

PROCOT とは

PROCOT (PROcess of COMpound) は、MOCVD により成長させた化合物半導体の 2/3 次元のプロセスシミュレーションソフトウェアです。MOCVD 用反応器の形状及び成長させる物質や成長条件を定義すると、PROCOT は半導体がどのように成長するかを解析してくれます。質量や熱の移動、化学的動力学を詳細に解析することにより、ドーパントや結晶欠陥の分布、組成や厚みの不均一さを検証することが可能です。MOCVD における化学反応やガスや温度の輸送現象は複雑であるため、結晶の成長具合を予見することは大変難しく、これまでは実験による経験を頼りに作業を行っていました。多くの半導体プロセス技術者は、秘密のレシピともいえるべき MOCVD による結晶成長の諸条件を持っていますが、それらはコストの掛かるトライアンドエラーによって改善され、ようやく得られるものです。PROCOT はそのようなトライアンドエラーのサイクルを減らし、全体的な製造コストを削減するためのツールです。

PROCOT は 2 種類の技術者に役立つツールとなり得るでしょう。1) 新しいデポジションプロセス条件を模索している、或いは現在の条件をより改善したいと考えている MOCVD 技術者、2) リアクターのデザインを最適にしようと考えている MOCVD 製造装置設計技術者、といった技術者です。

1. 適用例

PROCOT は汎用性の高い MOCVD リアクターのシミュレータで、シミュレーションを行う際、リアクターの形状や使用する化学物質の数に制限はありません。しかしここで紹介している例題などは、化合物薄膜アプリケーションの中のレーザダイオードや発光ダイオードのような電子デバイスや光・電子デバイスが殆どです。

例題として、GaN、InP、GaAs、InN、AlN、InGaAs、AlGaAs、AlGaAs、InGaAs、InGaAsP 等の他にも多くの 3 元素、4 元素化合物があります。PROCOT はドーパントや不純物の化合物への抽入のスタディに用いることも可能です。

2. 物理モデルと優れた機能

MOCVD リアクターの任意断面や 3 次元構造体において、化学的、物理的法則を支配する幾つかの微分方程式を有限要素法を用いて解析いたします。次のいくつかの機能が PROCOT の特徴として挙げられます。

- * **化学的動力学モデル** 無数の粒子の計算を行う際、実験値や理論値の気体と表面の反応レートを使用。
- * **質量輸送/保存方程式** 気体と表面の粒子の化学反応を考慮。複数の粒子の拡散や、対流が質量輸送の主な原因である。
- * **ナビ・エストークス流体力学方程式(運動量保存)** 全ての粒子の対流の支配方程式。
- * **熱伝導方程式(エネルギー保存則)** リアクター内の温度分布を得るために熱伝導方程式を計算いたします。全ての反応速度は温度に依存するので、正確に温度を見積もることが重要です。
- * **化学反応粒子のライブラリ** データの更新などが行い易いよう、ユーザが化学的なデータや輸送特性変数を定義可能な材料ライブラリを用意しております。
- * **過渡・定常状態の解析** 異なる成膜条件における過渡・定常現象をシミュレーションすることが可能です。例えば、電子光学機器の多重量子井戸の成長には、過渡と定常状態の解析の組み合わせが有効です。
- * **モデルのレベル化** 異なるレベルのモデルの解析がプロセス設計にて解析可能である。はじめのレベルのモデルでは、反応時の全ての粒子がよく混ざった（攪拌された）状態であるという仮定の下、最終的な生成物を検証することが出来ます。これは全ての化学物質が素早く表面に移動するという前提の下での結果となります。次のレベルでは、質量と熱の移動を考慮するため2次元のメッシュが用いられます。最後のレベルでは、実際のMOCVD成長プロセスを模倣したもので、3次元解析を行うものです。

