

論文の内容の要旨

論文題目 A Study on InP/GaAs MOVPE Process optimization by Multiscale Analysis
(マルチスケール解析を用いた InP/GaAs MOVPE プロセスの高度化)

氏名 吳 豪振

緒言

InP/GaAs 系 MOVPE プロセスの高度化のためには CVD プロセス中の様々な化学反応と物理現象を理解することが重要である。そのためには CVD プロセスをマルチスケールで総括的に解析するのが前提である。化合物半導体の選択 MOVPE 成長はマスク形状および面積を調整することにより成長速度や組成が制御でき、導波路や能動素子を 1 回の成長でモノリシック集積することが可能であるため、OEICs 実現に重要な技術である。本研究では、反応器スケールの解析から選択成長した膜の成長速度分布の解析という手法までのマルチスケールを用いて MOVPE を解析した。この研究の成果は CVD 反応器の設計やスケールアップなどの化学工学分野、面積選択成長のためのマスク設計などのデバイスプロセス分野に寄与することが予想される。本論分では第 1 章では概要を、第 2 章、第 3 章ではマクロスケール解析、ミクロスケール解析の結果をそれぞれ述べ、第 4 章に成果の応用を説明している。

第 1 章にはこれまでの CVD 解析の手法を分析し、InP/GaAs 系 MOVPE の解析に適切な手法を議論する。次の内容を議論する。MOVPE では気相反応の研究に比べ、表面反応の研究はその適切な方法が少なかったためあまり進んでいなかった。本研究では反応器スケールでの研究とミクロスケールでの選択 MOVPE した薄膜の膜厚分布解析を用いて表面での反応速度に関する情報を調べた。このマルチスケール方法によって気相拡散定数 (D) をマクロ解析から、 D/k をマイクロ解析から求め、結果的により正確な表面反応定数が得られた。この結果は MOVPE プロセスの TCAD の元になる。

第 2 章には反応器スケールでの解析を用いたマルチスケール解析が行われた。この解析を用いて反応モデルの構築、原料分解速度の測定、拡散定数 D の計算が可能になった。この D はミクロスケール解析に使われる。

第 3 章にはミクロスケール解析を議論した。その手法は左と右にそれぞれ $50\mu\text{m}$ の幅を持つマスクがあり、その二つのマスク間の $380\mu\text{m}$ の成長領域の成長増加比率 (Growth Enhancement Ratio, 製膜速度をマスクが無い部分での製膜速度にて規格化した値) を検討した。温度、全圧、V 族の分圧、滞留時間等の様々な条件を変えて実験を行い表面反応速度定数を調べた。GaAs 製膜については、 883K 付近で活性化エネルギーの変化が見られ、表面反応機構がこの温度を境に変化しているものと思われる。気相拡散支配領域を用いる広幅 3 元及び 4 元系選択成長 (WIDE - GAP SAG) によって In/Ga 比は In 製膜種と Ga 製膜種の表面付着確率の差によって異なる。In と Ga は 1 より小さい付着確率を持ち、温度、V 族分圧、V 族原料の種類に依存することが最近報告された。本研究では V 族の原料として有機系 (TBP, TBA s) 及び HYDRIDE 系 (PH_3 , AsH_3) 原料

が使われた場合の In/Ga プロファイル変化を議論する。

選択成長解析手法を用いて InP 製膜種 (TBP、PH₃)、GaAs 製膜種 (TBAs、AsH₃) の表面付着率が求められた。その結果、成長温度 873K の場合、GaAs の場合は V 族原料によって付着確率の変化があまり見られなかったが、InP の場合は PH₃ を用いた場合が TBP を使った場合の 2.3 倍弱の付着確率を持つことが確認された。この結果によって HYDRIDE 系原料を使った 3 原系成長の場合、有機系に比べ In-rich の領域が広がる。この結果は選択成長の場合、V 族の原料の選択も重要なプロセス制御因子であることを意味する。

上に述べられたこと以外に、この選択成長を実際のプロセスで活用する時の問題点の一つはマスク上の核発生である。これまでの報告ではマスク上の核発生を表面拡散で説明したものが主流だったが、本発表はマスク上の III 族原料の濃度分布と深く関係があることを報告する。

実験は、製膜種のパターン直上での気相濃度分布を決定する D (気相拡散定数) / k (表面反応速度定数) を求めるためのパターン、1 mm と 2 mm の幅のマスクを含む核発生観察用のパターンに同時に成長した。成長温度は 873 K、原料分圧を一定に保ちながら全圧 100 mbar と 50 mbar の条件で成長した。その結果、マスク上に核が発生したのは、100 mbar、2 mm 幅マスクの場合のみだった。マスク上の表面拡散が支配要因であれば、全圧に依存せずに 2 mm 幅マスクの上には核が発生するはずである。一方、測定した D/k を用いて計算したマスク直上の製膜種の濃度分布を比較すると、マスクがない部分に対する相対濃度が閾値を超えると核が発生すると考えることで、実験結果を説明できた。これより、核発生の支配要因は気相の製膜種濃度分布であり、実験で各製膜条件に対する核発生の閾値を求めておけば、任意のマスク形状に対して核の発生を予測できる可能性が示唆された。核が発生し始まる THRESHOLD は \square 族製膜種の濃度及び \square 族製膜種の濃度 * \square 族製膜種に関連する。この THRESHOLD の変化を温度、V/III 比と関連して考察した。温度によっては THRESHOLD が高くなることが確認された。

第 4 章では第 2 章、第 3 章の内容をもとにモデルを作り、それをマクロスケール、ミクロスケールそれぞれに適用した。その結果、マクロスケールでは予測が精密になり、ミクロスケールではマスクの形状による組成の予測が 3 次元シミュレーションを用いて可能になった。

第 5 章では現段階の問題点と今後の研究の展開方向を示している。