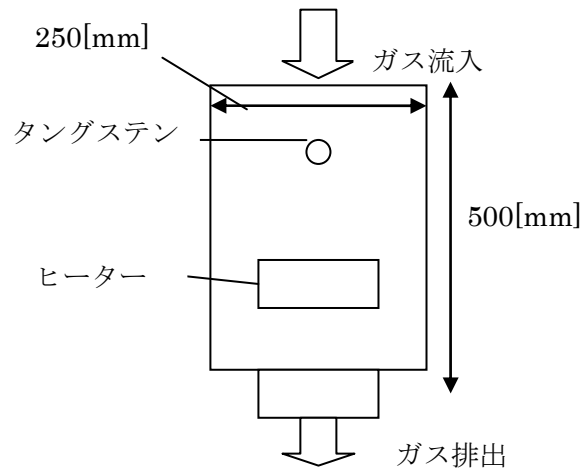


図 2.反応炉

### 2.1原理

CFDソフトの理論はニュートン力学を定式化したNavier-Stokes方程式を基礎として計算を進める。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \phi dV + \oint_A \rho \phi V dA = \oint_A \Gamma \nabla \phi dA + \int_V S_\phi dV$$

式の左辺は、慣性力について、第1項は体積素片の時間変化、第2項は対流を表している。右辺第1項は圧力勾配、第2項は粘性をそれぞれ表している。このNavier-Stokes方程式は一般に非線形方程式であるため一般解は存在しない。このため、空間を小さく分割して有限体積法を適用して流体の流れを計算し解を出している。有限体積法とは、解析対象物の体積全体を微小な体積素片に分解し、その体積素片を点で代表させることで近接素片との相互作用を連鎖的に計算する方法である。

## 2.2 実験方法

流体解析プリプロセッサ(GAMBIT)を用いて図2のような高さ500[mm]、直径250[mm]となる反応炉を作成し、反応炉の全体积を微小な体積素片に分解する。特にタングステンとヒータ近傍の体積を細かく分解することで、流れの複雑な部分の様子が詳細に表現されるように設定する。(図3)

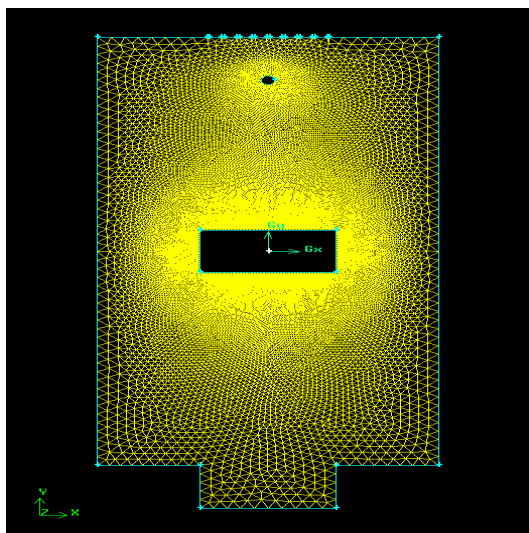


図3 メッシュ分割図

続いてCFDソフトを用いて反応系のモデル設定や境界条件の設定を行う。ここではタングステンを約1100℃から1300℃の温度に保ち、水素ガスが接触分解可能な状態にする。



さらに、反応分解した原子状水素HがSi基板に均一に到達するようにガスの流れにする。現段階では、各パラメータの依存性を検討するのを目的とすることから、基板を傾けることはしない。パラメータは、圧力、温度、流量である。

## 3 結果

図4、図5は流量7.14[g/s]、タングステン温度1500[K]、出口圧力100[pa]に設定して水素ガスを導入し、シミュレーションした結果である。図4は水素ガスの速度分布を表しており、上方からシャワーヘッドを通して流入してきた水素ガスは中央部にあるタングステンの熱でガス流の方向が変化する。さらに基板表面ではガスの流れによる淀みが生じているのがわかる。図5は温度分布を表しており、図からは高温に加熱されたタングステンが周囲に熱を伝達をしていることが理解される。

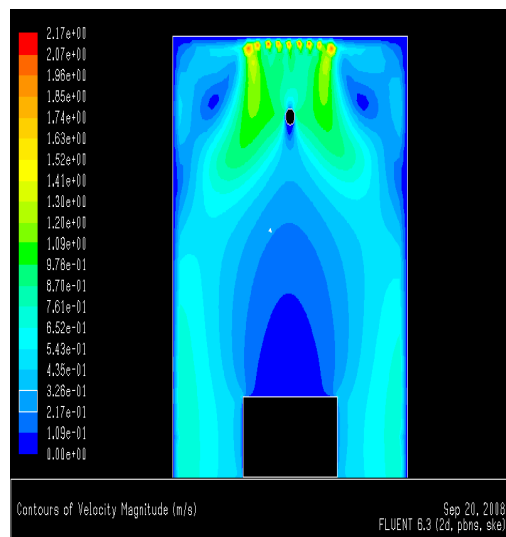


図4 速度分布

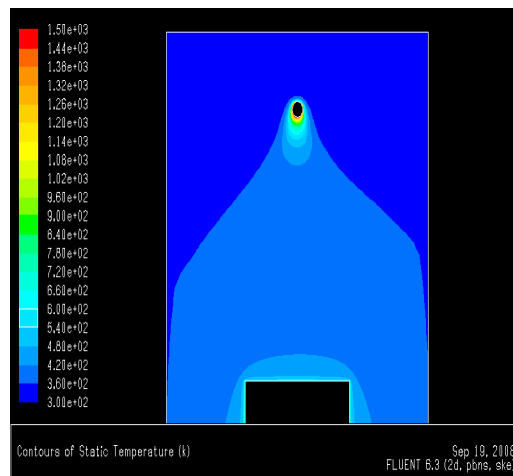


図5 温度分布

また基板表面は、室温状態であるが、熱が伝えられているのがわかる。実際はこの熱をうまく制御する必要があり、あまり高いと吸着した水素は、再び膜の外へ離脱する。

## 5 まとめ

原子状水素を用いて水素化を行う場合、水素原子は、きわめて活性度が高いので、温度の制御を誤ると、逆に劣化させることになる。これまで実験段階ではわかっていたことであるが、その一端が理解された。今後は、水素反応モデルをシミュレーションに取り入れてさらに詳細な検討が行えるようにしたい。

## 参考文献

- 1) 矢川元基「パソコンで見る流れの科学」ブルーバックス
- 2) 松尾一泰「圧縮製流体力学」理工学社
- 3) Munson “Fundamentals of Fluid Mechanics” Wiley and Sons 2006