

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	高濃度ドーピング450 mm 直径 Si エピウェーハにおける点欠陥制御技術の開発					
交付決定額	600,000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	中村 浩三 泉妻 宏治 Jan Vanhellemont	地域共同研究機構・客員教授 グローバルウェーハズ・ジャパン社・副部長 гент大学(ベルギー)・教授	材料工学 半導体工学 半導体物性	数値シミュレーション 実験の検討 計算結果の考察	
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、第一原理計算を用い、高濃度ドーピング半導体シリコン (Si) エピウェーハに対して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。さらに、その制御技術を提案して産業界で活用することも視野に入れている。その結果として全品種の450 mm Si 基板の品質向上につながれば、それは我国のSi結晶メーカーのシェア維持という産業上の意義を持つ。</p> <p>半導体 Si ウェーハは、我が国が世界の65%シェアを有し、研究対象としても重要な素材である。現在、直径300 mmのSiウェーハが実用されているが、次世代の450 mm 直径 Si 結晶では熱応力が問題となり、点欠陥(原子空孔)が集積してボイド欠陥(空隙)が形成することが明らかとなっている。このような背景を鑑み、2012年から本学独創的研究助成費を受け、「直径450 mm Si 結晶における点欠陥の制御技術開発に関する基礎研究」を行ってきた。その結果、熱応力下での点欠陥の形成エンタルピーを計算する技術を確立し、熱圧縮応力によってボイド欠陥が増加することを実験に先行して予測した。</p> <p>さらに本研究では対象を高濃度ドーピング Si エピウェーハに拡張し、ドーパント濃度が Si の0.001%以上のSi結晶における点欠陥制御技術に着手した。今年度は(1)ドーパントの種類と濃度が点欠陥挙動に与える影響について、第一原理計算により明らかにするとともに、(2)その結果を用いてボイド欠陥の密度とサイズを予測するシミュレータの開発を目指した。</p>					

2. 研究成果の概要

p型ドーパント (B, Ga), 中性ドーパント (C, Ge, Sn), n型ドーパント (P, As, Sb, Bi) を考慮し, 原子空孔あるいは格子間Si原子とともに計算モデル中に導入して構造最適化を行った. さらに各モデルの全エネルギーを計算することで, ドーパント周囲の点欠陥の形成エネルギー (E_f) を求めた. 図1に原子空孔の計算モデル (4個の緑球で囲まれた空間), 図2に計算結果の例として中性ドーパント周囲の原子空孔の E_f を示す.

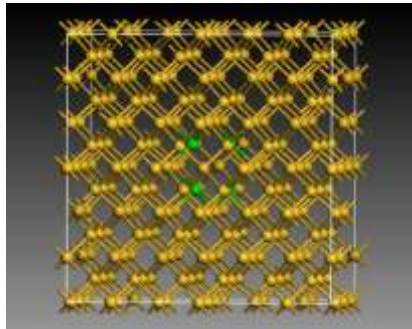


図1 原子空孔の計算モデル

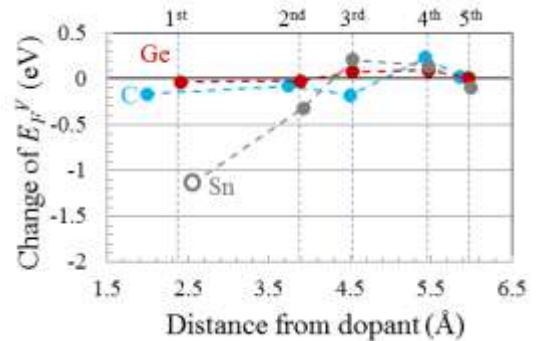


図2 中性ドーパント周囲の原子空孔の E_f

図2より, 原子空孔の形成エネルギーはSnの周囲では顕著に低下するものの, CやGeの周囲ではあまり変化しないことがわかる. 図3にSiの融点における点欠陥濃度 (原子空孔-格子間Si原子) のドーパント依存性を示す. これより, Bi, Sb, As, Sn, Pを添加すると原子空孔の濃度が増加し, C, Bを添加すると逆に格子間Si原子の濃度が増加することがわかる.

この計算結果は, これまで断片的に報告されている実験結果を定量的によく説明するものであり, 新規性が高いものである.

本計算結果をSTR社製数値シミュレータCZ-Simに搭載した. なお, 本シミュレータは共同研究先のグローバルウェーハズ・ジャパン社が所有している. 現在, CZ-Simを用いて実験データの再現を試みている.

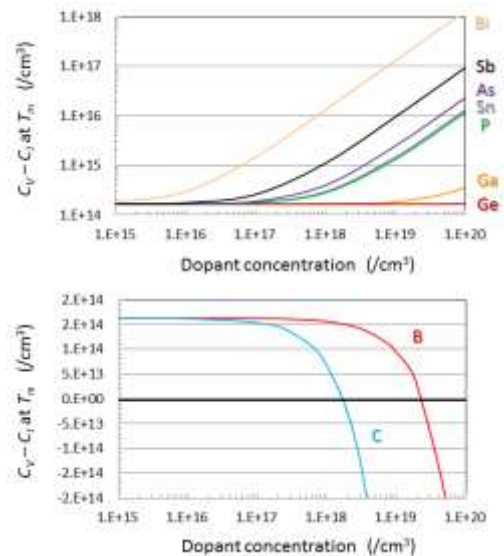


図3 点欠陥濃度のドーパント依存性

3. 研究成果および外部資金の取得状況

本研究成果について, 2014年5月フランスと2014年10月メキシコで開催された半導体関連の国際会議で招待講演を行った. 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

次年度は, これまで行ってきたドーパントの効果と熱応力の効果を組み合わせ, 産業界における高濃度ドーパシエピウエーハの高品位化に貢献する.

調査研究実績
の概要

成果資料目録

- 1) K. Sueoka, E. Kamiyama, J. Vanhellefont and K. Nakamura, "Impact of Plane Thermal Stress near the Melt/Solid Interface on the v/G Criterion for Defect-Free Large Diameter Single Crystal Si Growth", *ECS Solid State Letters*, **3**, (2014) P69-P72.
- 2) K. Sueoka, E. Kamiyama, J. Vanhellefont and K. Nakamura, "Stress and doping impact on intrinsic point defect behavior in growing single crystal silicon", *Physica Status Solidi (b)*, **251**, (2014) 2159-2168.