

申請者	学科名	情報工学部 情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治 印
調査研究課題	直径 450 mm シリコン結晶における点欠陥の制御技術開発に関する基礎研究(2)					
交付決定額	500,000円					
調査研究組織	氏名	所属・職		専門分野	役割分担	
	代表	末岡 浩治	情報工学部情報通信工学科・教授	応用物理学	研究全般・第一原理計算	
	分担者	泉妻 宏治	グローバルウェアズ・ジャパン社・部長	半導体	実験の検討	
調査研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>本研究では、我が国が世界の 65%シェアを有する半導体シリコン基板に注目し、次世代の 450mm 直径シリコン結晶で問題となる熱応力が点欠陥挙動に与える影響を明らかにすることを目的としている。</p> <p>昨年度、等方的な熱応力下での点欠陥の形成エンタルピーの計算技術を確立した。その結果、熱圧縮応力によってポイド欠陥が増加することを初めて予測し、産業界にもインパクトを与えた。なお、この成果は学術論文 (K.Sueoka et al., <i>J. Appl. Phys.</i>, 111, (2012) 093529) に掲載されており、かつ科研費基盤研究にも採択されたことから独自性がある。この結果は定性的には正しいものの、現実の熱応力はシリコン結晶の部位によって平面応力であったり、1軸応力であったりする。従って、ポイド欠陥密度とサイズの予測精度を向上させるためには、応力の種類として平面応力あるいは1軸応力下における点欠陥の第一原理計算が必要である。</p> <p>今年度は、育成中シリコン結晶の固液界面の大部分の領域が平面応力であることを考慮し、平面応力が点欠陥挙動に与える影響について研究した。</p> <p>2. 研究成果の概要</p> <p>原子空孔あるいは格子間シリコン原子を計算モデル中に導入し、構造最適化により形成エネルギーと緩和体積を求める。この計算を平面応力 (Plane) あるいは等方性応力 (Isotropic) を変化させながら行うことで、点欠陥の形成エンタルピーの応力依存性のデータを得る。図1に得られた結果を示す。横軸は熱応力 (平均応力) を、縦軸は応力 = 0を基準としたエンタルピーの変化量を示している。形成エンタルピーが低いほど、その点欠陥は形成されやすいことになる。</p>					

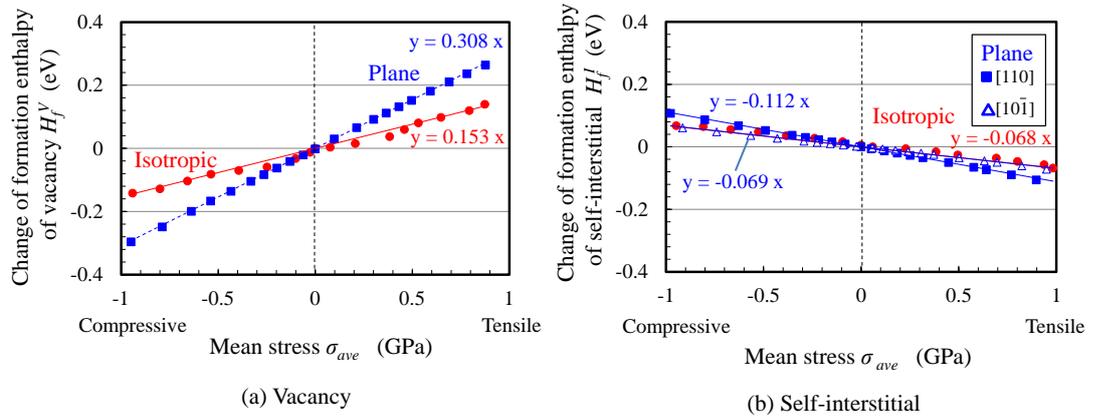


図1 原子空孔（左図）と格子間シリコン原子（右図）の平均応力依存性

無欠陥のシリコン結晶を実現するための指標として $(v/G)_{crit}$ がある。この値が小さいほど、シリコン結晶には原子空孔が形成されやすくなる。図1の結果を用い、 $(v/G)_{crit}$ の熱応力依存性を求めた結果を図2に示す。左図と右図は異なる結晶育成炉を対象としており、シンボルは実験結果、実線と点線が計算結果である。これより、今回得られた平面応力 (Plane) の計算結果は実験結果と素晴らしく一致していることがわかる。

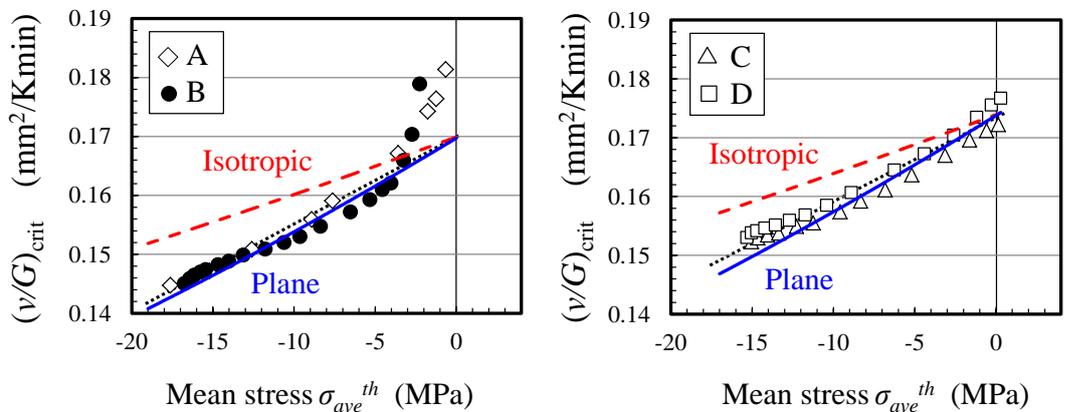


図2 $(v/G)_{crit}$ の熱応力依存性（実験と計算の比較）

3. 研究成果および外部資金の取得状況

本研究成果を応用物理学会で発表（平成26年3月19日）するとともに、査読あり学術論文 (ECS Solid State Letters) に投稿した。また、5月フランスと10月メキシコで開催される半導体関連の国際会議から招待講演を依頼された。なお、本研究は科研費基盤研究の枠内でも行っており、平成27年度まで助成を受けることが決まっている。

4. 今後の計画

グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社において、本研究成果をSi結晶の高品位化に反映させる。

成果資料目録

- 1) K. Sueoka, E. Kamiyama and J. Vanhellefont, "Density functional theory study on the impact of heavy doping on Si intrinsic point defect properties and implications for single crystal growth from a melt", *J. Appl. Phys.*, **114**, (2013) 153510 (19 pages)
- 2) E. Kamiyama, J. Vanhellefont, K. Sueoka, K. Araki and K. Izunome, "Thermal stress induced void formation during 450mm defect free silicon crystal growth and implications for wafer inspection, *Appl. Phys. Lett.*, **102** (2013) 082108 (4pages).

