



(19)
Bundesrepublik Deutschland
Deutsches Patent- und Markenamt

(10) **DE 699 08 965 T2** 2004.05.13

(12) **Übersetzung der europäischen Patentschrift**

(97) **EP 1 125 008 B1**

(21) Deutsches Aktenzeichen: **699 08 965.4**

(86) PCT-Aktenzeichen: **PCT/US99/24068**

(96) Europäisches Aktenzeichen: **99 956 562.5**

(87) PCT-Veröffentlichungs-Nr.: **WO 00/22198**

(86) PCT-Anmeldetag: **13.10.1999**

(87) Veröffentlichungstag
der PCT-Anmeldung: **20.04.2000**

(97) Erstveröffentlichung durch das EPA: **22.08.2001**

(97) Veröffentlichungstag
der Patenterteilung beim EPA: **18.06.2003**

(47) Veröffentlichungstag im Patentblatt: **13.05.2004**

(51) Int Cl.⁷: **C30B 15/00**
C30B 29/06, C30B 33/00

(30) Unionspriorität:
104304 P 14.10.1998 US

(73) Patentinhaber:
**Memc Electronic Materials, Inc., St. Peters, Mo.,
US**

(74) Vertreter:
Schwabe, Sandmair, Marx, 81677 München

(84) Benannte Vertragsstaaten:
DE, FR, GB, IT

(72) Erfinder:
**FALSTER, J., Robert, I-20123 Milano, IT; BINNS,
Martin J., Saint Peters, US; WANG, Alan, Saint
Peters, US**

(54) Bezeichnung: **WÄRMEGETEMPERTES EINKRISTALLINES SILIZIUM MIT NIEDRIGER FEHLERDICHT**

Anmerkung: Innerhalb von neun Monaten nach der Bekanntmachung des Hinweises auf die Erteilung des europäischen Patents kann jedermann beim Europäischen Patentamt gegen das erteilte europäische Patent Einspruch einlegen. Der Einspruch ist schriftlich einzureichen und zu begründen. Er gilt erst als eingelegt, wenn die Einspruchsgebühr entrichtet worden ist (Art. 99 (1) Europäisches Patentübereinkommen).

Die Übersetzung ist gemäß Artikel II § 3 Abs. 1 IntPatÜG 1991 vom Patentinhaber eingereicht worden. Sie wurde vom Deutschen Patent- und Markenamt inhaltlich nicht geprüft.

Beschreibung**HINTERGRUND DER ERFINDUNG**

[0001] Die vorliegende Erfindung bezieht sich allgemein auf die Erstellung von Halbleiter-Einkristall-Silizium, das bei der Herstellung elektronischer Komponenten verwendet wird. Insbesondere bezieht sich die vorliegende Erfindung auf Einkristall-Silizium-Rohlinge und -Wafer mit einem ersten axialsymmetrischen Bereich von Silizium-Eigenzwischengitteratom-dominiertem Material, der im Wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist, und mit einem zweiten axialsymmetrischen Bereich oder Kern von Leerstellen-dominiertem Material, der ebenfalls im Wesentlichen frei von agglomerierten Leerstellen ist, sowie auf einen Prozess für deren Erstellung.

[0002] Einkristall-Silizium, welches das Ausgangsmaterial für die meisten Prozesse für die Herstellung elektronischer Halbleiterkomponenten ist, wird üblicherweise durch das sogenannte Czochralski-Verfahren ("Cz"-Verfahren) erstellt. In diesem Verfahren wird polykristallines Silizium ("Polysilizium") in einen Schmelztiegel gefüllt und geschmolzen, mit dem geschmolzenen Silizium ein Keimkristall in Kontakt gebracht und durch langsames Herausziehen ein Einkristall gewachsen. Nachdem die Ausbildung einer Verjüngung abgeschlossen ist, wird der Durchmesser des Kristalls durch Verringern der Züchtungsrate und/oder der Schmelztemperatur vergrößert, bis der gewünschte oder Zieldurchmesser erreicht ist. Daraufhin wird der zylindrische Hauptkörper des Kristalls, der einen etwa konstanten Durchmesser besitzt, durch Steuern der Zugrate und der Schmelztemperatur gewachsen, während der sich verringern- de Schmelzepegel kompensiert wird. In der Nähe des Endes des Wachstumsprozesses, jedoch bevor der Schmelztiegel von geschmolzenem Silizium entleert ist, muss der Kristalldurchmesser allmählich verringert werden, um einen Endkonus auszubilden. Typischerweise wird der Endkonus dadurch ausgebildet, dass die Kristallzugrate und die dem Schmelztiegel zugeführte Wärme erhöht werden. Wenn der Durchmesser klein genug wird, wird der Kristall daraufhin von der Schmelze getrennt.