3. 機能

MOCVD成膜時の制御変数の設定や入力、解析結果を参照するために便利なグラフィカルユーザ インターフェイス (GUI) が利用できます。

PROCOMには以下の入力機能が装備されております。

- * **SimuProcom** グラフィカル ユーザ インターフェイス (GUI) プログラムのSimuProcomは、さまざまなPROCOMの機能を制御するためのものです。これによりPROCOMのツール（ウィザード）を起動することができ、コマンドのオンラインヘルプを開いたり、入力しなくてはならないコマンドの数を減らすことが可能となります。化学反応は事前に登録されている化学物質を選択するウィザードを使用することで設定可能です。

- * **GeoEditor** グラフィカル ユーザ インターフェイス (GUI) のGeoEditorは、任意のリアクターの形状を定義する際に用いられます。注入・排出ガスはこのGUI上で幾つでも設定可能です。PROCOMにより何種類もの結果を出力することができます。結果としては以下のものが挙げられます。
- * **化学物質分布** ガス、表面粒子の2次元・3次元分布
- * **ガスの化学反応レート** 2次元・3次元分布。
- * **流速** 2次元・3次元分布。
- * **温度** 2次元・3次元分布。
- * **膜の堆積レート** 2次元・3次元モデルにおける分布関数。堆積レートはレベル1の高速解析（十分攪拌されたモデル）では温度の関数で、結晶成長温度の最適化に役立つでしょう。
- * **膜の組成** ドーパントや他の不純物分布が解析できます。2次元・3次元データを、グラフィカル ユーザ インターフェイス CrosslightView で可視化することが可能です。これにより汎用的な2次元・3次元の表示の制御が可能ですし、無償でも利用可能なグラフィック表示ソフトGNUPLLOTなども利用できます。

4. 例題

- (1) 図1はGeoEditorを使用して、テストケースとしてMOCVDリアクターの形状を定義している様子を表しています。ガスの注入・排出口と基板は解析領域の境界として取り扱われています。
- (2) 図2では、テストケースの構造体の2次元メッシュを表示しています。
- (3) 図3は、SimuProcomの制御プログラムのGUIと、化学反応方程式のエディタの表示です。
- (4) 図4はユーザによる設定変更が可能な化学物質マクロライブラリの一部の表示です。PROCOMでは化学物質の物性情報として多くのデータが使用されています。
- (5) 図5は解析後の温度分布を等高線で表したものとリアクターの水平面内におけるガスの流れの流線です。
- (6) 図6は、レベル1の高速解析（十分攪拌された状態）のGaNの成長レートと温度の様子を表したものです。
- (7) 図7はGaN成膜例題での、MMGaの基板付近の2次元分布です。
- (8) 図8はGaN成膜モデルの2次元解析結果で結晶成長レートと位置の関係です。

