[フォーラム 5-3]

半導体製造プロセスにおける電磁力の応用: マクロとナノスケールの融合 Application of electromagnetic forces to Semiconductor fabrication

○ 柿本浩一 (九州大応力研) 田代昭正 石井秀夫 篠崎高茂 正 橋本良夫
Koichi KAKIMOTO, Akimasa TASHIRO, Hideo ISHII, Takashige SHINOZAKI and Yoshio HASHIMOTO
RIAM, Kyushu University, 6-1, Kasuga-Koen, Kasuga, 816-8580, Fukuoka

This paper aims to study mechanism of heat and mass transfer in silicon melt under electromagnetic Czochralski growth (EMCZ). The EMCZ method is a one of the candidate method to reduce density of voids in which a lot of vacancies are agglomerated. The experimental works revealed that heat and mass of oxygen impurity was enhanced in the EMCZ method, while the mechanism of such enhancement is not clarified. The object of the present work is to clarify the enhancement mechanism of heat and mass transfer. Moreover, molecular dynamics simulation was carried out to estimate distribution of defects during growth.

Key Words: Silicon, Chochralski, Magnetic fields, oxygen

1. はじめに

情報化社会を担うシリコン単結晶への要求は、年々厳しくなりさらなる高品質化が求められている。シリコン結晶の内部には、原子スケール欠陥である原子空孔が凝集して形成した空洞欠陥が、大きさと密度がそれぞれ約 100 nm と 10^5 cm^{-3} 程度で存在している。この空洞欠陥を除去することが、超高密度の電子デバイスを実現させるためには必須である。

この空洞欠陥は固液界面付近において原子空孔の凝集により形成されているために、固液界面近傍の温度が高い領域での空孔濃度を精密に制御することが、問題解決には必要である。空孔濃度はほぼ平衡濃度であるために、空孔濃度そのものは温度によって決定される。したがって、空洞欠陥の除去には、結晶育成中の結晶内の温度分布、特に子液界面近傍の温度分布を精密に制御する必要がある。

一般に凝固問題を考える場合、融液の対流と固液界面形状は強くリンクしているために、固液界面形状を制御するためには融液の対流を制御する必要がある。

今までも融液対流の制御に関する報告は多数見られるが、主に強力な静磁場を印加する方法が採用されてきている。しかし、この方法のみでは融液対流の変化の領域は限られており、大きな固液界面形状の変化をもたらすにはいたらなかったのが現状である。これは、従来は主に融液対流を抑制する方向に対流を制御する方策がとられてきたが、最近、渡辺ら⁽¹⁾により静磁場と電流印加の効果を同時に利用することにより、電磁力による制御された融液対流を実現することが可能となってきた。これは、従来の融液対流の抑制により対流を制御しよとするものではなく、意図的に融液を攪拌することにより、従来では達成できなかった固液界面形状を実現することが特徴である。これにより、空洞欠陥形成の確率を低く抑えることに成功している。

本研究の目的は、数値計算により EMCZ 法の特徴である熱と不純物の輸送が促進されるメカニズムについて明らかにすることである。特に、温度、速場、電場、不純物である酸素の各分布についての特徴を明らかにし、特に数種類の電極は位置の場合を考慮に入れ、EMCZ 法の特徴を明らかにする。さらに、分子動力学法を用いて原子レベルの欠陥の拡散係数を推定し、ナノスケールの欠陥発生抑制の例を述べる。

2. 数値モデル

本研究では、有限体積法を用いて 3 次非定常の計算を行い、EMCZ の条件下におけるシリコン融液対流現象の 3

次元構造を明らかにした。図 1 は 3 つの異なった EMCZ の配置を示す。ここでは、印加した磁場は一律な垂直磁場とした。(a) (b) (c) は、それぞれ電極配置が異なり、(a) の場合は電極から電流を注入し融液中を通過して結晶へながれる。したがって、電極・融液界面と固液界面では電流密度が異なることとなり、非対称なローレンツ力の分布が期待できる。(b) の場合は、2 回対称に電極を配置した構成であり、結晶には電流が流れず 2 本の電極に逆方向に等量の電流が流れることとなり、この場合も (a) の場合と同様非対称なローレンツ力の分布が期待できる。(c) は、電極が結晶の周囲に対象に配置され、結晶中を流れてきた電流は等方的に電流が流れ、対称性のよいローレンツ力の分布が期待できる。

Fig.1 Schematic diagrams of EMCZ. (a) asymmetric electrode, (b) symmetric electrodes, (c) cylindrical electrode.

