

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2019年9月6日(06.09.2019)



(10) 国際公開番号

WO 2019/167294 A1

(51) 国際特許分類:

H01L 21/66 (2006.01) *H01L 21/02* (2006.01)
C30B 29/06 (2006.01) *H01L 21/20* (2006.01)
C30B 33/02 (2006.01) *H01L 21/322* (2006.01)
H01L 21/00 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2018/019432

(22) 国際出願日: 2018年5月21日(21.05.2018)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2018-033400 2018年2月27日(27.02.2018) JP

(71) 出願人: 株式会社SUMCO (SUMCO CORPORATION) [JP/JP]; 〒1058634 東京都港区芝浦一丁目2番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 高 奉均(KO Bong-Gyun); 〒1058634 東京都港区芝浦一丁目2番1号 株式会社SUMCO内 Tokyo (JP). ▲高▼田 康佑(TAKATA

Kousuke); 〒1058634 東京都港区芝浦一丁目2番1号 株式会社SUMCO内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 杉 村 憲 司 (SUGIMURA Kenji); 〒1000013 東京都千代田区霞が関三丁目2番1号 霞が関コモンゲート西館3 6階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS,

(54) Title: METHOD FOR PREDICTING WARPAGE AMOUNT OF SILICON WAFER AND METHOD FOR MANUFACTURING SILICON WAFER

(54) 発明の名称: シリコンウェーハの反り量の予測方法およびシリコンウェーハの製造方法

$$N_i = A \times (\Delta O_i \times L - L_o)^{2.5} \quad (1)$$

(57) Abstract: Provided is a method capable of predicting the amount of warpage that occurs when a silicon wafer is subjected to heat treatment by taking into account the influence of oxygen, and a method for manufacturing a silicon wafer. In the method for predicting the amount of warpage that occurs when a silicon wafer is subjected to heat treatment, the evolution of movable dislocation density, stress and strain with time is determined from the variation rate of strain and the variation rate of movable dislocation density in the silicon wafer during the heat treatment, and this is taken as the warpage amount. The amount of plastic deformation of the silicon wafer is determined on the basis of the determined evolution of strain with time. The movable dislocation density N_i at the start of heat treatment is given by [Equation 1], where A and L_o are constants; ΔO_i is the concentration of oxygen used for oxygen precipitates in the silicon wafer at the start of heat treatment; and L is the average size of the oxygen precipitates in the silicon wafer at the start of heat treatment.

(57) 要約: シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を酸素の影響を考慮して予測することができる方法およびシリコンウェーハの製造方法を提案する。シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を予測する方法であって、上記熱処理中のシリコンウェーハの歪みの変化率と可動転位密度の変化率から可動転位密度、応力および歪みの時間発展を求め、これを反り量とし、求めた歪みの時間発展に基づいてシリコンウェーハの塑性変形量を求め、熱処理の開始時の可動転位密度 N_i は、 A 、 L_o : 定数、 ΔO_i : 熱処理の開始時でのシリコンウェーハにおける酸素析出物に使用された酸素の濃度、 L : 熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物の平均サイズとして、[数1]で与えられることを特徴とする。



MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

- 一 国際調査報告（条約第21条(3)）

明 細 書

発明の名称：

シリコンウェーハの反り量の予測方法およびシリコンウェーハの製造方法 技術分野

[0001] 本発明は、シリコンウェーハの反り量の予測方法およびシリコンウェーハの製造方法に関する。

背景技術

[0002] シリコンウェーハを用いた半導体デバイス製造工程には様々な熱処理工程が含まれ、その際生じる応力によって転位が発生して、塑性変形が起こることがある。半導体デバイス工程におけるシリコンウェーハ中の転位の発生及びその進展は、デバイスの性能および収率の低下に繋がる重大な問題である。

[0003] 特に、最近の先端ロジックまたはメモリデバイスでは、L S A (Laser Spike Annealing)、F L A (Flash Lamp Annealing) など、高温且つ短時間のアニールプロセスによって、従来の熱処理よりも温度変化が急峻になったことに加えて、F i n F E Tや3次元構造の採用により、デバイス構造的にもシリコンウェーハに大きな応力が掛かる。その結果、シリコンウェーハ中に転位の発生及び進展によってスリップが発生し、それによりシリコンウェーハが反ってしてしまうことから、オーバーレイ不良を引き起こして収率を低下させる問題が生じている（例えば、非特許文献1参照）。

[0004] このような転位を伴う塑性変形、すなわちウェーハの反り量を予測することは、半導体デバイスの性能と収率の改善において重要な課題の1つである。しかし、弾性領域を超えて塑性変形を伴う領域での応力計算は簡単な問題ではない。特に、物理的に妥当な塑性変形モデルを立てるためには、原子レベルでの転位運動からウェーハレベルでの変形までの広範囲の現象を理解する必要がある。

[0005] 結晶の塑性変形量を予測する方法としては、転位の増殖を定量的に見積も

り、転位密度を計算することによってスリップによる歪みを塑性変形量の時間変化に繋げ、結晶での塑性変形量を計算するHaasen-Alexander-Suminoモデル（以下、「HASモデル」と言う）がある（例えば、非特許文献2および3参照）。

先行技術文献

非特許文献

[0006] 非特許文献1: David M. Owen, Proceedings of the SPIE, Volume 8681, id. 86812T 7 pp. (2013).

非特許文献2: P. Haasen, Zeit. Phys. 167 (1962) 461.

非特許文献3: M. Suezawa, K. Sumino, I. Yonenaga, Phys. Stat. Solidi A 51 (1979) 217.