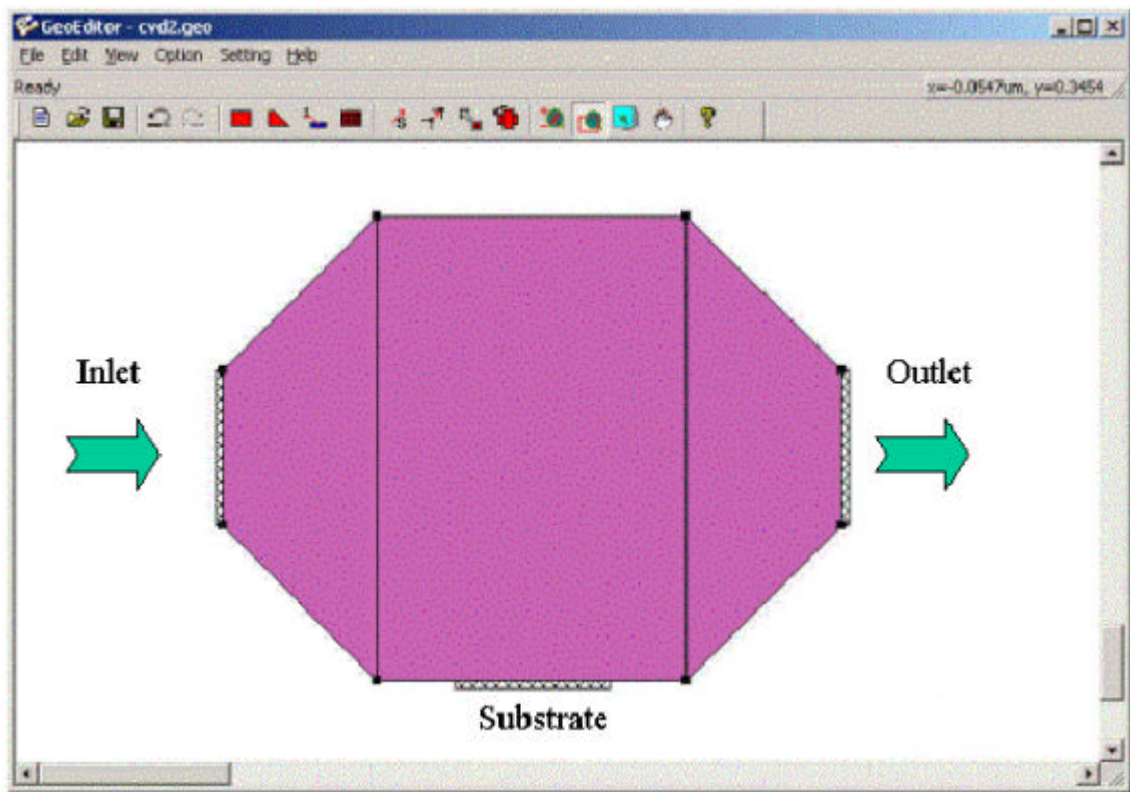


図 1: テストケースとして簡単なモデルのMOCVDリアクターを設定したGeoEditorの画面表示

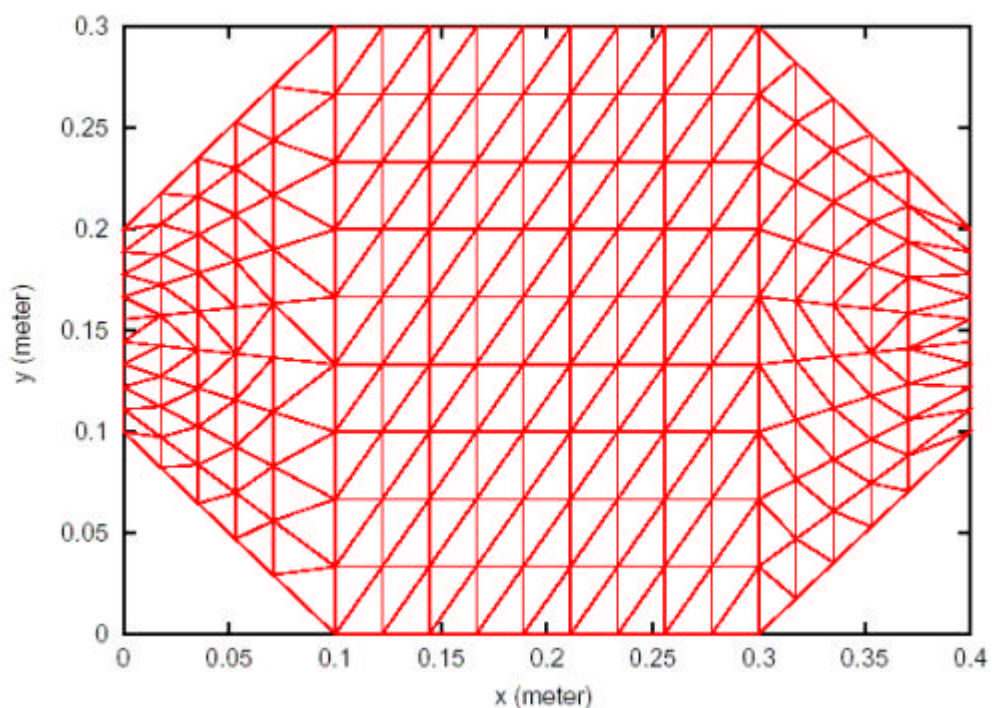


図 2 PROCOMで使用するテストモデルの有限要素メッシュ図

