

Si エピタキシャル成長における速度論的基礎研究

○牛島 治宣、猪原 一浩、国吉 ニルソン、不破 章雄(早稲田大学)
早稲田大学理工学術院創造理工学研究科地球・環境資源理工学専攻
不破研究室(東京都新宿区大久保 3-4-1 早稲田大学理工学術院 60 号館 110)

【諸言】

近年、IC や LSI などの半導体デバイスの高性能化に伴い基板となるシリコンウェーハの品質向上が求められている。この品質向上の技術の一つに CVD を用いたエピタキシャル法がある。しかしながら、実験が困難かつ危険で経験に依存しているためシミュレーションによる反応解析が必要である。そこで本研究では、CVD 炉内の反応モデルを最適化してエピタキシャル成長のシミュレーション解析を行うことを目的とする。

【方法】

本研究では反応解析ソフト CHEMKIN-Pro を用いた。CHEMKIN-Pro は反応速度論にもとづく化学反応シミュレーションソフトウェアで、気相中および固体表面の反応について、化学反応を素反応の集合体として表すことにより、反応物、生成物のみならず中間生成物の化学種について、反応の進行に伴う組成変化や温度変化などをシミュレーションすることができる。本研究の最終的な解析の目標としているのは Si のバルクの成長速度の解析である。この Si バルクの成長に影響を与える因子を解析し、考察を行なった。具体的には基板表面温度と TCS (SiHCl_3) の供給濃度を変数として各々の依存性について調べた。また製造条件に近い条件にした場合のバルクの成長速度のシミュレーションの結果と一般的な成長速度の比較を行なった。さらに、ウェーハ表面上での反応経路 Reaction Path の解析を行なった。

【結果】

図 1 に TCS の供給濃度を 0.5% にしたときのバルクの成長速度の温度依存性を示す。基板表面温度は 700~1400 °C に変化させた。図 2 に基板表面温度を 1100 °C にしたときのバルクの成長速度の TCS 供給濃度依存性を示す。TCS の供給濃度は 0.1%~10% に変化させた。一般的な製造条件での Si ウェーハのバルクの成長速度のシミュレーションによる計算値は $3.44 \mu\text{m}/\text{min}$ となり、実際の成長速度とされている値と一致し妥当な結果となった。

CVD 炉内のバルク成長における反応中間体は主に SiCl_2 , HCl , DCS (SiH_2Cl_2) が多く存在し、反応経路から成長に最も重要な化学種は SiCl_2 であり、温度上昇による供給律速から反応律速の転換があることが分かった。

また、供給 TCS の濃度が大きいと成長効率が悪くなることが明らかになった。

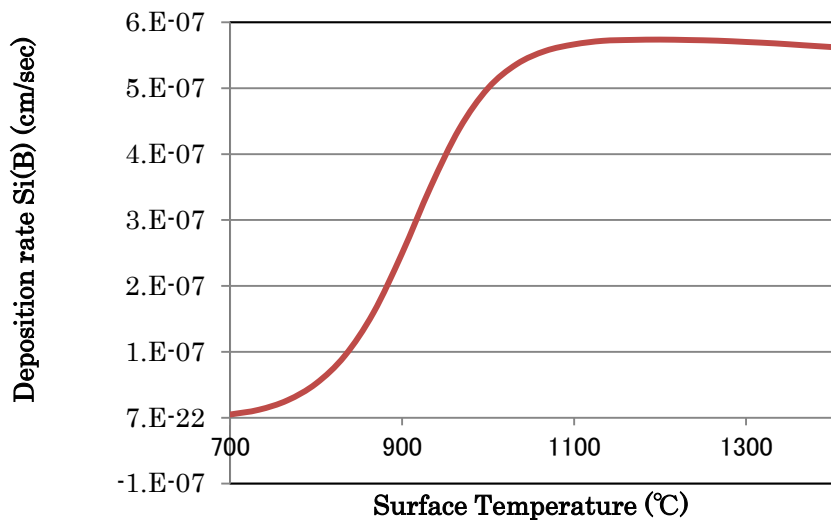


図1 バルク成長速度の基板温度依存性

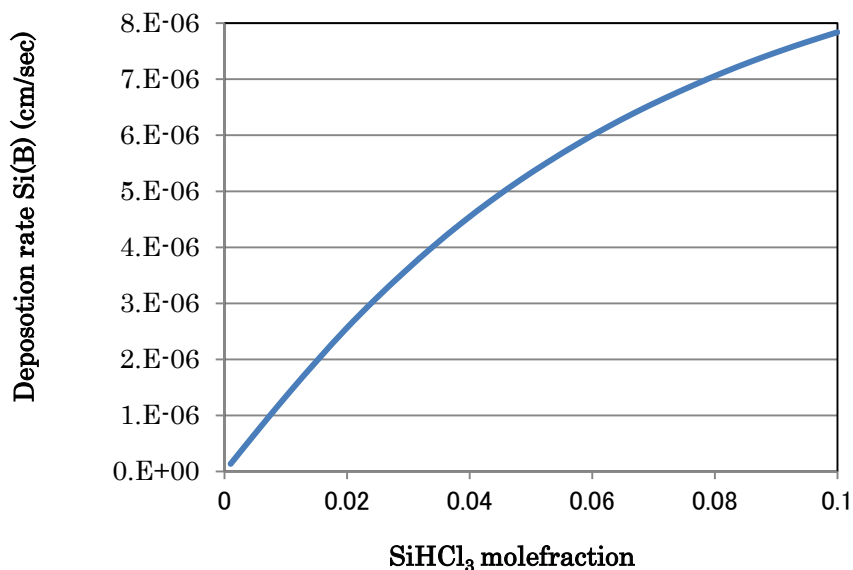


図2 バルク成長速度の TCS 供給濃度依存性

参考文献

- Pauline Ho et al., "Chemical Kinetics for Modeling Silicon Epitaxy from Chlorosilanes," Electrochemical Society Proceedings, Vol. 93-23, pp. 117-120 (1999)
- M. Hierlemann · A. Kersch · C. Werner · H. Schafer: "A Gas-Phase and Surface Kinetics Model for Silicon Epitaxial Growth with SiH₂Cl₂ in an RTCVD Reactor," J. Electrochem. Soc., Vol. 142, No. 1, January 1995
- Anthony J. Marchese (Rowan University): therm.dat
<http://users.rowan.edu/~marchese/combustion04/kinetics/h2-chemkin/therm.dat>
- NIST Chemical Kinetics Database Ver7.0
<http://kinetics.nist.gov/kinetics/index.jsp>