

## Virtual-Reactor CVD-SiC edition Version 7.6

### 新機能のご案内

Virtual Reactor は気相からのバルク結晶およびエピ成長シミュレーションソフトウェアです。各種バルク結晶成長方法および結晶種に対応しており、リアクター内の温度分布、対流パターン、各種成分濃度分布、成長速度分布等を求めることができます。

#### 主な新機能、及び改善点

##### 1. HCl を考慮した際のパーティクル生成モデルの拡張

SiH<sub>4</sub>+C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> モデルにおいて、HCl を考慮した際についても Si パーティクルの生成を考慮できるようになりました。

##### 2. ドーピングモデルの改良

SiH<sub>4</sub>+C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> モデルにおいて、ドーピングモデルが改良されました。

###### 従来モデル

- ・N<sub>2</sub> を使用した N ドーピング (HCl の考慮不可)
- ・TMAI を使用した Al ドーピング (HCl の考慮可)

###### 追加モデル (従来モデルに追加して)

- ・N<sub>2</sub> を使用した N ドーピング (HCl の考慮可)
- ・NH<sub>3</sub> を使用した N ドーピング (HCl の考慮可)
- ・NH<sub>3</sub> or N<sub>2</sub> と TMAI を使用した Al と N のコドーピング (HCl の考慮可)

##### 3. 温度差を指定した境界温度の設定機能の改良

一定値を加算した温度条件の機能が改良されました。

##### 4. 変数を使用した回転数の設定機能の改良

回転数に変数 (V1～V5) を設定することができるようになりました。

##### 5. Process タブ、可視化処理におけるコメント機能の追加

Process タブ、可視化処理において計算条件などの識別用のコメントを追加できるようになりました。

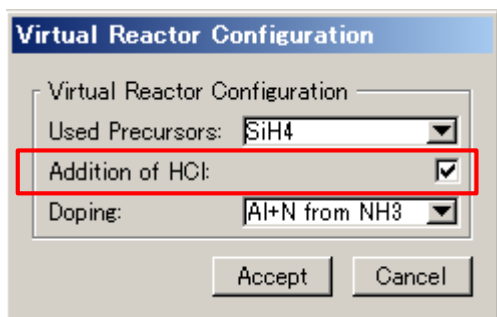
## 1. HCl を考慮した際のパーティクル生成モデルの拡張

これまでのバージョンにおいては、HCl を考慮した  $\text{SiH}_4 + \text{C}_3\text{H}_8$  系ではシリコンパーティクル生成が起こらないとの仮定のもと計算を行っていました。

本バージョンより、気相における気相中のシリコンガスと HCl の気相反応、また生成したシリコンパーティクルと HCl の相互作用(HCl によるエッチング)が考慮できるようになりました。

尚、シリコンパーティクル生成に関するパラメータとして、HCl のモデル係数を設定できます。

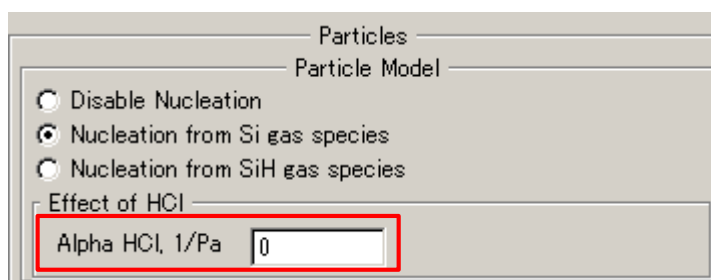
※menu bar/Virtual Reactor Chemical Model



※menu bar/Options/Model parameters : Particles

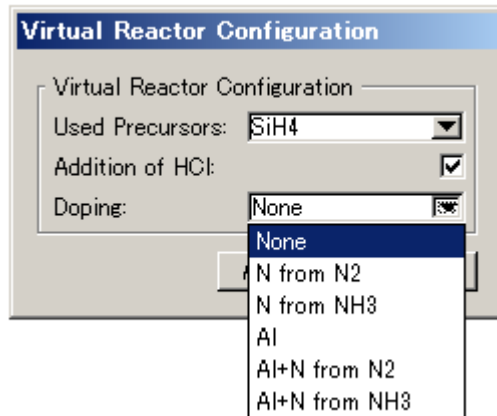
Alpha HCl にて、HCl によるシリコンパーティクルのエッチング速度を調整します。