[0003] In den jüngsten Jahren ist erkannt worden, dass sich in der Kristallwachstumschamber eine Anzahl von Defekten in dem Einkristall-Silizium ausbilden, während sich der Kristall nach der Verfestigung abkühlt. Solche Defekte entstehen teilweise wegen der Anwesenheit eines Überschusses (d. h. einer Konzentration über der Lösbarkeitsgrenze) intrinsischer Punktfehlstellen, die als Leerstellen und Eigenzwischengitteratome bekannt sind. Siliziumkristalle, die aus einer Schmelze gewachsen sind, sind typischerweise mit einem Überschuss des einen oder des anderen Typs einer intrinsischen Punktfehlstelle, entweder mit Kristallgitter-Fehlstellen ("L") oder mit Silizium-Eigenzwischengitteratomen ("Z"), gewach-

sen. Es ist angedeutet worden, dass der Typ und die Anfangskonzentration dieser Punktfehlstellen in dem Silizium zum Zeitpunkt der Verfestigung bestimmt werden, wobei wahrscheinlich eine Reaktion oder ein Agglomerationsereignis stattfindet, wenn diese Konzentrationen einen Pegel der kritischen Übersättigung in dem System erreichen und die Beweglichkeit der Punktfehlstellen ausreichend hoch ist. Agglomerierte intrinsische Punktfehlstellen in Silizium können sich stark auf das Ausbeutepotenzial des Materials bei der Produktion komplexer und hochintegrierter Schaltungen auswirken.

[0004] Es wird erkannt, dass Leerstellendefekte der Ursprung solcher beobachtbarer Kristalldefekte wie D-Defekte, Flussbilddefekte (FPDs), Gate-Oxid-Integritätsdefekte (GOI-Defekte), durch den Kristall erzeugter Partikeldefekte (COP-Defekte), durch den Kristall erzeugter Lichtpunktfehlstellen (LPDs) sowie bestimmter Klassen von Grundmaterialdefekten sind, die durch Infrarotlicht-Streutechniken wie etwa die Rasterinfrarotmikroskopie und die Laser-Raster-Tomographie beobachtet werden. Außerdem sind in Bereichen von Überschussfehlstellen Defekte vorhanden, die als Keime für durch Ringoxidation erzeugte Stapelfehler (OISF) wirken. Es wird vermutet, dass dieser besondere Defekt ein Hochtemperatur-Keimbildungs-Sauerstoffagglomerat ist, welches durch die Anwesenheit von Überschussleerstellen katalysiert wird.

[0005] Defekte, die sich auf Eigenzwischengitteratome beziehen, sind weniger gut untersucht worden. Sie werden üblicherweise als niedrige Dichten von Eigenzwischengitteratom-Versetzungsschleifen oder -netzen betrachtet. Solche Defekte sind nicht verantwortlich für Gate-Oxid-Integritätsfehler, ein wichtiges Wafer-Leistungskriterium, sondern werden weitgehend als Ursache anderer Typen von Vorrichtungsfehlern betrachtet, die üblicherweise mit Stromleckproblemen zusammenhängen.

[0006] Die Dichte solcher Leerstellen- und Eigenzwischengitteratom-Agglomerationsdefekte in Czochralski-Silizium liegt herkömmlich im Bereich von etwa $1 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$ bis etwa $1 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$. Obgleich diese Werte verhältnismäßig niedrig sind, sind agglomerierte intrinsische Punktfehlstellen für Vorrichtungshersteller von schnell zunehmender Bedeutung und werden jetzt tatsächlich als ausbeutebegrenzende Faktoren in Vorrichtungsherstellungsprozessen angesehen.