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0007] しかし、シリコンウェーハの反りに代表される塑性挙動は、酸素濃度や酸素析出物密度などに依存することがよく知られている。そのため、HASモデルをシリコンウェーハのプロセスに正しく適用するためには、HASモデルが前提にしている初期転位密度をウェーハの条件に合わせて適切に設定する必要がある。

[0008] そこで、本発明の目的は、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を酸素の影響を考慮して予測することができる方法およびシリコンウェーハの製造方法を提案することにある。

課題を解決するための手段

[0009] 上記課題を解決する本発明の要旨構成は以下の通りである。

[0010] [1] シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を予測する方法であって、

前記熱処理中の前記シリコンウェーハの歪みの変化率と可動転位密度の変化率から前記可動転位密度、応力および歪みの時間発展を求め、求めた前記

歪みの時間発展に基づいて前記シリコンウェーハの塑性変形量を求めて、これを反り量とし、

前記熱処理の開始時の可動転位密度 N_i は、 A 、 L_o ：定数、 ΔO_i ：前記熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物に使用された酸素の濃度、 L ：前記熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物の平均サイズとして、

[数1]

$$N_i = A \times (\Delta O_i \times L - L_o)^{2.5} \quad (1)$$

で与えられることを特徴とするシリコンウェーハの反り量の予測方法。

[0011] [2] 前記歪み ε の変化率 $d\varepsilon/dt$ は、

[数2]

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} = \sum_{n=1}^{12} f^{(n)} p_{ij}^{(n)} \quad (2)$$

で与えられる、前記 [1] に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。

ここで、

[数3]

$$f^{(n)} = b k_0 N_m^{(n)} (\tau_{eff}^{(n)})^p \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (3)$$

[数4]

$$p_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{\sigma_{RS}^{(n)}} \right) (v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)}) \quad (4)$$

[数5]

$$\tau_{eff}^{(n)} = |\sigma_{RS}^{(n)}| - D \sqrt{N_m^{(n)}} - \tau_d \quad (5)$$

であり、 b ：バーガースベクトルの大きさ、 k_0 、 p ：物質定数、 N_m ：可動

転位密度、 τ_{eff} ：実効せん断応力、 Q ：シリコンのパイエルスポテンシャル、 k ：ボルツマン定数、 T ：温度、 σ_{RS} ：応力、 v_i ：スリップ面の法線方向の単位ベクトル、 b_i ：スリップ方向に平行な単位ベクトル、 D ：歪硬化因子、 τ_d ：ドラッグストレスである。

[0012] [3] 前記可動転位密度 $N_m^{(n)}$ の変化率 $dN_m^{(n)} / dt$ は、
[数6]

$$\frac{dN_m^{(n)}}{dt} = K k_0 N_m^{(n)} \left(\exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \right) (\tau_{eff}^{(n)})^{p+\lambda} \quad (6)$$

で与えられる、前記 [1] または [2] に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。ここで、

[数7]

$$\tau_{eff}^{(n)} = |\sigma_{RS}^{(n)}| - D \sqrt{N_m^{(n)}} - \tau_d \quad (7)$$

であり、 K ：定数、 k_0 、 p 、 λ ：物質定数、 Q ：シリコンのパイエルスポテンシャル、 k ：ボルツマン定数、 T ：温度、 τ_{eff} ：実効せん断応力、 σ_{RS} ：応力、 D ：歪硬化因子、 τ_d ：ドラッグストレスである。

[0013] [4] 前記シリコンのパイエルスポテンシャル Q として、不純物の影響が加味されたシリコンのパイエルスポテンシャルを使用する、前記 [2] または [3] に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。

[0014] [5] 前記応力は有限要素法により求める、前記 [1] ～ [4] のいずれか一項に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。

[0015] [6] ΔO_i および L をパラメータとして用いて、前記 [1] ～ [5] のいずれかの方法によって、前記シリコンウェーハの前記熱処理後の反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L を求め、前記熱処理の開始時のシリコンウェーハの ΔO_i および L が、前記熱処理後の反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L となるようにシリコン単結晶の成長条件を決定してシリコン単結晶を成長させ、得られたシリコン単結晶を加工してシリコンウェーハとするこ

とを特徴とするシリコンウェーハ製造方法。

発明の効果

[0016] 本発明によれば、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を、酸素の影響を考慮して予測することができる。

図面の簡単な説明

[0017] [図1] 3点曲げ試験の有限要素法モデルを示す図である。

[図2] 熱処理開始時の酸素析出物の生成に使用された酸素の濃度と酸素析出物の平均サイズとの積と、初期転位密度との関係を示す図である。

発明を実施するための形態

[0018] (シリコンウェーハの反り量の予測方法)

以下、図面を参照して、本発明の実施形態について説明する。本発明によるシリコンウェーハの反り量の予測方法は、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を予測する方法である。ここで、熱処理中のシリコンウェーハの歪みの変化率と可動転位密度の変化率から可動転位密度、応力および歪みの時間発展を求め、求めた歪みの時間発展に基づいてシリコンウェーハの塑性変形量を求めて、これを反り量とする。その際、熱処理の開始時の可動転位密度 N_i は、 A 、 L_o ：定数、 ΔO_i ($1 \times 10^{17} / \text{cm}^3$)：前記熱処理の開始時での酸素析出物に使用された酸素の濃度 ($1 / \text{cm}^3$)、 L ：前記熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物の平均サイズ (nm) として、

[数8]

$$N_i = A \times (\Delta O_i \times L - L_o)^{2.5} \quad (8)$$

で与えられることを特徴とする。

[0019] 上述のように、シリコンウェーハの塑性挙動は、酸素濃度や酸素析出物密度などに依存することがよく知られている。そのため、HASモデルをシリコンウェーハのプロセスに正しく適用するためには、HASモデルが前提にしている初期転位密度をウェーハの条件に合わせて適切に設定する必要がある。

る。

[0020] そこで、本発明者らは、HASモデルをシリコンウェーハの熱処理プロセスに適用すべく、まずは、初期転位密度と酸素との関係について検討した。その結果、上記式(8)で与えられるような関係があることを見出したのである。以下、上記式(8)を導き出すに至った実験およびシミュレーションについて説明する。

