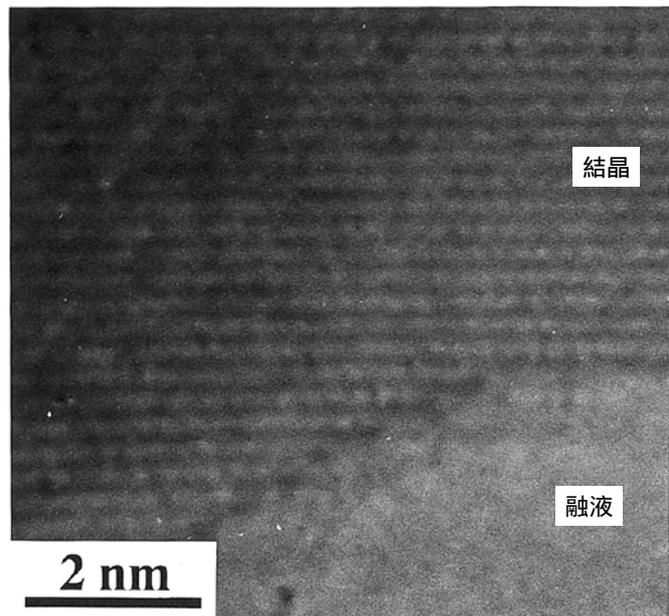
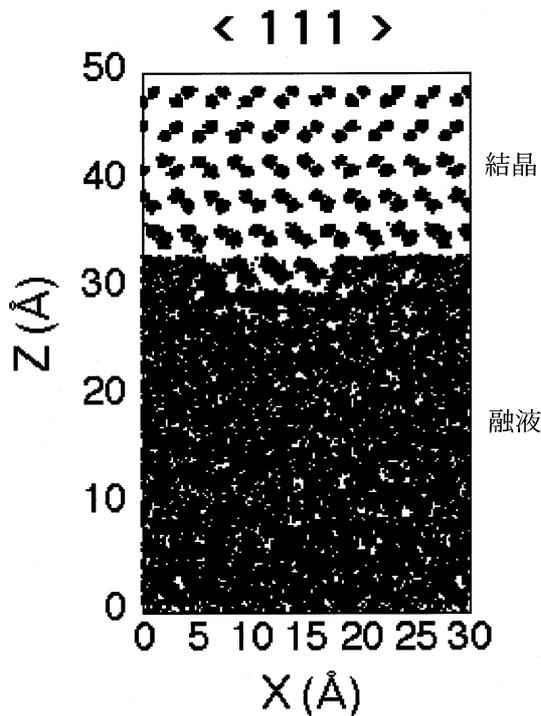


Dynamic behavior of silicon atoms, lattice defects
and impurities near silicon melt-crystal interface

シリコンメルト - 結晶界面における母体原子・格子欠陥・
不純物原子の動的挙動解明のための実験的理論的研究

プロジェクトリーダー 今石 宣之

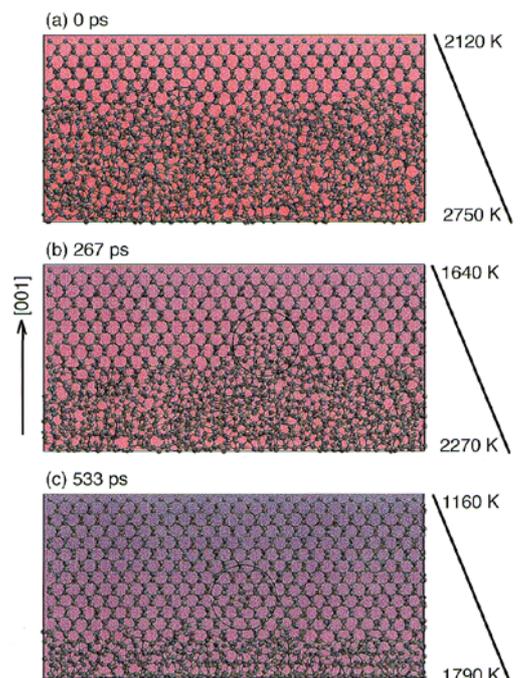
九州大学 機能物質科学研究所 教授



1. 研究の目的

エレクトロニクス技術の一層の進展のためには、半導体上に形成されるデバイス類の超微細化、高密度化が必要不可欠である。この実現のためには、デバイス作成用基板の半導体、特にシリコンの、バルク単結晶の高品質化が望まれています。シリコンのバルク単結晶は多くの場合チョクラスキー（CZ）法と呼ばれる手法でメルトからの凝固によって製造されています。この手法では、石英製の坩堝の中でメルトは複雑な流れを示し、坩堝から溶解した酸素の大部分はメルト表面から気相へ蒸発し、一部が他の不純物同様、結晶中に取り込まれます。不純物濃度の高度な制御や、結晶中の微細な欠陥の制御も重要な課題となってきました。欠陥の発生は、メルトから結晶へ相変化が生じるときのミクロな結晶成長機構と深い関わりを持っているので、原子スケールで固液相変化時の挙動を追跡し、結晶品質決定因子の理解を深める事が急がれています。一方、ミクロな結晶化過程が進行するメルト-結晶界面の状態を詳しく予測するマクロ解析も必要不可欠です。しかし、シリコン融液の物理化学的基礎情報は未だに十分ではないし、結晶成長炉内の温度、濃度分布がどのように変化するのかも詳しくは理解されていないのが現状です。

本研究プロジェクトは、分子動力学法や電子顕微鏡観察などによって、シリコン融液-結晶界面での不純物や欠陥のミクロな動的挙動を追求すると同時に、各種の平衡関係や拡散係数などの物理化学情報に関する系統的实验とCZ炉内のマクロ量の分布状況の解析法の開発を行い、将来の高品質シリコン単結晶育成の基礎をミクロ・マクロ両方の観点から総合的に構築しようとするものです。



