

## CVD 装置内の数値解析

### [1] モデリングの対象

- ◇ Chemical Reactions
- ◇ Radiations
- ◇ Plasma
- ◇ Microcontamination

### [2] 基盤シミュレーション技術

上記 4 つのモデル化に関しては、それぞれ独立に考察し実行することは可能である。

しかし、ウェーハ表面での化学反応と結晶成長ではモデルのベースとして表面付近のガス濃度、温度および圧力等の状態が問題となるであろうし、輻射の問題にしてもモデル化の前提条件として輻射源の位置、強度が既知である必要がある。またプラズマあるいはコンタミの問題についてもそれらの生成過程のモデル化と生成後の挙動について考えるうえで気流の詳細を知る必要に迫られることは必須であろう。

以上のことを考慮すると、それぞれのモデルが有効に機能するためには 4 つのモデル化に先立って、まず装置内の熱流体としてのガスの流れ場が信頼性よく求まっている必要があると思われる。

ところで、装置内の気流を数値流体力学 (CFD) 的に解析しようとする場合、用いる手法についてはその限界を考慮したうえで十分慎重に選択する必要がある。なぜなら、用いた方法によってはその計算結果は実際の装置内の流れ (および温度場、圧力場) とはかなり異なったものになるからである。

CVD 装置のような mTorr ( $1 > \text{Pa}$ ) 程度の低圧下では連続気体の仮定 ( $\text{Kn} < 0.01$ ) が怪しくなる。従ってこの場合、Navier-Stokes Eq. をベースとしてこれまで開発された通常の CFD コードを用いるのは非常に危険である。

例えば、連続体近似の通常の CFD で淀みが生じる結果を得たとしても実際は淀みは生じていない可能性もある。それは系のクヌッセン数に依存するがこれまでの CFD にはこのことは含まれていない。

従って、CVD 装置内のより正確な流れ場、圧力場および温度場をシミュレーションしようとするならば希薄気体まで射程範囲とする CFD コードを用いる必要がある。

残念ながらこれに関する市販のコードは現在のところないと言っていい。しかし手法はすでに確立されており、コードを独自に作成することは十分可能である。

### [3] Strategy

装置設計のための援用解析ソフトは、プロトタイプ製造に伴うコスト削減、測定では得にくい物理量の推定等に今後ますますその重要性を増すと考えられるが、見方を変えればそれだけ解析コードに対する信頼性の要求もまた厳しくなることは容易に想像できる。

従って、即使える解析コードを安易に短期間のうちに開発するのは長い目を見た場合、結果的に損な買い物と言えらるだろう。

しかし、一方で装置開発のタイムサイクルを考えると解析コードの開発にそれほど長い期間を要するのは好ましくないのもまた事実である。

そこで、つぎのような進めかたが望ましいと思われる。

#### Phase1) 基盤技術を早急に確立する

- まず装置内部の流れ場等のある程度正確に把握できる解析コードを作成し、装置形状の設計等に役立てる。
- ここで開発された解析コードの基盤部分は当分の間、改良もしくは変更をよぎなくされることはないであろう。

#### Phase2) 現在知られている各種モデルを重要なものから基盤部分に組み込む

- 全体の流れ場がわかっている仮定のもとでウェーハ近傍の詳細、あるいはプラズマ、ダストの問題まで解析できるようにコード自体の機能を向上させていく。

#### Phase3) 各モデルの精緻化、あるいは技術課題のモデル化を行なう

- モデル自体をアップデート、あるいは独自に改良したり、また装置開発のうえで新たに生じた問題を解決するためのモデル化を行なっていき解析コードの進化をはかる。

## [4] Methods

### [4.1] 基盤流体コード

解析対象の流体が希薄になると通常の汎用ソフトが前提としている様々な物理的仮定が成り立たなくなる。例えば、

- ◇ 流れ場は固体界面でスリップしない。
- ◇ 温度は固体界面で連続である（流体と固体は同じ温度である）。
- ◇ 浮力に関してはブジネスク近似が成立する。

などは半導体装置内では成立しない。

これに関する対策は、市販のソフトが用いている **Navier-Stokes Eq.** はじつは気体分子運動論の方程式から生成されるということを思い出してみれば非常に明快になる。

具体的には **Boltzmann Transport Eq.** を直接解くことになる。現状の計算機パワーを考えると、直接モンテカルロ法と最大衝突法を併用して実際の希薄気体を素直にシミュレーションすることはワークステーションレベルでも十分可能と考えられる。

### [4.2] Chemical Reactions

化学反応のモデル化には2つの側面があると考えられる。1つは化学反応自体の素過程の問題で、今1つはウェーハ表面上での蒸着に関するモデル化であろう。後者に関してはウェーハ表面での原子間ポテンシャルがモデル化されれば分子動力学法等を用いて結晶成長シミュレーションを行なうことが可能であるが、前者については反応素過程まで計算によって解明できるまでには至っていない。但し、わかった範囲内での反応モデルを用いて反応がいつ、どこで、どの程度進行するか、また生成した化学種はその後どのように装置内を流れていくかは今現在の技術で十分対応できる。

### [4.3] Radiation, Plasma and Microcontamination

この3つに関してはモンテカルロ法の範疇の問題として十分対処できる。但し、プラズマに関しては新たに電磁場の方程式を加える必要があるがこれに関しては技術的な問題はなにもない。

これは3つのモデル化について、あくまでも発生したあとの粒子の挙動を追いかけるという側面に限った話で、その発生のメカニズムのモデル化となると不明な点が多く、化学反応の素過程同様に数値解析以前のサイエンスとしての色彩が濃いと感ずる。