値が大きいほどパーティクルエッチング速度が速く、小さいほど遅くなります



## 2. ドーピングモデルの改良

SiH<sub>4</sub>+C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> モデルにおいては、現バージョンにおいて以下のドーピングモデルが選択できます。



- ・None : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (ドーピングの考慮なし)
- ・N from N<sub>2</sub> : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (N<sub>2</sub> を使用した Nドーピングを考慮)
- ・N from NH<sub>3</sub> : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (NH<sub>3</sub> を使用した Nドーピングを考慮)
- ・Al : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (TMAI を使用した Alドーピングを考慮)
- ・Al+N from N<sub>2</sub> : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (N<sub>2</sub> と TMAI を使用した N と Al コドーピングを考慮)
- ・Al+N from NH<sub>3</sub> : SiH<sub>4</sub> + C<sub>3</sub>H<sub>8</sub> 系での SiC 成膜計算 (NH<sub>3</sub> と TMAI を使用した N と Al コドーピングを考慮)

※Addition of HCl にチェックを入れると上記の系に HClを考慮することが可能です。

※上記の系でシリコンパーティクルを考慮することが可能です。

ドーピングの計算条件の詳細設定は Model parameters および Surface Kinetics ウィンドウで行います。

※menu bar/Options/Model parameters : SiC Doping

それぞれのドーパントに応じて、SiN、AlC の熱力学パラメーター $K^{\text{SiN}}(T)$ 、 $K^{\text{AlC}}(T)$  を設定します。この値はアレニウス型の温度の関数で定義され、実測データへのフィッティングパラメータとして使用することができます。

・N doping

SiC Doping	
$K^{\text{SiN}}(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$	A
	1.108E-007
	E, kJ/mol
	4.187

•Al doping

SiC Doping

$$K^{AlC}(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

A	3.25E+008
E, kJ/mol	500

•N + Al doping

SiC Doping

$$K^{AlC}(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

A	3.25E+008
E, kJ/mol	500

---


$$K^{SiN}(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right)$$

A	1.108E-007
E, kJ/mol	4.187

※menu bar/Options/Surface Kinetics : SiC Nitrogen Doping Model Sticking Coefficients

N doping モデルを選択した場合は、「Surface Kinetics」ウィンドウにおいて表面反応に関する各化学種の付着係数の設定が可能です。(本項もフィッティングパラメータとして使用できます。)

•N doping from N<sub>2</sub>

SiC Nitrogen Doping Model Sticking Coefficients

SiC

	A	E [kJ/mol]	2 Ranges	T1 [K]
Alpha_N2	3E+022	945.3302	<input type="checkbox"/>	
Alpha_HCN	1	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_SiN	0	0	<input type="checkbox"/>	

**Doping surface reactions**

- 2Si + N<sub>2</sub> ⇌ 2SiN(solid)
- SiN(gas) ⇌ SiN(solid)
- Si + HCN ⇌ SiN(solid) + 1/2C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>

•N doping from NH<sub>3</sub>

SiC Nitrogen Doping Model Sticking Coefficients

SiC

	A	E [kJ/mol]	2 Ranges	T1 [K]
Alpha_NH3	1	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_NH2	1	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_NH	1	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_N2	0	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_HCN	0	0	<input type="checkbox"/>	
Alpha_SiN	0	0	<input type="checkbox"/>	

**Doping surface reactions**

- Si + NH<sub>3</sub> ⇌ SiN(solid) + 3/2H<sub>2</sub>
- Si + NH<sub>2</sub> ⇌ SiN(solid) + H<sub>2</sub>
- Si + NH ⇌ SiN(solid) + 1/2H<sub>2</sub>
- SiN(gas) ⇌ SiN(solid)
- Si + HCN ⇌ SiN(solid) + 1/2C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>
- 2NH<sub>3</sub> ⇌ N<sub>2</sub> + 3H<sub>2</sub>