[0007] Bis heute gibt es allgemein drei Hauptzugänge zur Behandlung des Problems agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen. Der erste Zugang umfasst Verfahren, die sich auf die Kristallzüchtungstechniken konzentrieren, um die Anzahldichte agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen in dem Rohling zu verringern. Dieser Zugang kann weiter in jene Verfahren mit Kristallzüchtungsbedingungen, die zur Ausbildung von Leerstellen-dominiertem Material führen, und in jene Verfahren mit Kristallzüchtungsbedingungen, die zur Ausbildung von Eigenzwi-

schengitteratomdominiertem Material führen, unterteilt werden. Beispielsweise ist vorgeschlagen worden, dass die Anzahldichte agglomerierter Defekte dadurch verringert werden kann, dass (i) v/G_0 gesteuert wird, um einen Kristall zu wachsen, in dem Kristallgitterfehlstellen die dominante intrinsische Punktfehlstelle sind, und (ii) die Keimbildungsrate der agglomerierten Defekte dadurch beeinflusst wird, dass die Abkühlrate des Silizium-Rohlings während des Kristallzuchtprozesses von etwa 1100°C auf etwa 1050°C geändert (allgemein verlangsamt) wird. Obgleich dieser Zugang die Anzahldichte agglomerierter Defekte verringert, verhindert er ihre Ausbildung nicht. Während die von den Vorrichtungsherstellern gestellten Anforderungen immer strenger werden, wird die Anwesenheit dieser Defekte immer mehr zu einem Problem.

[0008] Andere haben vorgeschlagen, die Zugrate während des Wachstums des Körpers des Kristalls auf einen Wert von weniger als etwa 0,4 mm/Minute zu verringern. Allerdings ist dieser Vorschlag ebenfalls nicht zufrieden stellend, da eine so niedrige Zugrate zu einem verringerten Durchsatz für jeden Kristallzüchter führt. Noch wichtiger ist, dass solche Zugraten zur Ausbildung von Einkristall-Silizium mit hoher Konzentration von Eigenzwischengitteratomen führen. Diese hohe Konzentration führt ihrerseits zur Ausbildung agglomerierter Eigenzwischengitteratom-Fehlstellen und allen resultierenden Problemen im Zusammenhang mit solchen Defekten.

[0009] Ein zweiter Zugang zur Behandlung des Problems agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen umfasst Verfahren, die sich auf die Auflösung oder Vernichtung agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen nach ihrer Ausbildung konzentrieren. Allgemein wird dies durch die Verwendung von Hochtemperatur-Wärmebehandlungen des Siliziums in Wafer-Form erzielt. Beispielsweise schlagen Fusegawa u. a. in der europäischen Patentanmeldung 503.816 A1 das Wachsen des Silizium-Rohlings mit einer Wachstumsrate von mehr als 0,8 mm/Minute und die Wärmebehandlung der Wafer, die aus dem Rohling geschnitten werden, bei einer Temperatur im Bereich von 1150°C bis 1280°C vor, um die Defektdichte in einem dünnen Bereich in der Nähe der Wafer-Oberfläche zu verringern. Allerdings kann ein solcher Prozess problematisch sein, während der Durchmesser des Rohlings steigt; d. h., die Zugrate kann nicht ausreichen, um sicherzustellen, dass das Material vollständig von intrinsischen Leerstellen-Punktfehlstellen dominiert wird. Falls agglomerierte Silizium-Eigenzwischengitteratom-Fehlstellen ausgebildet werden, bewirken Wärmebehandlungen allgemein nicht deren Entfernen oder Auflösen.

[0010] Ein dritter Zugang zur Behandlung des Problems agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen ist die epitaktische Ablagerung einer dünnen Kristallschicht von Silizium auf der Oberfläche eines Einkristall-Siliziumwafers. Dieser Prozess erzeugt einen Einkristall-Siliziumwafer mit einer Oberfläche, die im

Wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist. Allerdings erhöht die epitaktische Ablagerung die Kosten des Wafers wesentlich.

