

## CFD 法による水素化シミュレーションの検討

日大生産工(院) ○石橋 大典 日大生産工 清水 耕作  
双葉電子工業(株) 紺野恵 西周慶久 江原摩美 谷口昌照

### 1. 背景

LSI 材料として用いられる半導体の界面やバルクにはダングリングボンドと呼ばれる欠陥が存在し、TFT 性能を低下させる。このダングリングボンドを水素で終端することで膜の品質を向上させることができる。本報告ではホットワイヤ法を用いて水素化処理を行った結果について述べる。

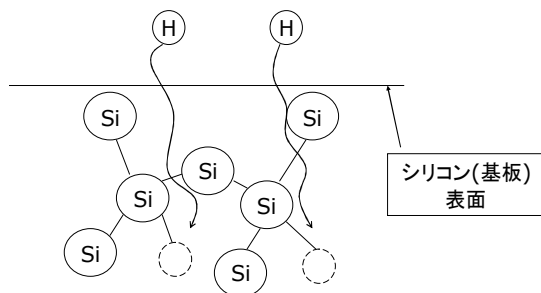


図 1. アモルファスシリコン構造

### 2. 目的

CFD(Computational Fluid Dynamics)法により、水素ガスの流れをシミュレーションし、水素化条件の変化による流れの影響を検討する。また、シミュレーション結果から得た条件で実際に水素化処理を行い、水素化条件の最適化を図る。

### 3. 原理

図 1 のように原子が不規則に配列するアモルファス構造では結合相手のいない結合手が存在し、これをダングリングボンドという。ダングリングボンドに結合手が 1 本の原子状水

素を結合させることで未結合手をなくす(欠陥を終端すると表現する)。この技術の水素化処理という。原子状水素の生成にはホットワイヤ法を用いる。この方法は反応炉中に設置したワイヤを高温に加熱することで原料ガスを熱分解する方法である。本研究ではホットワイヤ法で生成した原子状水素を試料まで輸送し、水素化の反応を起こす。

### 4. 実験方法

前年度までは水素化処理をするときの水素ガスの流れについてシミュレーションし、可視化することでガスの流れについて検討した。今回はスパッタリング法によって成膜された 300[nm]の a-Si(アモルファスシリコン)薄膜にシミュレーションで検討した条件で水素化処理を行い、ガスの流れが水素化処理に与える影響について検討した。評価方法は I-V 特性による水素化前と水素化後の導電率の比、昇温離脱ガス分析法(TDS)による膜中の水素濃度を用いた。

水素化処理は図 2 の実験装置を用いて行った。反応炉下部のシャワーヘッドより水素ガスを導入する。水素ガスは約 1100[°C]まで加熱したタングステンワイヤの周辺を通ることで、輻射熱による熱分解反応を起こし、原子状水素に分解される。原子状水素がヒーター表面に設置された半導体試料に到達することで、バルクや界面に存在するダングリングボンドと結合

## Hot-wire hydrogenation by Computational Fluid Dynamics

Daisuke Ishibashi, Kousaku Shimizu, Megumi Konno, Yoshihisa Saisyuu  
Mami Ehara and Masateru Taniguchi

し、欠陥を終端する。

このときの水素ガスの流れを、CFD 法を用いて計算し、水素ガスの流れや反応炉内の温度をシミュレーションする。水素ガスの流量、シャワーヘッドと試料が取り付けられている基板の距離、水素ガスの流量を変化させたときの流れや温度の分布から水素化処理に適した条件を検討する。それぞれの条件は表 1 に示す範囲で実験した。

表 1. 条件の変化

|        |               |
|--------|---------------|
| 水素ガス流量 | 5～25[SCCM]    |
| 基板間距離  | 44.5～84.5[mm] |
| 処理時間   | 5～15[min]     |