[0021] 塑性変形シミュレーションを行うためには、熱処理開始時のシリコンウェーハ中の可動転位密度(初期転位密度)を与える必要がある。そこで、酸素析出熱処理(例えば、BMD熱処理)の条件と可動転位密度との相関を求めるために、実験およびシミュレーションを行った。

[0022] まず、実験について、約 $1.3 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の初期酸素濃度 O_i を有する直径300mmのCZシリコンウェーハを用意し、650~850℃で4~20時間の熱処理を行った後、1000℃で0~8時間の熱処理を行った。こうして、密度が $2.2 \times 10^9 \sim 1.2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ 、平均サイズ L が210~350nmの酸素析出物であるBMD(Bulk Micro Defect)を有する8水準のサンプルを作製した。このように得られた各水準のサンプルに対して、650℃、750℃および850℃の3つの温度条件で3点曲げ試験を行い、24個の応力-歪み曲線を得た。

[0023] 次に、シミュレーションについて、図1に示すような3点曲げ試験の有限要素法モデルを作成し、様々な初期転位密度に対して塑性変形モデルを適用して計算を行った。そして、各サンプルに対して、計算で得られた応力-歪み曲線が、実験で得られたものと最もよく一致するような初期転位密度を求めた。

[0024] 上述のように得られた初期転位密度と酸素析出物との相関を得るべく、BMDの密度および平均サイズをパラメータとして、様々な検討を行った。その結果、初期転位密度 N_i は、BMDの形成に使用された酸素の濃度 ΔO_i (すなわち、BMD生成熱処理前の初期酸素濃度 O_i とBMD生成熱処理後の残存酸素濃度 O_f との差)とBMDの平均サイズ L との積に対して、最も相関が

強いことが判明した。

[0025] 図2は、 ΔO_i と L との積に対する初期転位密度との関係を示している。本発明者らは、図2に示したプロットに最もよくフィッティングする関係式を鋭意検討した。その結果、上記式(8)の関係式が得られたのである。式(8)における ΔO_i の値は、実際の濃度を $1.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ で割ったものであるため、 ΔO_i を無単位 α に置き換えると、 αL は析出量を考慮した「有効酸素析出物サイズ」と解釈することができる。

[0026] そして、 L_0 が200 nmになることから、サイズ200 nm以下の酸素析出物の場合、初期転位密度がほとんどないことを意味しており、少なくとも可動転位密度の存在は否定できることになる。この結果は、末岡らの報告(K. Sueoka, M. Akatsuka et al., J. J. Appl. Phys. 36(1997) 参照)における、200 nm以下のサイズの酸素析出物はスリップを助長しないという結果と一致している。

[0027] こうして、熱処理開始時の初期転位密度 N_i を求めることができた。この初期転位密度 N_i が与えられれば、HASモデルに基づいてシリコンウェーハにおける反り量を予測することができる。ここで、シリコンウェーハの反り量を計算するための式について説明する。

[0028] シリコン結晶において転位が動く場合、(111)面の[100]方向に沿って動くため、結晶学的に12個のスリップ系を持つことになる。このような結晶塑性理論に基づいて、塑性変形計算モデルであるHASモデルをシミュレーション計算(例えば、3次元有限要素計算法)に適用できるように、多軸応力状態に拡張することができる(例えば、N. Miyazaki, M. Sakaguchi, Trans. JSME Ser. A65 (2002)21 参照)。

[0029] 塑性歪み ε の変化率(増加速度) $d\varepsilon/dt$ は、シリコン結晶の各スリップ方向を考慮して、下記の式(9)のように表される。

[0030] [数9]

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} = \sum_{n=1}^{12} f^{(n)} p_{ij}^{(n)} \quad (9)$$

ここで、 i, j は結晶軸、 n は 1 2 個中 n 番目のスリップ系を示す。上記式 (9) の右辺の $f^{(n)}$ および $p_{ij}^{(n)}$ は、下記の式 (10) および式 (11) で表すことができる。

[0031] [数10]

$$f^{(n)} = bk_0 N_m^{(n)} (\tau_{eff}^{(n)})^p \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (10)$$

ここで、 b はバーガスベクトルの大きさ、 k_0 、 p は物質定数 (~ 1.0)、 $N_m^{(n)}$ は n 番目のスリップ系の可動転位密度、 $\tau_{eff}^{(n)}$ は n 番目のスリップ系の実効せん断応力、 Q はシリコンのパイエルスポテンシャル、 k はボルツマン定数、 T は温度である。

[0032] [数11]

$$P_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{\sigma_{RS}^{(n)}} \right) \left(v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)} \right) \quad (11)$$

ここで、 $\sigma_{RS}^{(n)}$ は n 番目スリップ系に分解されたせん断応力、 $v_i^{(n)}$ は n 番目スリップ系のスリップ面の法線方向の単位ベクトル、 $b_i^{(n)}$ は n 番目スリップ系のスリップ方向に平行な単位ベクトルである。これはシュミット因子を計算する為に必要になる。また、可動転位密度 $N_m^{(n)}$ の変化率 (増加速度) は、下記の式 (12) で表すことができる。

[0033] [数12]

$$\frac{dN_m^{(n)}}{dt} = Kk_0 N_m^{(n)} \left(\exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \right) (\tau_{eff}^{(n)})^{p+\lambda} \quad (12)$$

ここで、 K は実験結果との対応により決めた比例定数、 λ は物質定数である。また、実効せん断応力 $\tau_{eff}^{(n)}$ は各スリップ方向に分解された応力であり、下記の式 (13) で表される。

[0034]

[数13]

$$\tau_{eff}^{(n)} = |\sigma_{RS}^{(n)}| - D\sqrt{N_m^{(n)}} - \tau_d \quad (13)$$