研究の内容

シリコンメルト・結晶界面の原子スケールの動的挙動の理解には様々な側面からの解析が必要となります。本プロジェクトでは空間的には原子個々の大きさのマイクロスケールから、単結晶育成炉全体を見渡すマクロスケールまで、時間的にはピコ秒のオーダーから分のオーダーまで、極めて広い時空間にわたるシミュレーション解析を試みます。また、高分解能電子顕微鏡やフィールドエミッション顕微鏡 (FEM) によるマイクロ時空の実験的観察を試みる一方で、各種熱物性値や平衡関係などマクロ量の測定も試んでいます。

(1) シリコンメルト・結晶界面の原子スケール動的解析

分子動力的シミュレーションによりメルトから結晶に変化する過程のシミュレーションを行い、結晶の成長機構、結晶成長速度と欠陥発生との関係、不純物原子やクラスターの取り込みと欠陥形成との関係などを詳細に解析していきます。これらの解析結果を、電子顕微鏡やFEMによる実験結果と対比し、その妥当性を検討し、マイクロとマクロを結ぶスケール則を探します。

(2) 不純物の偏析挙動の解析

偏析係数の小さな重原子不純物の界面近傍での挙動を分子動力学、マクロシミュレーションなどで解析すると同時に、メルト・結晶界面近傍のX線観察、電子顕微鏡観察などの実験と比較し、不純物原子の挙動を明らかにする事を試みます。

(3) 不純物原子、欠陥の拡散挙動の解析

酸素その他の不純物原子や点欠陥などが、メルト中や高温結晶中を拡散する場合の挙動を分子動力学を用いて解析し、拡散係数などを求め、熱物性値のデータベースの資料とします。

(4) メルト・結晶界面近傍の欠陥のX線観察

融解・固化時のエネルギー移動に伴う固液界面近傍の欠陥の挙動を、X線によりその場観察し、界面近傍での熱歪と結晶欠陥との関係を明らかにする事を試みます。

(5) メルト・結晶、メルト・気相、メルト・石英界面における酸素の挙動の解析

固液、固気界面における酸素の挙動について分子動力学に基づくマイクロな解析と、平衡関係の測定などを平行して進めます。これらは、結晶中酸素濃度の算定に必要な不可欠な情報を与えてくれます。

(6) Cz炉の総合熱流動シミュレーション

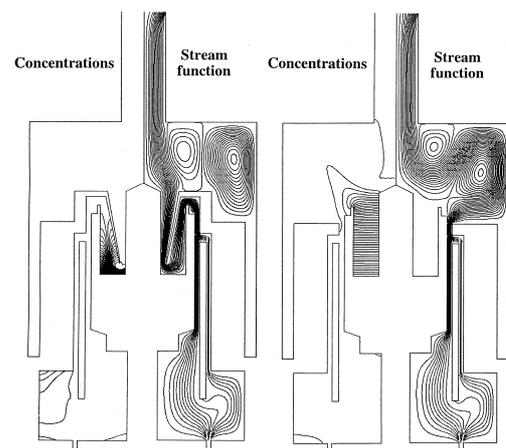
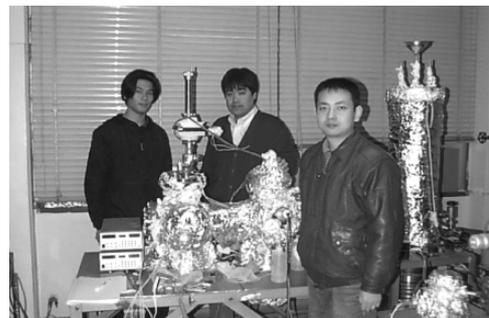
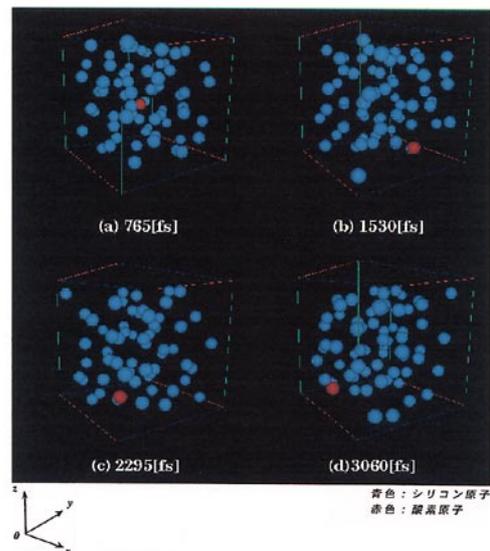
Cz炉内の熱流動現象を総合的にシミュレーションし、メルト中での不純物のマクロな時空間内での分布挙動と、結晶中の不純物分布挙動、結晶内熱応力分布などを明らかにし、結晶内での欠陥の発生との関係を考察する基礎情報を得、効果的な制御法について考察します。

3. 研究体制

期 間：1996年10月～2001年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名、コアメンバー4名、研究協力者15名(内日本学術振興会研究員5名)で構成されています。その他、下記の研究室に所属する大学院生が多数この研究に参加しています。

実施場所：この研究の拠点校は九州大学ですが、他大学との協力方式で研究を進めています。九州大学機能物質科学研究所今石研究室、尾添・柿本研究室、九州大学工学研究科本岡研究室、大阪府立大学先端科学研究所大嶋研究室、信州大学教育学部干川研究室、信州大学工学部清水研究室、湘南工科大学工学部寺嶋研究室、が緊密な連絡を取ってプロジェクトを進めています。



CZ炉内のアルゴンガスの流れと酸素濃度分布