### 3. 温度差を指定した境界温度の設定機能の改良

境界における温度条件の設定方法が改良されました。本バージョンでリリースされた新機能と合わせて、温度差を指定した境界温度の設定機能を説明します。

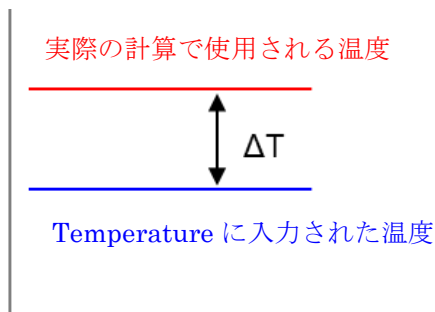
通常の境界における温度条件の設定からに変更を加える際に、「Increment Temperature」機能を使用することで、設定した温度条件に対する温度差( $\Delta T$ )を指定した計算が可能になります。(「Increment Temperature」機能を有効にした場合は、設定した温度条件に温度差( $\Delta T$ )が付加された境界温度での計算が実行されます。尚、 $\Delta T$  値にマイナスの値を入力すると設定した温度条件から減算されます。)この機能は複雑な温度プロファイルを考慮した計算に対して、温度プロファイル形状を維持した別の計算を実施したい場合などに有効です。

【Temperature : 「Constant」、「Piecewise Linear」、「Piecewise Constant」で条件指定した場合】

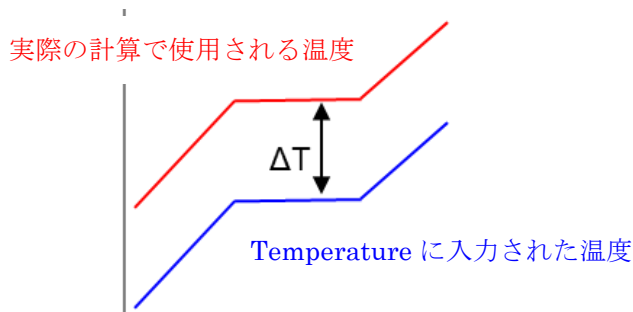
※Temperature : 「Constant」、「Piecewise Linear」、「Piecewise Constant」で条件指定した場合は従来の仕様から変更はありません

Boundary に設定した温度条件に対して、 $\Delta T$  で入力した値が加算された値が Boundary の境界温度条件となります。(  $\Delta T$  値がマイナス値の場合は減算)