ここで、Dは歪硬化因子 (Strain Hardening Factor) であり、 $G b / \beta$ である。また、 τ_d は転位と不純物の相互作用によるドラッグストレス (Drag Stress) である。

[0035] 上記式 (8) ~ (13) に基づいて、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を求めることができる。以下、反り量を計算する手順を具体的に説明する。

[0036] まず、ステップS1において、式 (8) を用いて、スリップが発生する熱処理の開始時 ($t = 0$) における初期転位密度 N_i を求める。初期転位密度 N_i は、別途、熱処理によって酸素析出物の形成に使用された酸素の濃度 ΔO_i と酸素析出物の平均サイズ L とを与えることによって求めることができる。例えば、シリコンウェーハに対してBMDを形成する熱処理の実験やシミュレーションを予め行っており、 ΔO_i および L が分かっている場合には、それらの値を式 (8) に入力することにより、 N_i を求めることができる。

[0037] また、例えば、所定の熱処理 (例えば、LSA) を行った後の反り量が目標値以下となるようなシリコンウェーハを製造したい要望があり、上記所定の熱処理の前にどのような ΔO_i および L を有するシリコンウェーハを用意すればよいかを調べたい場合には、 ΔO_i および L に適当な値を設定して、式 (8) から N_i を求めることができる。

[0038] 次に、ステップS2において、適切な計算手法、例えば有限要素法を用いて、シリコンウェーハに対する伝熱計算を行ってシリコンウェーハ内の温度分布を求め、求めた温度分布からシリコンウェーハ内の応力分布 σ を求める。得られた応力分布 σ は、各スリップ系の応力 $\sigma_{RS}^{(n)}$ に分解することができる。

[0039] 有限要素法は、材料の温度分布を求めるための伝熱計算や、応力分布を求める計算を行う手法として広く使用されている。そして、例えばABAQUS

S等の市販のソフトウェアが入手可能であり、こうしたソフトウェアを利用して上記応力分布 σ を求めることができる。

[0040] 続いて、ステップS3において、求めた各スリップ系の応力 $\sigma_{RS}^{(n)}$ 、およびステップS1で求めた初期転位密度 N_i を式(13)の右辺に入力し、各スリップ系の実効せん断応力 $\tau_{eff}^{(n)}$ を求める。その際、初期転位密度 N_i は、12個のスリップ系の各々に対して1/12ずつ分けて与える。

[0041] 続いて、ステップS4において、ステップS3において求めた各スリップ系の実効せん断応力 $\tau_{eff}^{(n)}$ 、およびステップS1で求めた初期転位密度 N_i を式(12)の右辺に入力する。その際、初期転位密度 N_i は、12個のスリップ系の各々に対して1/12ずつ分けて与える。これにより、各スリップ系の可動転位密度 $N_m^{(n)}$ の変化率(増加速度) $dN_m^{(n)}/dt$ を求めることができる。

[0042] また、ステップS5において、ステップS3において求めた各スリップ系の実効せん断応力 $\tau_{eff}^{(n)}$ およびステップS1で求めた初期転位密度 N_i 、および温度Tには、熱処理開始時の温度 T_i を式(10)に入力する。その際、初期転位密度 N_i は、12個のスリップ系の各々に対して1/12ずつ分けて与える。これにより、各スリップ系の $f^{(n)}$ を求めることができる。また、ステップS2において求めた各スリップ系の応力 $\sigma_{RS}^{(n)}$ を式(11)の右辺に入力することにより、各スリップ系の $P_{ij}^{(n)}$ を求めることができる。

[0043] このように求めた各スリップ系の $f^{(n)}$ および $P_{ij}^{(n)}$ を、式(9)の右辺に入力し、12個のスリップ系について $f^{(n)} \times P_{ij}^{(n)}$ を足し合わせることで、塑性歪み ε の変化率(増加速度)を求めることができる。

[0044] こうして、時刻 $t=0$ での塑性歪み ε の変化率(増加速度) $d\varepsilon_{ij}^p/dt$ が求まる。時刻 $t=0$ でのシリコンウェーハの歪みがゼロであると仮定した場合、微小時間 Δt 秒後の歪み $\varepsilon(t=\Delta t)$ は下記の式(14)で表される。

[数14]

$$\varepsilon(t = \Delta t) = \varepsilon(t = 0) + \left(\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} \right) \times \Delta t = \left(\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} \right) \times \Delta t \quad (14)$$

[0045] また、時刻 t での各スリップ系の可動転位密度 $N_m^{(n)}$ の変化率（増加速度） $N_m^{(n)} / dt$ も求まり、微小時間 Δt 秒後（ $t = \Delta t$ ）の各スリップ系の可動転位密度 $N_m^{(n)}$ （ $t = \Delta t$ ）は、下記の式（15）で表される。

[数15]

$$N_m^{(n)}(t = \Delta t) = N_i^{(n)} + \left(\frac{dN_m^{(n)}}{dt} \right) \times \Delta t \quad (15)$$

ここで、 $N_i^{(n)}$ は、ステップ S 1 で求めた初期転位密度 N_i を、12 個のスリップ系の各々に対して 1 / 12 ずつ分けたもの、すなわち、 $N_i / 12$ である。

[0046] 上述のように求めた時刻 $t = \Delta t$ での可動転位密度 $N_m^{(n)}$ （ $t = \Delta t$ ）に基づいて、ステップ S 2 ～ステップ S 5 の計算を行う。その際、式（10）および式（12）における温度 T は、時間 Δt の増加に応じた値に変更して計算する。こうして、 $t = \Delta t$ についても、塑性歪み ε の変化率（増加速度） $d\varepsilon / dt$ および各スリップ系の可動転位密度 N_m の変化率（増加速度） $N_m^{(n)} / dt$ を求めることができる。そして、 $t = 2\Delta t$ での歪み ε （ $t = 2\Delta t$ ）および各スリップ系の可動転位密度 $N_m^{(n)}$ を求めることができる。