3. 流動解析結果

図2と図3の(a)(b)(c)はそれぞれ融液表面近傍の速度分布と温度分布を図1の(a)(b)(c)の場合について計算した結果を示す。(a)の場合は、電極近傍で時計回りの大きな渦が生じていることがわかる。これは電極近傍に電流密度が大きな領域が形成されるために、磁場との結合によるローレンツ力が大きくなったためである。また、電極近傍の渦に加えて、反時計回りの渦も回転軸が坩堝中央部からずれた位置に形成されていることがわかる。このために、坩堝から結晶への流れが形成されていることがわかる。一方、(b)の場合は2つの電極の周囲に回転方向が異なる渦が形成され手いることがわかる。これは電流の流れる方向がお互いに異なるために、ローレンツ力の方向が逆になったためである。(c)の場合は、電流が軸対称的に流れるためにローレンツ力の分布も軸対称となり、結果として周方向の流れも軸対称流となることがわかる。

Fig. 2 Velocity and temperature profiles at the top of the melt of EMCZ. (a) asymmetric electrode, (b) symmetric electrodes, (c) cylindrical electrode.

4. EMCZの非対称性について

図2に示したように、電極の配置により周方向のながれが大きく変化することがわかる。(a)と(b)の場合は、電極が非対称配置であるために周方向に非対称流が発生する。このために、子午面内の流速の周方向平均は(c)の場合に比較して大きくなることがわかった。

(a)と(b)の場合のように、周方向の流動に意図的に非対

称性を導入することにより、子午面内の流動の促進が行われていることがわかった。(c)の場合は、対称な構造で周方向の流速が大きくなったために、遠心力により子午面内の流速が抑制されることとなる。したがって、(a)と(b)の場合のほうが、(c)の場合に比較してより輸送が抑制されることがわかる。これは図3の温度分布からもわかる。EMCZの熱伝達の本質は、非対称なローレンツ力の分布にある。

5. 分子動力学法によるナノスケール欠陥形成解析

分子動力学法を用いて代表的な半導体であるシリコン中の欠陥の輸送現象に関する検討を行った。

本研究では、等温等圧アルゴリズムの中で式(1, 2)に示すような等方的なスキームであるアンデルセン法と、異方的スキームであるパリネロ・ラーマン法の両方を用いた。

$$m \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_i} - \frac{1}{3} \left(m \frac{d\vec{r}_i}{dt} \right) \left(\frac{1}{V} \frac{dV}{dt} \right) \quad (1)$$

$$M \frac{d^2 V}{dt^2} = \frac{1}{3V} \left[\sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{m} - \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_i} \right] - P_{ex} \quad (2)$$

ここで、 m , ϕ , V , t , M , p , P_{ex} はそれぞれ、原子の質量、ポテンシャルエネルギー、体積、時間、体積変化用ピストンの質量、運動量、外部圧力である。

図3は、空孔と格子間原子欠陥の拡散係数の推定値である。この係数を用いて、空孔と格子間原子欠陥の生成消滅を含む拡散方程式を解くことにより、半導体中に存在するナノスケール欠陥の分布を定量的に予想することが可能となった。

Fig. 3 Calculated diffusion constants of vacancy (a) and interstitial.(b).

5. 結論

EMCZ結晶成長における電極の非対称性による熱と物質の輸送の促進効果を明らかにした。さらに、原子レベルの数値計算を併用し、欠陥形成予測を行った。

参考文献

- (1) M. Watanabe et al., Jpn. J. Appl. Phys., 38 (1999), L10.