

Si単結晶引き上げプロセスの 数値解析技術

φ300 mmウェーハ用結晶を 実現するシミュレーション

Si(シリコン)ウェーハの材料であるSi単結晶の引き上げプロセスを数値的に解析する技術を開発しています。Si融液を凝固させて単結晶を成長させながら引き上げて製造するプロセスに対して、融液の熱流動を予測できるようにしました。また、引き上げプロセスで発生する空洞欠陥の密度や大きさを定量的に予測する技術を開発しました。この解析技術により、φ300 mmウェーハに対応した大口径の単結晶を安定的に製造する引き上げ技術の開発や、デバイスメーカーの要求に対応した高品位ウェーハの開発に寄与しています。

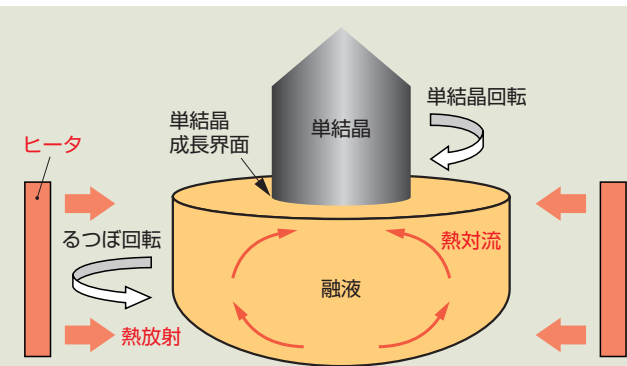


図1. 引き上げプロセスにおける融液の熱流動を支配する要因 — 融液の熱流動は、融液に対する熱環境や結晶回転、融液を保持するるつぼの回転などで決定されます。

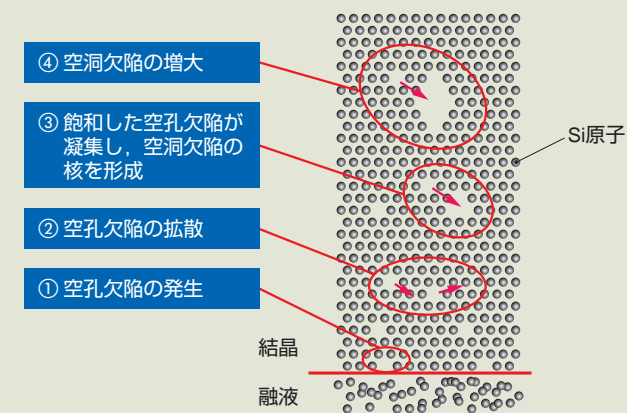


図2. 空洞欠陥の発生と増大のメカニズム — 拡散により移動してきた空洞欠陥が核に集まることで、空洞欠陥が増大します。

Si単結晶引き上げプロセスの課題

Siウェーハの材料であるSi単結晶は、Si多結晶を1,400℃以上に加熱して溶融し、このSi融液を凝固させて単結晶を成長させながら引き上げることで製造されます。このとき、単結晶の形状は融液の温度分布に大きく影響されます。このため、安定して成長させるには、融液熱対流の制御が重要となります。

また、引き上げプロセスでは、0.1~0.2 μmの正八面体形状の空洞欠陥が発生する場合があります。半導体デバイスの線幅の微細化に伴い、この空洞欠陥の制御が重要な課題となっています。

以上の課題に対して、融液の熱流動と単結晶に発生する空洞欠陥を解析す

る技術を開発し、東芝セラミックス(株)で製造するSi単結晶の大口径化と高品位化に寄与しています。

数値解析技術の開発

引き上げプロセスにおける融液の熱流動を支配する要因を、図1に示します。熱流動は、融液に対する熱環境や、単結晶と融液を保持するるつぼの回転などで決定されます。

空洞欠陥の発生と増大のメカニズムを図2に示します。単結晶成長界面では、単結晶中にSi原子1個が抜けている状態の空洞欠陥が発生します。この空洞欠陥濃度が高くなると、空洞欠陥が集まり、空洞欠陥の核が形成されます。そして拡散により移動してきた空洞欠陥が核に集まることで、空洞欠陥

が増大します。

以上の現象を、現実の装置構造を対象として解析する技術を開発しました。融液熱流動は、装置や単結晶の温度分布と連成して解析します。欠陥解析では、空洞欠陥の発生に関するVoronkov提唱のモデルを実際の単結晶形状に対応できるように拡張しました。そして、空洞欠陥の発生、空洞欠陥の核形成と増大までを連続して解析します。欠陥の移動と増大の速度は温度によって変化するため、単結晶の温度分布解析結果を参照しながら、欠陥解析を実施します。