[0047] このように、時間 t を微小時間 Δt だけ増加させて、ステップ S 2 ～ステップ S 5 の処理を繰り返し行うことにより、可動転位密度 N_m 、応力 σ および歪み ε の時間発展を計算することができる。シリコンウェーハの熱処理後の塑性変形量は、各時刻 t での計算によって求められた歪み ε の増分 $\Delta\varepsilon$ を熱処理開始時から熱処理終了時までについて足し合わせたもの、すなわち、熱処理終了時（ $t = t_f$ ）での歪み ε （ $t = t_f$ ）として求めることができる。こうして、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する塑性変形量、すなわち反り量を予測することができる。

[0048] なお、式（１０）および（１２）におけるシリコンのパイエルスポテンシャル Q は、直線状の転位が完全結晶中を運動するときのエネルギー障壁を意味している。パイエルスポテンシャル Q が低いほど、転位の移動に必要なエネルギーが低くなる為に、転位の移動は容易となり移動速度は増加する。転位の移動速度 v は、下記の式で与えられる。

[0049] [数16]

$$v = v_0 \tau \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (16)$$

ここで、 v_0 は定数、 τ は結晶に印加する応力である。

[0050] 簡便には、上記 Q の値としては、シリコンのパイエルスポテンシャルとして一般的に使用されている 2.2 eV を用いることができる。この値は、不純物の濃度が十分に低いシリコンに対して求められた値である。しかし、実際には、転位の移動速度 v は、導電型や抵抗率を調整するために添加されるドーパント等の不純物に依存し、パイエルスポテンシャル Q の値も同様に依存する（例えば、K. Sumino, Philosophical Magazine A, Vol. 47, No. 4, 599 (1983) 参照）。

[0051] そこで、シリコンウェーハに添加されている不純物の種類や濃度等に応じて、パイエルスポテンシャル Q として、不純物の影響が加味されたシリコンのパイエルスポテンシャルを使用することが好ましい。これにより、不純物の影響を加味して、熱処理後のシリコンウェーハの反り量を求めることができる。

[0052] 具体的には、不純物として赤リン（P）を高濃度に添加すると、転位の移動速度が増大することが知られており、上記角野の文献においては、 Q の値は 1.7 eV とされている。また、不純物としてホウ素（B）を高濃度で添加しても、転位の移動速度はあまり変化しないことが知られている。よって、 Q の値としては、 2.2 eV を用いることができる。

[0053] （シリコンウェーハの製造方法）

次に、本発明によるシリコンウェーハの製造方法について説明する。上述のように、本発明によるシリコンウェーハの反り量の予測方法によって、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を予測することができる。これを利用して、所定の熱処理（例えば、LSA）を行った後の反り量が、目標値以下となるようなシリコンウェーハを製造することができる。

[0054] 具体的には、所定の熱処理（例えば、LSA）を行った後の反り量が、目標反り量以下となるようなシリコンウェーハを製造する場合、まず、 ΔO_i および L をパラメータとして用いて、上記本発明の方法によって、前記シリコンウェーハの前記熱処理後の反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L を求める。具体的には、ある ΔO_i および L に対して初期転位密度 N_i を計算し、得られた初期転位密度 N_i を用いて、本発明の方法によって所定の熱処理後のシリコンウェーハの反り量を求める。求めた反り量が目標の反り量を超える場合には、 ΔO_i および L を変更して N_i を計算し、再度反り量を計算する。これらの処理を、求めた反り量が目標反り量以下となるまで行う。

[0055] 次に、求めた反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L が得られたら、上記所定の熱処理の前の工程、例えばデバイス形成工程におけるフィールド酸化膜形成工程の熱処理によって、上記所定の熱処理の開始時のシリコンウェーハの ΔO_i および L が、上記求めた反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L となるように、シリコン単結晶の成長条件を決定する。そして、決定した成長条件の下でシリコン単結晶を成長させ、得られたシリコン単結晶を加工してシリコンウェーハとする。これにより、製造されたシリコンウェーハを上記所定の熱処理に供した場合に、熱処理後のシリコンウェーハの反り量を目標反り量以下とすることができる。

実施例

[0056] 以下、本発明の実施例について説明するが、本発明は実施例に限定されない。

[0057] （実験例 1 ～ 3）

本発明によるモデルの妥当性を検証する目的で、実験を行った。まず、シリコンウェーハ中に酸素析出物であるBMD (Bulk Micro Defects) を生成する熱処理 (BMD熱処理) を行った。具体的には、初期酸素濃度 O_i が約 $1.2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の200mmのホウ素ドーパ型CZウェーハに対して、650℃ (24時間) + 850℃ (4時間) + 1000℃ (12時間) の熱処理を施した。

[0058] 次に、スリップ転位による塑性変形を実際に起こす熱処理を行った。具体的には、750℃の炉に100mm/分の速度で縦型熱処理炉に投入し、一定の速度で1150℃まで昇温して30分保持した後、750℃まで2℃/分で降温し、100mm/分の速度で炉から取り出した。その際、750℃から1150℃までの昇温速度は5℃/分 (実験例1)、10℃/分 (実験例2)、15℃/分 (実験例3) とした。熱処理後の反り量を表1に示す。

[0059] [表1]

シリコンウェーハ	昇温速度 (℃/分)	降温速度 (℃/分)	パイエルス ポテンシャルQ (eV)	反り量 (μm)	
				実験例	発明例
ホウ素ドーパ型	5	2	2.2	0 (実験例1)	0 (発明例1)
ホウ素ドーパ型	10	2	2.2	23 (実験例2)	28 (発明例2)
ホウ素ドーパ型	15	2	2.2	82 (実験例3)	90 (発明例3)
赤リン高濃度ドーパ型	15	2	1.7	121 (実験例4)	128 (発明例4)

