

CZ-Si 結晶成長中の点欠陥挙動に与える窒素の影響

Effect of nitrogen doping on intrinsic point defect behavior in growing CZ-Si crystal

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² 株式会社 SUMCO³

◦(M1)谷口元春¹, 末岡浩治², 宝来正隆³

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²,
SUMCO CORPORATION³

◦Motoharu Taniguchi¹, Koji Sueoka², Masataka Hourai³

E-mail: taniguchi.opu@gmail.com

半導体デバイスの高性能化と微細化に伴い、基板となるシリコン (Si) ウェーハには以前にも増して無欠陥性が求められている。産業界におけるこれまでの実験から、CZ 法において Si 結晶成長時に窒素 (N) を 10^{14} atoms/cm³ 程度の濃度で添加するとボイド欠陥のサイズが低下することが分かっている。しかし、N 添加により固液界面から取り込まれる原子空孔 (V) の濃度が増加することや、それにもかかわらず無欠陥領域の幅が拡大することなど、N 添加が Si 結晶成長中の点欠陥濃度に与える影響について、そのメカニズムには不明な点が多い⁽¹⁾。

本研究では Si 単結晶成長において、固液界面から取り込まれる N が V の形成エネルギーに与える影響に関する第一原理計算を行った。Si 原子 64 個からなるモデルにおいて、まず、N 原子を代表的な格子間位置、置換位置のそれぞれに配置し、第一原理計算によりモデルの全エネルギーを求め、N 原子の最安定位置を決定した。次に Sueoka らの方法⁽²⁾に従って N 原子の周囲に V を配置し、N が V の形成エネルギーに与える影響を調べ、さらに V の熱平衡濃度を算出した。モデルには三次元周期境界条件を課した。

エネルギーの計算値から、N 原子の最安定位置は[100]方向からわずかに傾いた格子間の[161]D-site であり、準安定位置は格子間の B-site と置換位置の Sub-site となった。図 1 にこれら 3 つの原子配置を示す。また、配位数を考慮して融点における N 原子の各配置の存在確率を算出した結果、[161]D-site, B-site, Sub-site の順に 97.70 %, 1.46 %, 0.84 % となった。

さらに一例として、[161]D-site の N 原子が V の形成エネルギーに与える影響を図 2 に示す。横軸は N 原子と V の距離が近い配置から順番に付けた番号である。縦軸は完全 Si 結晶中の V の形成エネルギーを基準としている。これにより、N 原子の近傍では V の形成エネルギーが大きく低下し、 V が形成されやすくなることがわかる。とくに形成エネルギーが 2.0~3.0 eV 程度低下する配置が 4 箇所あった。これらの構造では、N 原子あるいは Si 原子が V と置換して V が消滅していた。

当日は N が点欠陥の熱平衡濃度に与える影響等についても報告する。

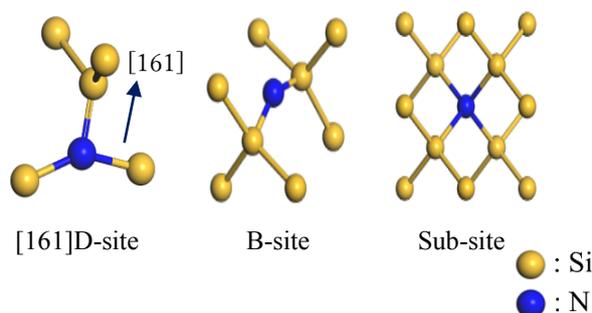


Fig. 1 Atomic configuration of N atom in Si model.

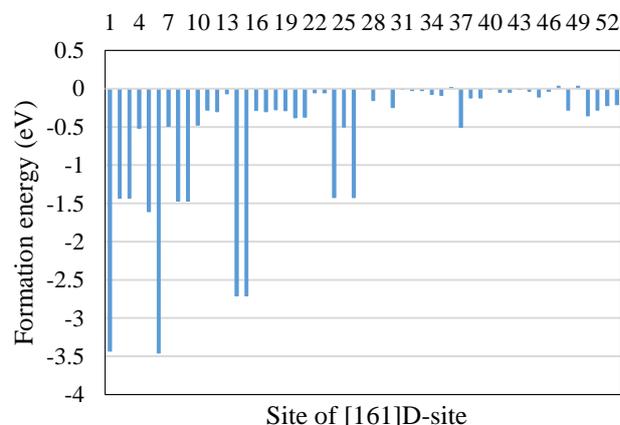


Fig. 2 Formation energy of V around N atom in Si model.

[1] K. Nakamura *et al*, *Proceedings of the Forum on the Science and Technology of Silicon Materials 1999*, p.116.

[2] K. Sueoka *et al*, *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **8** (2019) P228.