(例 1) constant



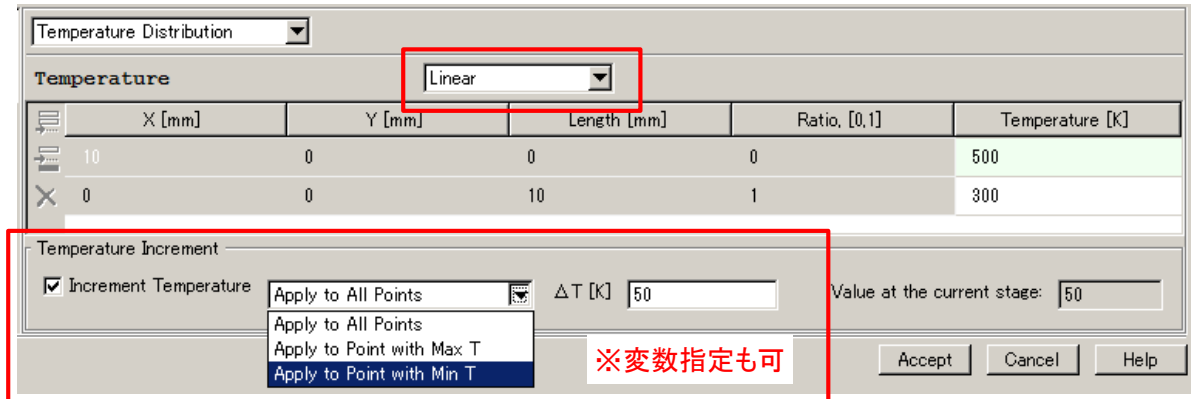
(例 2) Piecewise Linear



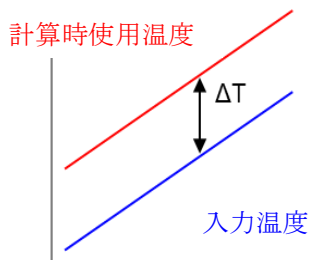
【Temperature : 「Linear」で条件指定した場合】

温度条件の設定で「Linear」を選択した場合は、設定条件全体、最大もしくは最小設定温度のみへの加算の三通りから選択できます。

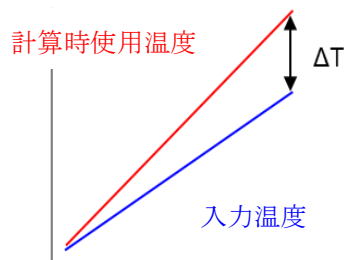
※従来の仕様では Apply to All Points のみが考慮可能でした。



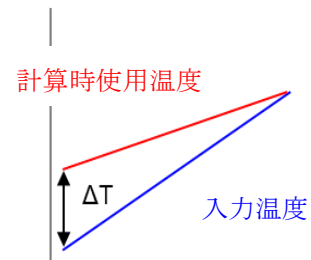
・Apply to All Points



・Apply to Point with Max T(※)



・Apply to Point with Min T(※)



※設定温度がどちらも同じ値の場合は Boundary の起点 (Max T 設定) もしくは終点 (Min T 設定) のいずれか片方に  $\Delta T$  が加算されます。

「Increment Temperature」の $\Delta T$ には変数(V1~V5)も指定が可能です。たとえば長時間成長プロセス中の温度変化や温度条件の Parametric Study などを実施する場合などは、プロセスタブの「User Defined Parameters」の変数部分を利用することで、境界条件の温度設定が容易に実行できます。

(例)  $T=300\sim 500[K]$ 、 $\Delta T=V1*100[K]$  (Apply to All Points)、 $V1=0, 1, 2$  と設定した場合

Temperature Distribution

Temperature: Linear

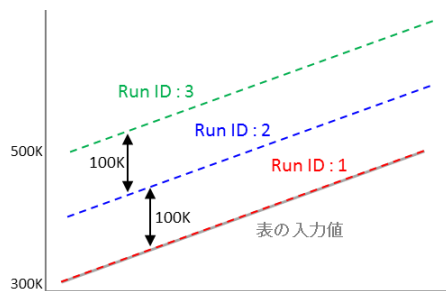
X [mm]	Y [mm]	Length [mm]	Ratio, [0,1]	Temperature [K]
10	0	0	0	300
0	0	10	1	500

Temperature Increment

Increment Temperature Apply to All Points  $\Delta T [K]$   $V1*100$  Value at the current stage: 0

Run ID	Pressure [Pa]	Shift [mm]	Fitting (On/Off)	V1
0	50000	-	Off	0
1	50000	-	Off	1
2	50000	-	Off	2