[0060] (発明例1～3)

上記実験例1～3の炉内環境を模擬してシリコンウェーハの温度分布を計算するために、縦型熱処理炉をモデル化して、実験例と同じ条件で有限要素法を用いてシミュレーションを行った。特に、炉への投入時のシリコンウェーハが経験する温度変化を反映させるために、輻射による熱伝達モデルで伝熱計算およびパイエルスポテンシャルQを2.2eVとして塑性変形モデルを適用した応力計算を行い、シリコンウェーハの反り量を計算した。その際、750℃から1150℃までの昇温速度が5℃/分のものを発明例1、10℃/分のものを発明例2、15℃/分のものを発明例3とした。得られた反り量を表1に示す。

[0061] <実験例1～3と発明例1～3との比較>

表 1 に示したように、昇温速度が $5^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の場合、実験例 1 では反り量が $0\ \mu\text{m}$ であったのに対して、発明例 1 でも反り量は $0\ \mu\text{m}$ であった。また、昇温速度が $10^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の場合、実験例 2 では反り量が $23\ \mu\text{m}$ であったのに対して、発明例 2 では反り量が $28\ \mu\text{m}$ であった。さらに、昇温速度が $15^{\circ}\text{C}/\text{分}$ の場合、実験例 1 では反り量が $82\ \mu\text{m}$ であったのに対して、発明例 3 では反り量が $92\ \mu\text{m}$ であった。これらの結果から、本発明によるシリコンウェーハの反り量の予測方法によって、実際の熱処理でのウェーハの反り量を高精度に予測できることが分かる。

[0062] (実験例 4)

実験例 3 と同様に、シリコンウェーハの反り量を測定した。ただし、シリコンウェーハとして、赤リン (P) を高濃度にドーピングした n 型 CZ ウェーハを用いた。その他の条件は実験例 3 と全て同じである。得られた反り量を表 1 に示す。

[0063] (発明例 4)

発明例 3 と同様に、シリコンウェーハの反り量を計算した。ただし、シリコンウェーハとして、赤リン (P) を高濃度にドーピングした n 型 CZ ウェーハを想定し、パイエルスポテンシャル Q の値を $1.7\ \text{eV}$ とした。その他の条件は発明例 3 と全て同じである。得られた反り量を表 1 に示す。

[0064] <実験例 4 と発明例 4 との比較>

表 1 に示すように、赤リンを高濃度にドーピングしたウェーハを用いた実験例 4 では、反り量は $121\ \mu\text{m}$ と実験例 3 よりも大きくなった。一方、赤リンを高濃度にドーピングした影響を加味していないパイエルスポテンシャル ($2.2\ \text{eV}$) を用いた実施例 3 では、反り量が $90\ \mu\text{m}$ である。これに対して、赤リンを高濃度にドーピングした影響が加味されたパイエルスポテンシャル ($1.7\ \text{eV}$) を用いた発明例 4 では、反り量は $128\ \mu\text{m}$ となり、実験例 4 の反り量を高精度に予測できることが分かる。発明例 3 の反り量よりも発明例 4 の反り量が大きくなったのは、発明例 4 では、パイエルスポテンシャルを $1.7\ \text{eV}$ としており、p 型ウェーハと比べて低いため、転位の移動が容易

となったためである。このように、添加不純物元素に応じて不純物の影響が加味されたシリコンのパイエルスポテンシャルを用いることにより、ウェーハの反り量をより高精度に予測できることが分かる。

産業上の利用可能性

[0065] 本発明によれば、シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を、酸素の影響を考慮して予測することができる。

請求の範囲

〔請求項1〕 シリコンウェーハに対して熱処理を施した際に発生する反り量を予測する方法であって、

前記熱処理中の前記シリコンウェーハの歪みの変化率と可動転位密度の変化率から前記可動転位密度、応力および歪みの時間発展を求め、求めた前記歪みの時間発展に基づいて前記シリコンウェーハの塑性変形量を求めて、これを反り量とし、

前記熱処理の開始時の可動転位密度 N_i は、 A 、 L_0 ：定数、 ΔO_i ：前記熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物に使用された酸素の濃度、 L ：前記熱処理の開始時での前記シリコンウェーハにおける酸素析出物の平均サイズとして、

〔数1〕

$$N_i = A \times (\Delta O_i \times L - L_0)^{2.5} \quad (1)$$

で与えられることを特徴とするシリコンウェーハの反り量の予測方法。

〔請求項2〕 前記歪み ε の変化率 $d\varepsilon / dt$ は、

〔数2〕

$$\frac{d\varepsilon_{ij}^p}{dt} = \sum_{n=1}^{12} f^{(n)} p_{ij}^{(n)} \quad (2)$$

で与えられる、請求項1に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。ここで、

〔数3〕

$$f^{(n)} = b k_0 N_m^{(n)} (\tau_{eff}^{(n)})^p \exp\left(\frac{-Q}{kT}\right) \quad (3)$$

[数4]

$$P_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{|\sigma_{RS}^{(n)}|} \right) \left(v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)} \right) \quad (4)$$

[数5]

$$\tau_{eff}^{(n)} = |\sigma_{RS}^{(n)}| - D \sqrt{N_m^{(n)}} - \tau_d \quad (5)$$

であり、 b : バーガースベクトルの大きさ、 k_0 , p : 物質定数、 N_m : 可動転位密度、 τ_{eff} : 実効せん断応力、 Q : シリコンのパイエルスポテンシャル、 k : ボルツマン定数、 T : 温度、 σ_{RS} : 応力、 v_i : スリップ面の法線方向の単位ベクトル、 b_i : スリップ方向に平行な単位ベクトル、 D : 歪硬化因子、 τ_d : ドラッグストレスである。