シミュレーションのモデルには図 3 のように、図 2 の断面図となる 2 次元モデルを使用した。

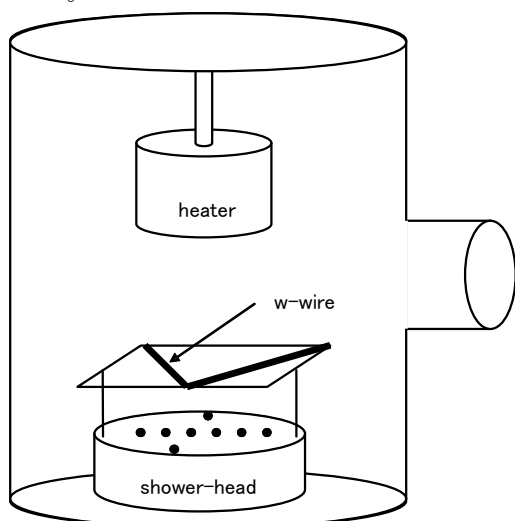


図 2. 水素化処理を行う反応炉

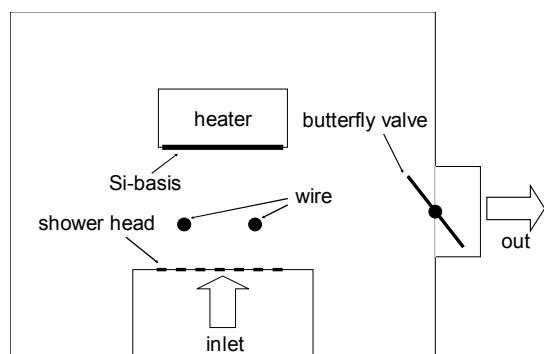


図 3. 2 次元モデル

## 5. 実験結果

水素化処理の効果は横軸を各条件の変化、縦軸を導電率比と膜中水素濃度で表した。導電率比は水素化後の導電率を水素化前の導電率で割った値となっている ((1)式)。原子状水素によってダングリングボンドが終端されると欠陥に介した電流が抑制されて導電率が下がることから、導電率比の値が小さいほど水素化処理の効果が大きいことを示している。

$$\text{導電率比} = \frac{\sigma_{\text{after}}}{\sigma_{\text{before}}} \quad \dots (1)$$

### 5-1. 水素ガス流量変化

水素ガスの流量を増やしたときの水素化処理の効果を示す。水素ガスの流量は[SCCM] (Standard Cubic Centimetre Minute) で表す。基板間距離は 44.5[mm]、処理時間は 10[min]とした。水素ガスの流量が多くなるほど水素化処理の効果が小さくなっていることがわかる(図 4)。また、水素ガスの流量を増やしても膜中水素濃度はほとんど変わらないことがわかる(図 5)。

以上二つの結果より、水素化処理の効果はガス流量に反比例して小さくなり、水素ガスの流量を増やしても膜中水素濃度にはあまり影響しないということがわかった。水素化処理の効果に影響が出ているのは、原子状水素によって欠陥を終端するだけでなく、Si 同士の結合を切る反応も同時に起こっていることが考えられる。水素ガス流量を変化させた時、基板間距離は最も短い 44.5[mm]になっていることから、ホットワイヤによる熱分解を起こした直後の原子状水素は高いエネルギー状態にあるからである。したがって、基板が近い場合は水素ガス流量を増やしても逆効果ということがわかる。

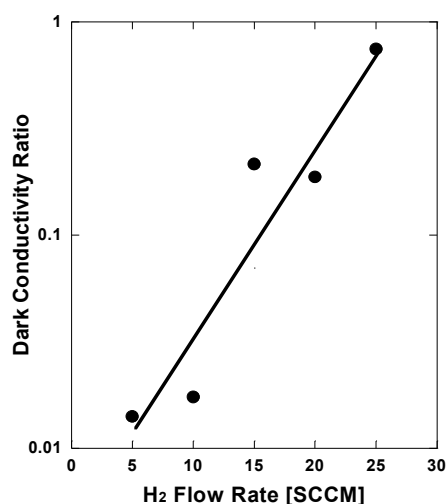


図 4. 水素化処理の水素ガス流量依存性

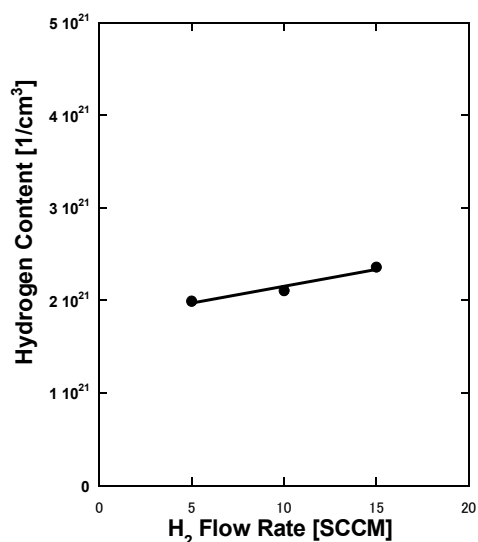


図 5. 膜中水素濃度の水素ガス流量依存性

## 5.2. 基板間距離変化

試料が取り付けられている基板とシャワーヘッドの距離(基板間距離)の変化による水素化処理の結果を示す。水素ガス流量 5[SCCM]、処理時間は 10[min]とした。基板間距離が長くなるほど変化率の値が小さくなっていることから、水素化処理の効果が大きくなっていくことがわかる(図 6)。また、基板間距離が長くなっても膜中水素濃度に大きな変化は観測されなかった(図 7)。

以上二つの結果をまとめると、基板間距離を長くすると水素化処理の効果は大きくなるが膜中水素濃度はあまり変化しないことがわか

った。基板間距離が長くなると試料周辺のガスの流れに偏りが生じるため、試料に供給される原子状水素の量も減少する。また、ホットワイヤの温度の影響を受けにくくなるため基板温度も低くなることが考えられる。よってガス流量変化のときと同様に、流量は低いほうが水素化処理の効果が大きいということを意味している。