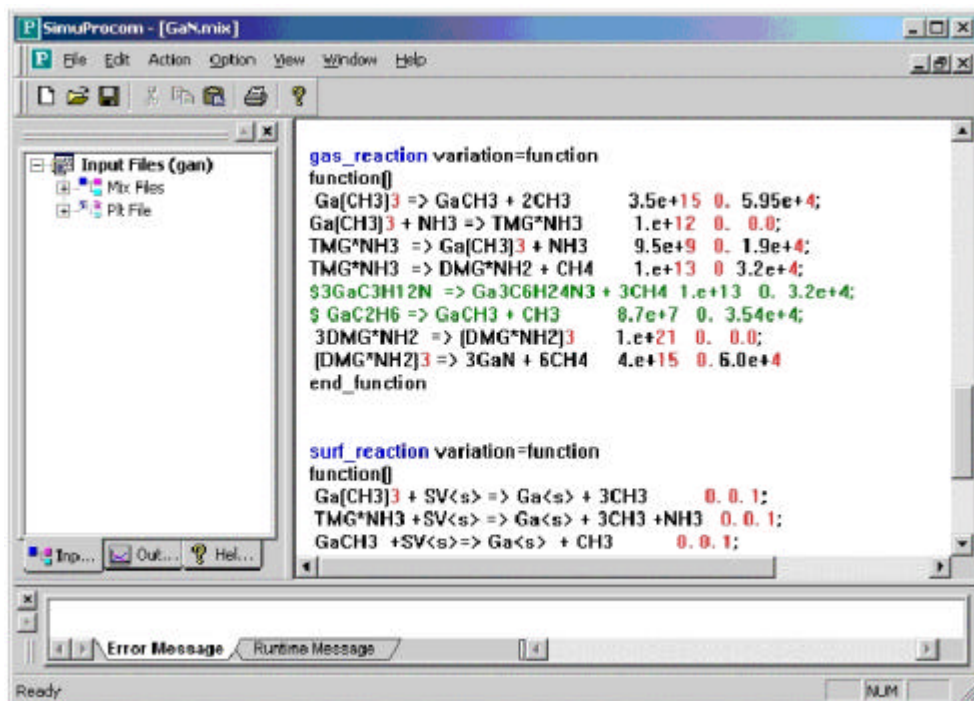


図 3 GaN成膜の化学反応の設定を行っているSimuProcom
のグラフィカル ユーザ インターフェイス

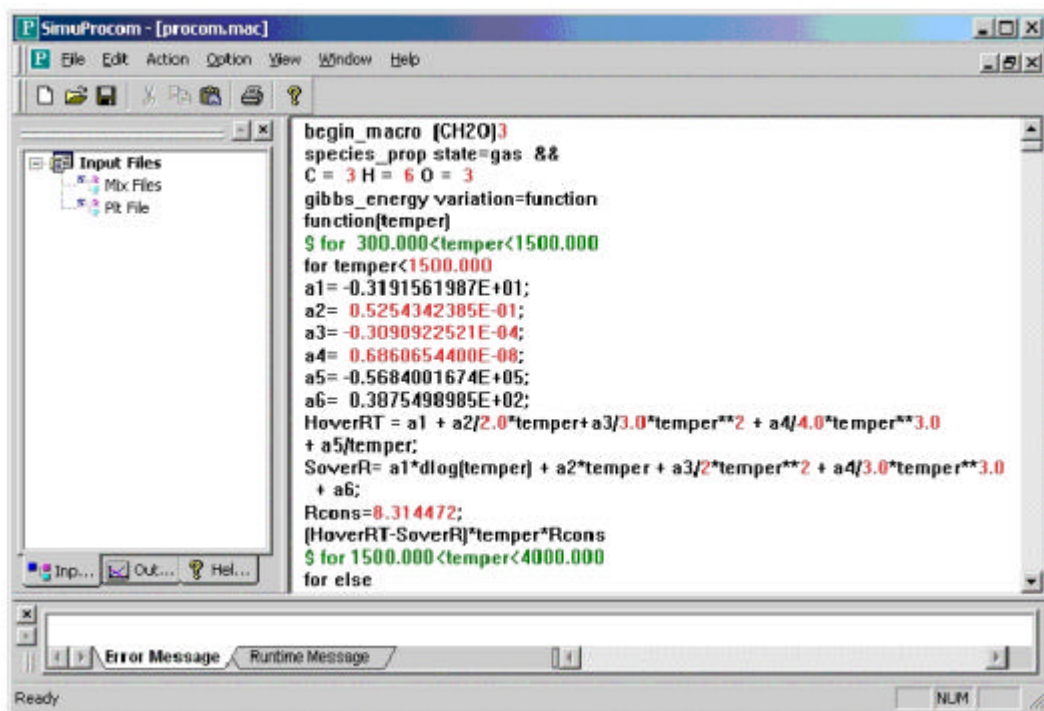