[請求項3] 前記可動転位密度 N_m の変化率 $dN_m^{(n)} / dt$ は、

[数6]

$$\frac{dN_m^{(n)}}{dt} = K k_0 N_m^{(n)} \left(\exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \right) \left(\tau_{eff}^{(n)} \right)^{p+\lambda} \quad (6)$$

で与えられる、請求項1または2に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。ここで、

[数7]

$$\tau_{eff}^{(n)} = |\sigma_{RS}^{(n)}| - D \sqrt{N_m^{(n)}} - \tau_d \quad (7)$$

であり、 K : 定数、 k_0 , p , λ : 物質定数、 Q : シリコンのパイエルスポテンシャル、 k : ボルツマン定数、 T : 温度、 τ_{eff} : 実効せん断応力、 σ_{RS} : 応力、 D : 歪硬化因子、 τ_d : ドラッグストレスである。

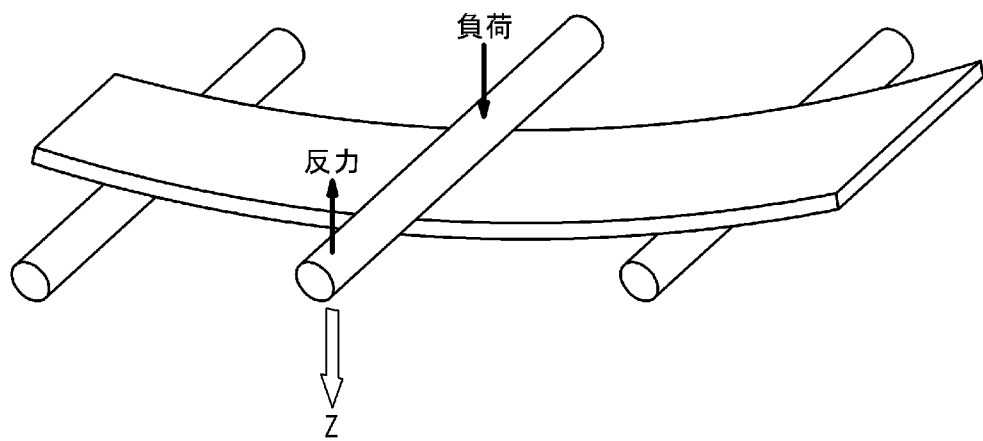
[請求項4] 前記シリコンのパイエルスポテンシャル Q として、不純物の影響が加味されたシリコンのパイエルスポテンシャルを使用する、請求項2

または3に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。

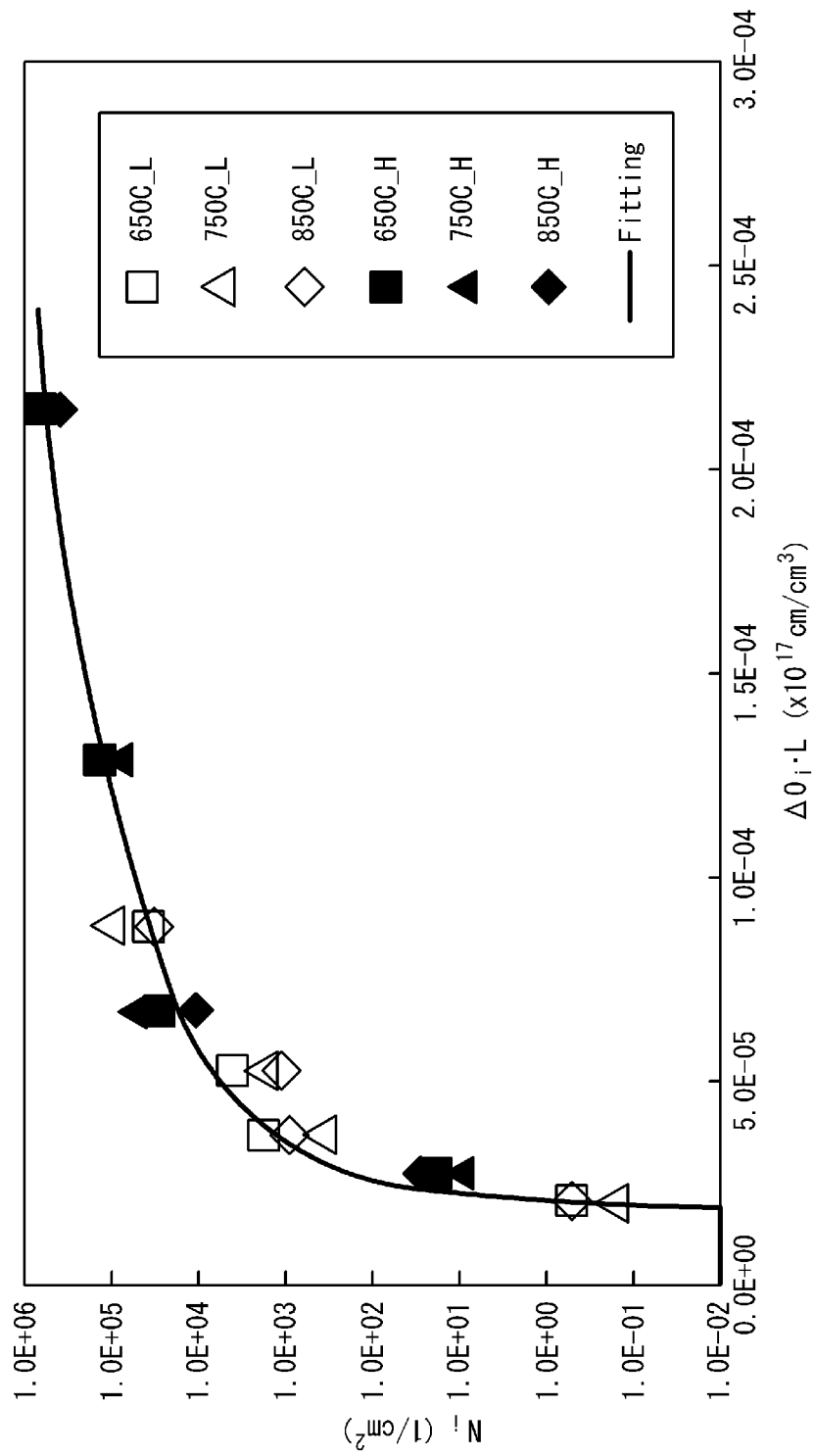
[請求項5] 前記応力は有限要素法により求める、請求項1～4のいずれか一項に記載のシリコンウェーハの反り量の予測方法。