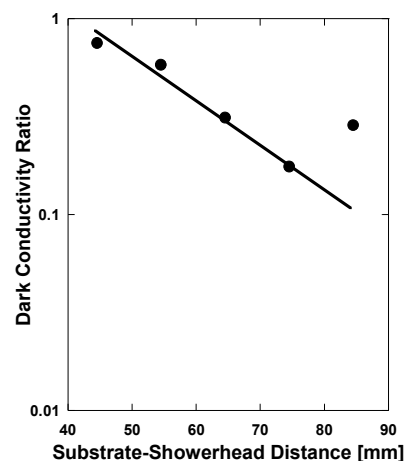


図 6. 水素化処理の基板間距離依存性

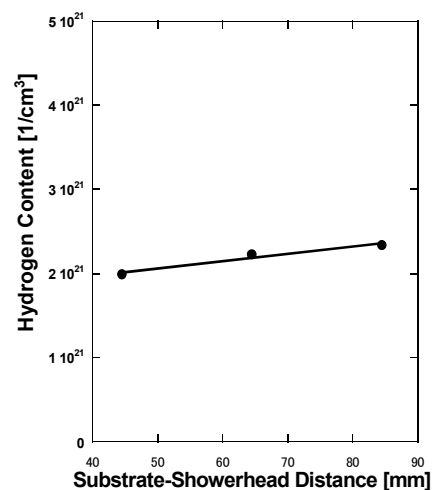


図 7. 膜中水素濃度の基板間距離依存性

## 5.3. 処理時間変化

水素化処理の時間を増やしたときの水素化処理の結果を示す。水素ガス流量 5[SCCM]、基板間距離 44.5[mm]とした。処理時間が 10分になったときに最も水素化処理の効果が高くなっていて、処理時間が 10 分よりも長くな

ると水素化処理の効果は低くなる(図 8)。また、ここでも膜中水素濃度には大きな変化が観測されなかった(図 9)。

処理時間変化のため、ガス流量や基板間距離に変化はない。変化するのは反応炉内の温度である。ピークの時間を過ぎると水素化処理の効果が小さくなっていくのは、膜中での原子状水素が起こす反応が時間に応じて変化していることが考えられる。そして、時間が経つと共に上昇する基板温度がその反応に影響を与える可能性がある。

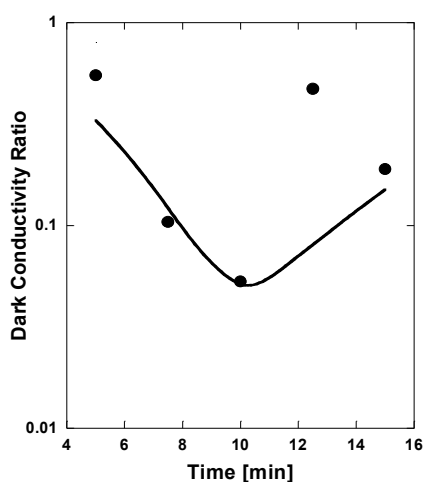


図 8. 水素化処理の時間依存性

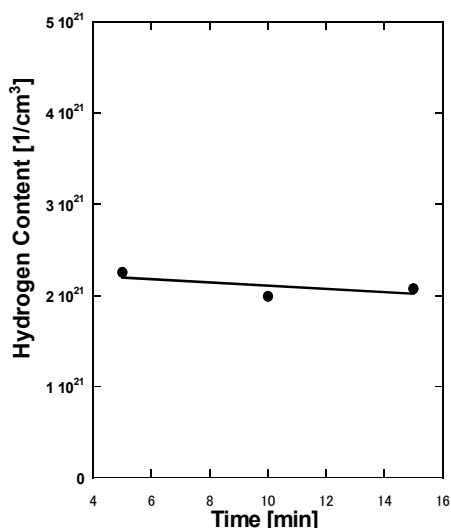


図 9. 膜中水素濃度の時間依存性

## 6. まとめ

前年度まではシミュレーションによって水

素ガスの流れや温度を可視化してきた。しかし、このシミュレーションから判断できるのは、水素ガスの流れのみで、水素化処理の効果まではわからない。今回はシミュレーションした範囲の条件で水素化処理を実際に行ったところ、

- ① 実験範囲内ではガス流量は少ないほうが効果的。
  - ② 基板温度が高くならないように設定する必要がある。
  - ③ ②を満たすために流量や基板高さに応じて処理時間を適切に設定する必要がある。
- ということが考えられる。

これまで、試料表面に対して原子状水素を均一に供給することが効率の良い水素化処理の方法と考え、そのための条件について検討した。その結果、基板間距離やタングステンワイヤの本数・間隔が重要であることがわかっている。しかし、水素化処理の効果は基板間距離が長いほうが大きかった。これは基板が近いとガスの流れは安定するが、Si 同士の結合を切る反応が起こりやすいと考えられる。より最適な水素化条件を検討するためには水素ガスの流れや温度だけでなく、どれだけの原子状水素が試料に供給されていて、どのような反応を起こしているかを計算できるような、反応系シミュレーションを用いる必要があることがわかった。

## 参考文献

- 1)石橋, 清水: “CFD 法による流体シミュレーションの検討(2)”, 第 56 回応用物理学会(2010) 17a-ZB-2
- 2)清水, 石橋, 増田: ”ホットワイヤ(CAT)法によるシリコン膜の水素化効果, 第 7 回 Cat-CVD 研究会予稿集 (2010) pp.58~61