

大口径 CZ-Si 結晶育成における点欠陥挙動の数値シミュレーション

Computer Simulation of Intrinsic Point Defect Behaviors Valid for All Pulling Conditions in Large-diameter Czochralski Si Crystal Growth

¹岡山県立大情報工, ²STR Japan (株), ³グローバルウェーハズ・ジャパン(株), ⁴STR グループ

○末岡 浩治¹, 向山 裕次², 前田 進³, 飯塚 将也², バシフ マメドフ⁴

¹Okayama Pref. Univ., ²STR Japan, ³GlobalWafers Japan, ⁴STR Group-Soft Impact

○Koji Sueoka¹, Yuji Mukaiyama², Susumu Maeda³, Masaya Iizuka², and Vasif M. Mamedov⁴

E-mail: sueoka@c.oka-pu.ac.jp

大口径 CZ-Si 結晶育成中の点欠陥挙動に関する数値シミュレーターを開発した. 具体的には, ドープメント, 酸素, 熱応力が点欠陥 (原子空孔 V , 格子間 Si I) の形成エネルギーと形成エントロピーに与える影響について第一原理計算を行い[1], その結果をパラメータ化して STR 社製 CGSim パッケージ[2]に組み込んだ. これにより, 炉構造, ドープメント種と濃度, 酸素濃度に依存する Si 結晶育成中の点欠陥濃度分布の可視化が実現した. 本発表では, 第一原理計算の結果を元に以下の (i), (ii)に示す点欠陥挙動モデルを提案した[3]上で, CGSim パッケージによる計算例を紹介する. (i) 固液界面から取り込まれる V と I の総濃度 (単独の V (I) とドープメントと酸素の近傍の V (I) の濃度の和) は, ドープメントの種類と濃度, 酸素濃度, 熱応力で決まる. (ii) このすべての V と I がボイド形成温度よりはるかに高温である 1350°C 以上で再結合に寄与する. すなわち, V と I の総濃度が主要な点欠陥を決定する.

図 1 に計算に用いた 400 mm 直径の CZ-Si 結晶成長[4]についての計算グリッドを示す. さらに図 2 に B ドープ Si 結晶について, 育成速度 $v = 0.45$ mm/min における定常計算の結果を示す. これより, B 濃度の上昇とともに, V と I の中立位置 ($C_V - C_I = 0$) が結晶外周から結晶内部へ移動する様子が視覚的にわかる.

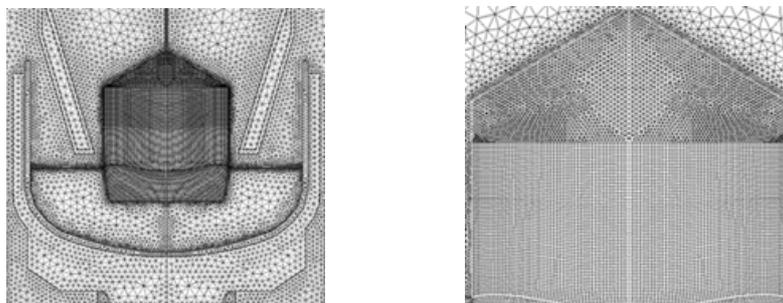


図 1 400 mm 直径 CZ-Si 結晶成長の計算グリッド

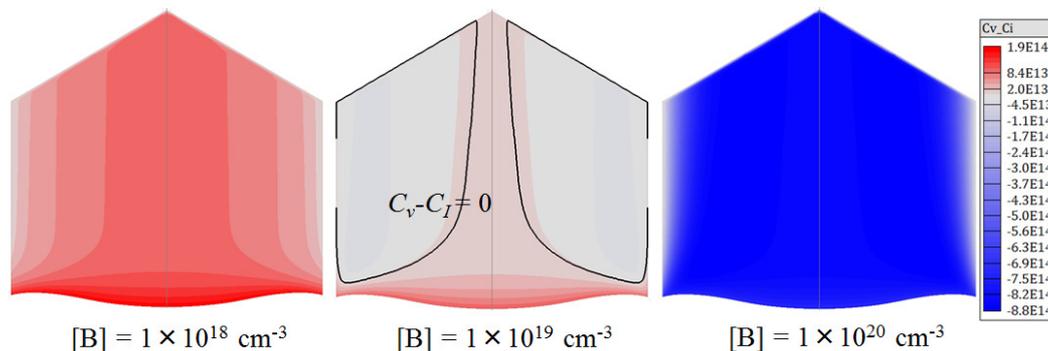


図 2 B ドープ Si 結晶における定常計算の例 ($[O_i] = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $v = 0.45 \text{ mm/min}$)

発表では, B ドープの他に C, Sn, P, Sb ドープの結果も示す. 本シミュレーターは, 大口径 Si 結晶育成において, 点欠陥制御を目的とした製造条件の決定などに役立つと考える.

参考文献

1. Kobayashi *et al.*, *ECS JSSST.*, **6**, P78 (2017).
2. CGSim, software of STRGroup, Inc.
3. Sueoka *et al.*, *ECS JSSST.*, **5**, P3176 (2016).
4. Shiraiishi *et al.*, *J. Cryst. Growth*, **229**, 17 (2001).