[請求項6] ΔO_i および L をパラメータとして用いて、請求項1～5のいずれかの方法によって、前記シリコンウェーハの前記熱処理後の反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L を求め、前記熱処理の開始時のシリコンウェーハの ΔO_i および L が、前記熱処理後の反り量が目標反り量以下となる ΔO_i および L となるようにシリコン単結晶の成長条件を決定してシリコン単結晶を成長させ、得られたシリコン単結晶を加工してシリコンウェーハとすることを特徴とするシリコンウェーハ製造方法。

[図1]



[図2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/019432

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

Int. Cl. H01L21/66(2006.01)i, C30B29/06(2006.01)i, C30B33/02(2006.01)i, H01L21/00(2006.01)i, H01L21/02(2006.01)i, H01L21/20(2006.01)i, H01L21/322(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

Int. Cl. H01L21/66, C30B29/06, C30B33/02, H01L21/00, H01L21/02, H01L21/20, H01L21/322

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Published examined utility model applications of Japan 1922-1996

Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2018

Registered utility model specifications of Japan 1996-2018

Published registered utility model applications of Japan 1994-2018

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

JSTPlus/JST758Q (JDreamIII), Scopus

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2017-17065 A (SUMCO CORP.) 19 January 2017 & US 2016/0377554 A1 & KR 10-2017-0001635 A & TW 201715611 A	1-6
A	JP 2016-157865 A (SUMCO CORP.) 01 September 2016 & US 2016/0247694 A1 & KR 10-2016-0103944 A & TW 201643964 A	1-6
A	JP 2017-152436 A (SUMCO CORP.) 31 August 2017 (Family: none)	1-6
A	JP 2009-164155 A (SILTRONIC AG) 23 July 2009 (Family: none)	1-6



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

“T” later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search
30.07.2018

Date of mailing of the international search report
07.08.2018

Name and mailing address of the ISA/
Japan Patent Office
3-4-3, Kasumigaseki, Chiyoda-ku,
Tokyo 100-8915, Japan

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2018/019432

C (Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	MIYAZAKI, N., Dislocation density evaluation using dislocation kinetics model, Journal of Crystal Growth, 2007, vol. 303, pp. 302-309	1-6
A	NAKANO, S. et al., Numerical analysis of the relation between dislocation density and residual strain in silicon ingots used in solar cells, Journal of Crystal Growth, 2017, vol. 474, pp. 130-134	1-6

A. 発明の属する分野の分類 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/66(2006.01)i, C30B29/06(2006.01)i, C30B33/02(2006.01)i, H01L21/00(2006.01)i,
H01L21/02(2006.01)i, H01L21/20(2006.01)i, H01L21/322(2006.01)i

B. 調査を行った分野

調査を行った最小限資料 (国際特許分類 (IPC))

Int.Cl. H01L21/66, C30B29/06, C30B33/02, H01L21/00, H01L21/02, H01L21/20, H01L21/322

最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの

日本国実用新案公報	1922-1996年
日本国公開実用新案公報	1971-2018年
日本国実用新案登録公報	1996-2018年
日本国登録実用新案公報	1994-2018年

国際調査で使用した電子データベース (データベースの名称、調査に使用した用語)

JSTPlus/JST7580 (JDreamIII), Scopus

C. 関連すると認められる文献

引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2017-17065 A (株式会社SUMCO) 2017.01.19 & US 2016/0377554 A1 & KR 10-2017-0001635 A & TW 201715611 A	1-6
A	JP 2016-157865 A (株式会社SUMCO) 2016.09.01 & US 2016/0247694 A1 & KR 10-2016-0103944 A & TW 201643964 A	1-6
A	JP 2017-152436 A (株式会社SUMCO) 2017.08.31 (ファミリーなし)	1-6

☑ C欄の続きにも文献が列挙されている。

☐ パテントファミリーに関する別紙を参照。

* 引用文献のカテゴリー

「A」 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの

「E」 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの

「L」 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献 (理由を付す)

「O」 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献

「P」 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願

の日の後に公表された文献

「T」 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と矛盾するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの

「X」 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの

「Y」 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの

「&」 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日

30.07.2018

国際調査報告の発送日

07.08.2018

国際調査機関の名称及びあて先

日本国特許庁 (ISA/J P)

郵便番号 100-8915

東京都千代田区霞が関三丁目4番3号

特許庁審査官 (権限のある職員)

安田 雅彦

50

9447

電話番号 03-3581-1101 内線 3559

C (続き) . 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	JP 2009-164155 A (ジルトロニック アクチエンゲゼルシャフト) 2009.07.23 (ファミリーなし)	1 - 6
A	MIYAZAKI, N., Dislocation density evaluation using dislocation kinetics model, Journal of Crystal Growth, 2007, Vol.303, pp.302-309	1 - 6
A	NAKANO, S. et al., Numerical analysis of the relation between dislocation density and residual strain in silicon ingots used in solar cells, Journal of Crystal Growth, 2017, Vol.474, pp.130-134	1 - 6