図4 ユーザにより編集可能な物性のマクロライブラリ

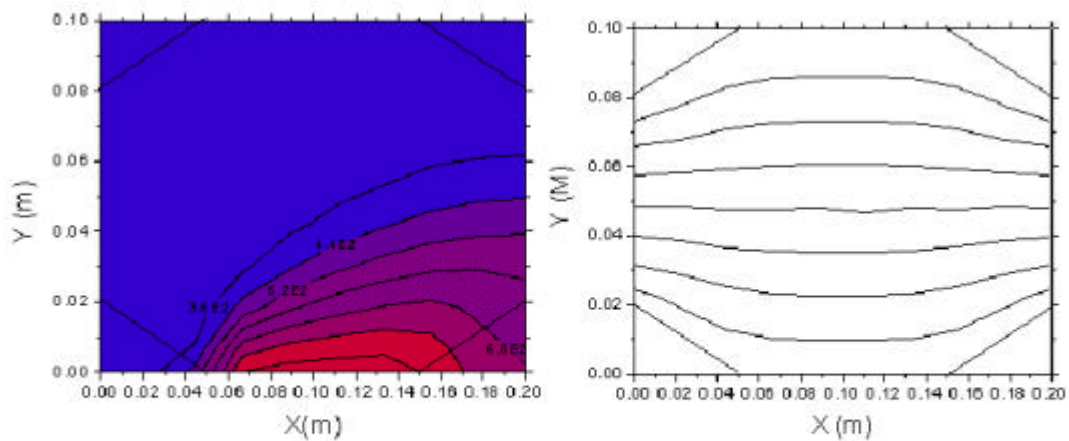


図5 解析結果 リアクター内の温度分布と流線

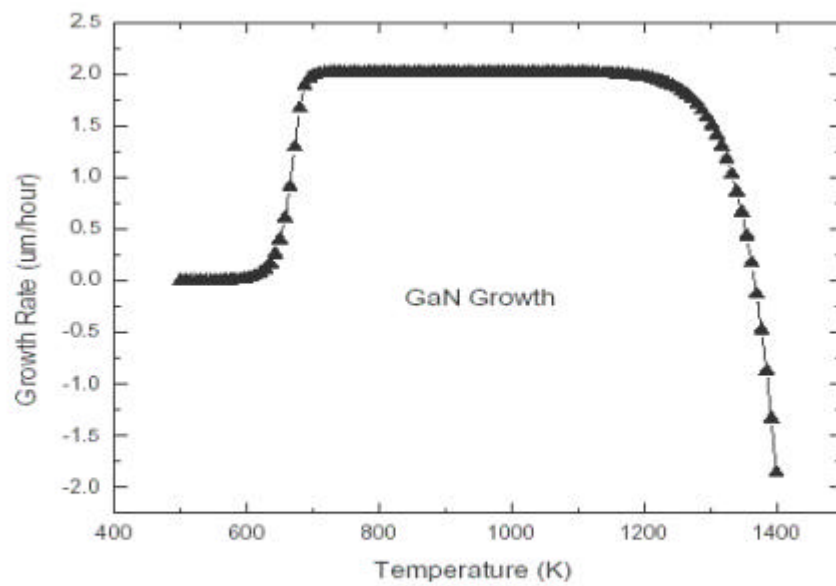


図6 高速な動化学解析は結晶成長の最適温度の検証に利用

