九州大学学術情報リポジトリ
Kyushu University Institutional Repository

チョクラルスキー法シリコン単結晶成長プロセスにおける結晶欠陥の発生挙動とマランゴニ効果に関する研究

末若，良太

https://hdl.handle.net/2324/7182509

出版情報：Kyushu University, 2023, 博士（工学）, 課程博士
バージョン：
権利関係：

KYUSHU UNIVERSITY

（様式３）Form 3

氏　　名　：　末若　良太

Name

論 文 名　：　チョクラルスキー法シリコン単結晶成長プロセスにおける結晶欠陥の発生挙動とマランゴニ効果に関する研究

Title

区　　分　：　甲

Category

論　文　内　容　の　要　旨

Thesis Summary

本研究では、半導体デバイスに用いられるシリコン単結晶育成方法の主流であるチョクラルスキー法を対象とし、結晶内の点欠陥（空孔と格子間シリコン原子）の移流・拡散・対消滅反応を計算する点欠陥濃度シミュレーションの高精度化と、それを元にした酸素濃度と固形界面形状が grown-in 欠陥挙動に与える影響を明確にした。また、物質熱流動シミュレーションによる、結晶成長中の融液内の流動解析の高精度化に寄与する、酸素濃度差マランゴニ対流の重要性と、それにより固液界面形状と酸素濃度の予測精度が向上することを明確にした。以下にその結果をまとめる。

第 1 章　序論

本研究の背景の、半導体産業の成長の軌跡と、今後の成長分野に関して概説し、シリコン単結晶中の grown-in 欠陥の制御の重要性を示した。その制御には、結晶成長速度 v と融点近傍の軸方向温度勾配 G との比、v/G が重要で、結晶成長中のそれを臨界 v/G 値に保つと、無欠陥結晶になることを示した。そして、臨界 v/G 値は、不純物濃度、固液界面形状、そして結晶内の熱応力により変化するため、その挙動を理解することの重要性を示した。そして、その挙動を明確にする、点欠陥濃度シミュレーションの計算手法を述べた。

さらに、固液界面形状と不純物（特に酸素）濃度を予測するための、物質熱流動シミュレーションの現状と課題を提示した。

第 2 章　酸素濃度が grown-in 欠陥挙動に与える影響

酸素濃度が grown-in 欠陥に与える影響を明確にするために、点欠陥濃度シミュレーション（PDSim）に使用する点欠陥の物性値（自由空孔濃度と、酸素係数）を確定させた。本研究手法は、酸素係数を臨界 v/G 値を実験結果の回帰分析により求めるのではなく、PDSim と実験結果との対比により求める点に特徴がある。

その結果、様々な酸素濃度、結晶径、炉内構造物（HZ）を用いることができ、より現実を表現できる、点欠陥の物性値の確定に至った。

第 3 章　固液界面形状が grown-in 欠陥挙動に与える影響

第 2 章で grown-in 欠陥挙動を高精度に予測できる PDSim が完成した。それを用い、固液界面形状が臨界 v/G 値に与える影響を確認した。従来、固液界面形状により臨臨界 v/G 値が変化するのは、固液界面形状が凹なら

びに凸形状の両方の場合において、点欠陥の拡散方向に影響を与えることが原因と認識されていた。

本研究の PDSim での検証から、固液界面形状が凸形状の場合はその形状が点欠陥の拡散方向に与えるため、そして凹形状の場合はその形状が圧縮応力を増加させ界面での点欠陥濃度の変化させるため、とした。つまり、凹形状の場合の解釈が従来と異なった。また、結晶の成長軸方向の温度勾配により臨界 *v*/*G* 値が変化すること示した。さらに、その結果を実験との比較を行いその妥当性を証明した。

第 4 章　酸素濃度差によるマランゴニ効果が固液界面形状と酸素濃度に与える影響

従来の研究にて、結晶径 300 mm の横磁場印加チョクラルスキー法（MCz 法）による結晶成長の融液流動が、非軸対象の流動・温度分布になることが示されていた。しかしながら、その流動分布における固液界面形状との関係が示されていなかった。本研究では、実験と数値シミュレーションでの固形界面形状と酸素濃度の比較を行い、その妥当性を確認した。さらにその時、酸素濃度差マランゴニ対流を考慮して確認を行った。その結果、酸素濃度差マランゴニ対流が固液界面形状と酸素濃度に影響を与えること、そして適切な酸素濃度マランゴニ係数（単位濃度当たりの表面張力の変化量）を与えることで、それが実際と良い一致を示すことがわかった。

以上まとめると、本研究では、grown-in 欠陥に与える固液界面形状と酸素濃度に影響を明確にした。その結果、PDSim の精度が大幅に向上した。また、固液界面形状が臨界 *v*/*G* 値に与える解釈に新しい知見を示した。さらに、MCz 法を対象として物質熱流動数値解析において、酸素濃度差マランゴニ対流を考慮することにより、固液界面形状と酸素濃度が実際と良い一致、すなわち実験を行わずとも予測できることを示した。

このように、本研究での PDSim と、物質熱流動数値シミュレーション手法の高精度化は、半導体デバイスの今後の発展に必要不可欠な、grown-in 欠陥制御技術の発展に大きく貢献すると考えられ、産業的にも重要な研究と考える。