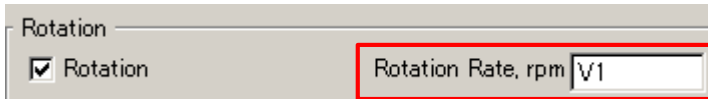
各 Run ID での Boundary の温度条件プロファイル



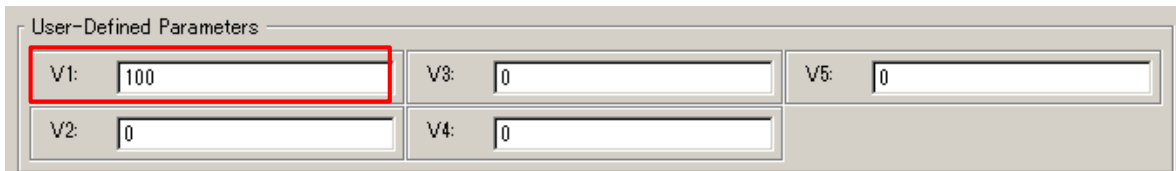
#### 4. 変数を使用した回転数の設定機能の改良

回転数に変数(V1~V5)を設定できるようになりました。

- ・メニューバー/Options/Model parameters : Rotation



- ・プロセスタブ// Edit Step : User -Defined Parameters



回転数に変数を設定した場合、プロセスタブで設定する各 Step において、「User Defined Parameters」の変数部分を利用することで、回転数の Parametric Study を容易に実行できます。

#### 5. Process タブ、可視化処理におけるコメント機能の追加

Process タブ、可視化処理において計算条件などの識別用のコメントを追加できるようになりました。このコメントによりパラメトリックスタディ時の各計算条件の識別等にご利用いただけます。

- ・Process タブ// Create Steps : User -Comments

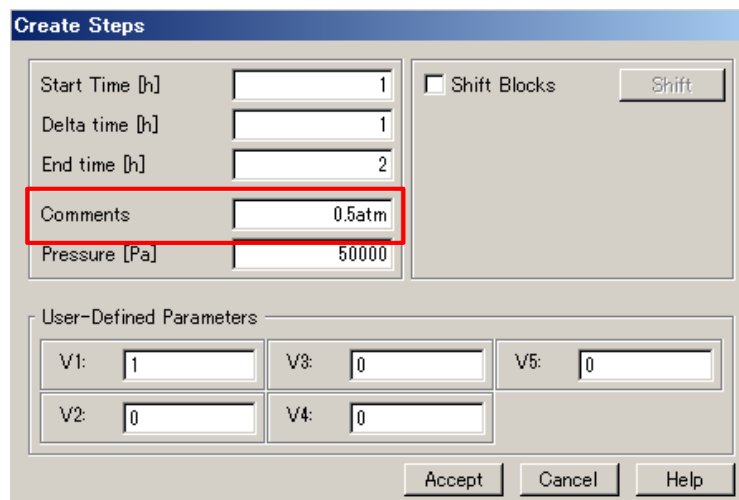


図. コメント挿入の画面



・メニューバー/Options/Process Visualization -Comments

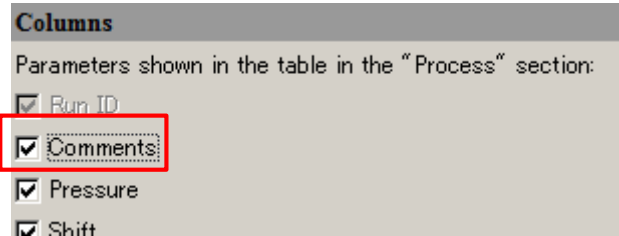


図. Process タブへの出力項目選択の画面

・メニューバー/Options/Output Variables –Run Identification

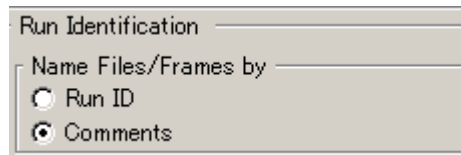


図. 可視化処理での識別方法の選択(Run ID or Comments)の画面

Process タブでのコメントの表示

Run ID	Comments	Pressure [Pa]	Shift [mm]	Fitting (On/Off)	V1
1	1atm	100000	-	Off	15
2	0.5atm	50000	-	Off	15
3	10slm for N2	100000	-	Off	15

図. Process タブ画面

可視化処理の計算切り替え (Comment 表示の場合)



図. 1D, 2D Visualization での計算切り替え部分 (Comments 表示の場合)

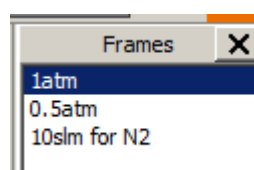


図. View 2D での計算(Frames)切替部分 (Comments 表示の場合)