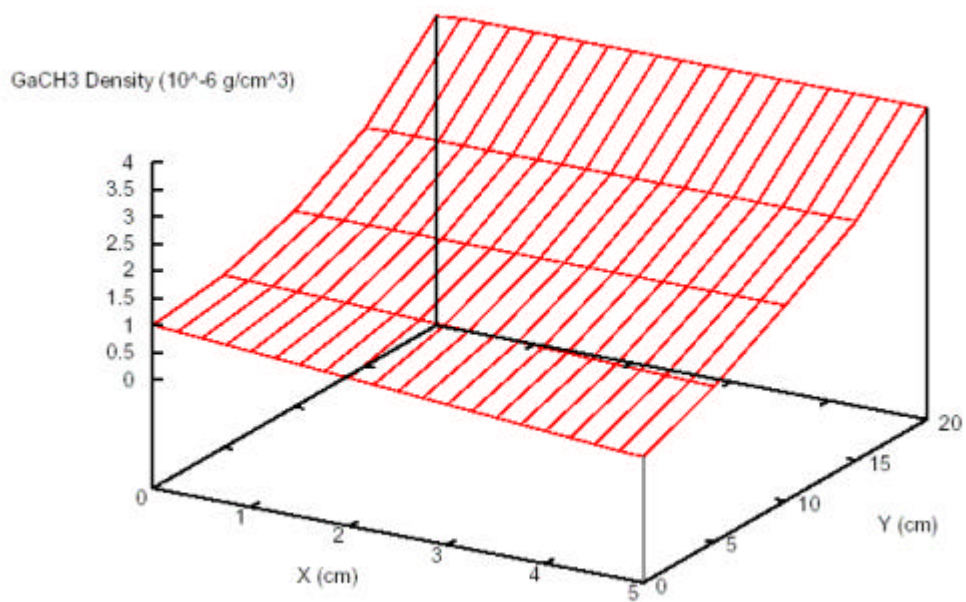


図7 GaN成膜解析での基板付近のMMGaの2次元分布

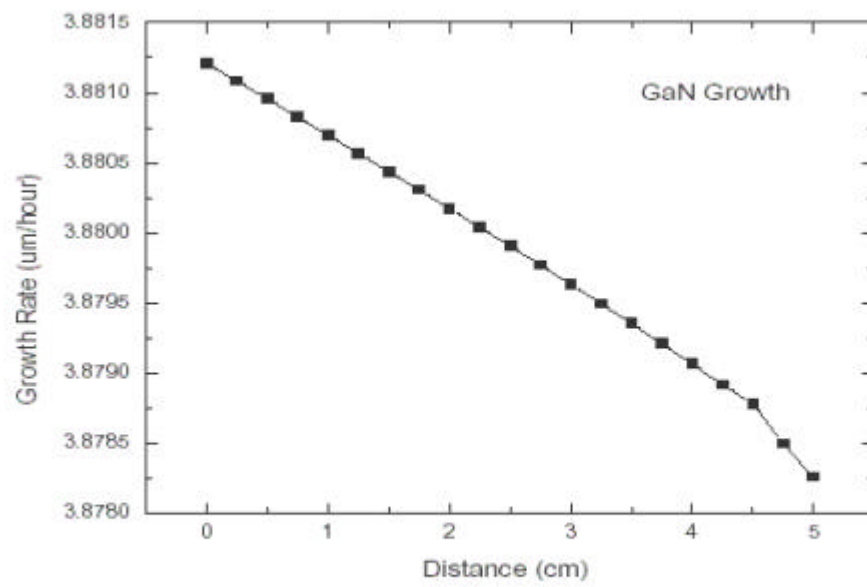


図 8 PROCOMによるGaN成膜解析例 位置と結晶成長レートの関係