大口径化と高品位化への取組み

融液熱流動解析を、単結晶の大口径化に適用しました。φ300 mmウェー

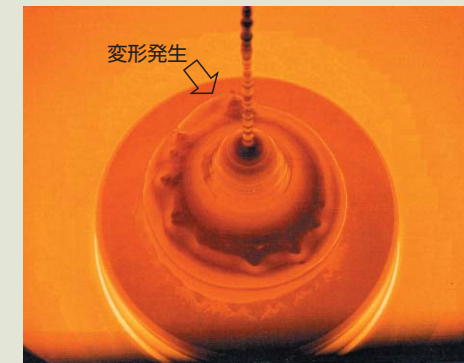


図3. 結晶の変形 — 結晶が成長界面で水平方向に成長して変形した事例です(画像提供: 東芝セラミックス(株))。

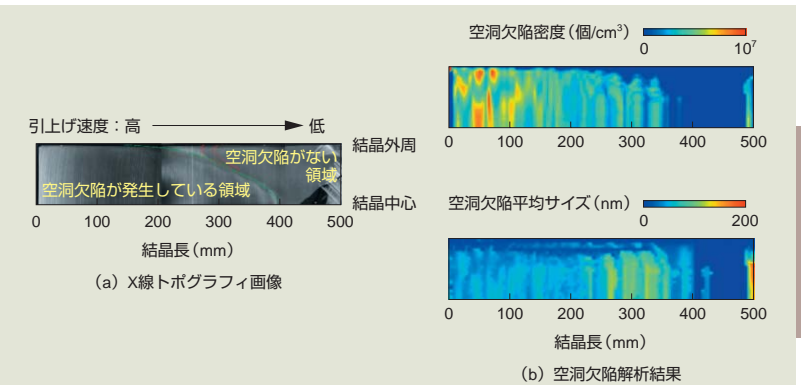


図5. 結晶内での空洞欠陥分布 — 解析(b)の空洞欠陥分布は、実験結果(a)とよく一致しています。

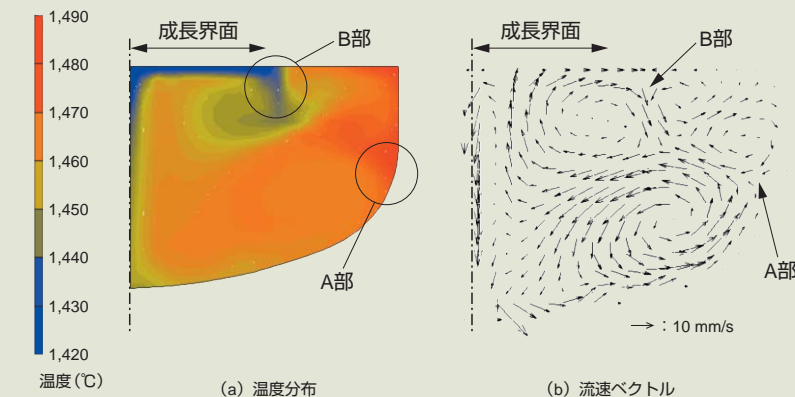


図4. 融液の熱流動解析結果 — 結晶成長界面の外側で、周囲よりも低温となる領域が発生しています。この領域に向かって結晶が成長し、変形が発生すると考えられます。

ハ用の大口径単結晶の引き上げでは、図3に示すように水平方向に成長して変形する場合があります。この変形が発生した条件に対応した熱流動解析結果を図4に示します。るつぼの高温部(A部)から上昇し、成長界面で温度低下した後に、外側に向かう流動が発生しています。この流動が、融液表面で中心に向かう別の流動と衝突して滞留した結果、成長界面の外側で局所的に周囲の融液よりも低温となる領域(B部)が発生しています。融液温度を実測した結果でも、上記の流動現象と低温領域の存在を確認することができました。変形は、この低温領域に向かって単結晶が成長して発生すると考えられます。

以上の解析結果に基づき、Si融液の

熱対流を制御することによりφ300 mmウェーハ用単結晶を対象として、変形を防止しながら、安定して成長する引き上げを実現しました。

また、欠陥解析をウェーハの高品位化に適用しています。実際の空洞欠陥分布と解析結果との比較を図5に示します。(a)は、単結晶を縦割りにしてX線トポグラフィ法により撮影した画像です。この実験では、一本の単結晶の中で、欠陥分布が変化するように、引き上げ速度を最初は速く設定し、徐々に低下させています。引き上げ速度が低いと、成長界面で発生する空洞欠陥数は低下します。この結果、引き上げ後半では、空洞欠陥が発生しなくなっています。

この実験に対して、欠陥解析を実施

した結果を(b)に示します。空洞欠陥が発生している領域は、実験結果と良好に一致しています。この解析技術により空洞欠陥の発生と増大を予測することで、欠陥を精密に制御した高品位ウェーハの開発に寄与しています。

単結晶引き上げ解析の将来展望

ウェーハの高品位化のため、単結晶引き上げでは、酸素析出物や転位の制御も課題となります。これらの予測には、酸素の拡散や単結晶内での応力発生といった現象を解析する必要があり、解析技術の開発を進めています。

中川 泰忠

生産技術センター
部品技術研究センター主任研究員