[0011] In Extended Abstracts, U.S. Electrochemical Society, Princeton N. J. (US), Bd. 93/2, (1/1/93), S. 426 bis 427, ist ein Prozess für das Wasserstofftempern herkömmlicher Czochralski-gewachsener Wafer zum Verringern von Grundmaterial-Mikrodefekten (BMDs) durch das Auflösen von Keimen der Sauerstoffausscheidung, die während des Kristallwachstums eingeführt werden, insbesondere von BMDs in dem nahen Oberflächenbereich des Wafers, der sich von der Oberfläche des Wafers bis in eine Tiefe von bis zu 10 µm von der Oberfläche erstreckt, offenbart, wobei diese Defekte als Oberflächengrundmaterial-Mikrodefekte (s-BMDs) beschrieben werden.

[0012] Die deutsche Offenlegungsschrift Nr. 19806045 lehrt einen Wafer mit einem Zwischengitteratom-reichen Bereich, der frei von Leerstellenagglomeraten und Zwischengitteratom-Agglomeraten ist, und mit einem Leerstellen-reichen Bereich.

[0013] Angesichts dieser Entwicklungen besteht weiter ein Bedarf an einem Verfahren einer Einkristall-Siliziumherstellung, das bewirkt, dass die Ausbildung von agglomerierten intrinsischen Eigenzwischengitteratom-Punktfehlstellen dadurch verhindert wird, dass die Agglomerationsreaktionen, die sie erzeugen, unterdrückt werden, während es Mittelschafft, mit denen vorhandene agglomerierte Leerstellendefekte nachfolgend entfernt werden. Außerdem schafft ein solches Verfahren Einkristall-Siliziumwafer mit einem epi-artigen Ausbeutepotenzial in Bezug auf die Anzahl der pro Wafer erhaltenen Schaltungen ohne die hohen Kosten im Zusammenhang mit einem epitaktischen Prozess.

ZUSAMMENFASSUNG DER ERFINDUNG

[0014] Zu den Aufgaben der vorliegenden Erfindung zählt somit die Schaffung eines Einkristall-Silizium-Rohlings oder eines daraus abgeleiteten Wafers mit einem axialsymmetrischen Bereich mit im Wesentlichen radialer Breite, der im Wesentlichen frei von Defekten ist, die sich aus einer Agglomeration von Kristallgitter-Leerstellen oder Silizium-Eigenzwischengitteratomen ergeben; die Schaffung eines solchen Wafers, in dem ein im Wesentlichen defektfreier axialsymmetrischer Bereich von Zwischengitteratom-dominiertem Material einen Kern von Leerstellendominiertem Material umgibt; die Schaffung eines solchen Wafers, in dem der Kern von Leerstellenmaterial eine ungleichförmige Verteilung agglomerierter Leerstellendefekte hat; die Schaffung eines Prozesses zur Erstellung eines Einkristall-Silizium-Rohlings oder eines daraus abgeleiteten Wafers, in dem die Konzentration von Eigenzwischengitteratomen gesteuert wird, um eine Agglomeration solcher Defekte in einem axialsymmetrischen Segment eines Abschnitts des Rohlings mit konstantem Durchmesser, während sich der Rohling von der Verfestigungstem-

peratur abkühlt, zu verhindern; und die Schaffung eines solchen Prozesses, in dem agglomerierte Leerstellendefekte, falls sie vorhanden sind, durch die Wärmebehandlung des Silizium in Wafer-Form gelöst werden.

[0015] Kurz gesagt, ist die vorliegende Erfindung somit auf einen Einkristall-Siliziumwafer mit einer zentralen Achse, einer Vorderseite und einer Rückseite, die im Allgemeinen senkrecht zu der zentralen Achse sind, einer zentralen Ebene zwischen der Vorder- und Rückseite, einer Umfangskante und einem Radius, der sich von der zentralen Achse zu der Umfangskante erstreckt, gerichtet. Der Wafer umfasst einen ersten axialsymmetrischen Bereich, der sich radial nach innen von der Umfangskante erstreckt und in dem Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im Wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, und einen zweiten axialsymmetrischen Bereich, bei dem Leerstellen die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind, wobei der Zweite axialsymmetrische Bereich eine Oberflächenschicht, die sich von der Vorderseite in Richtung auf die zentrale Ebene erstreckt, und eine Grundmaterialschicht, die sich von der Oberflächenschicht zu der zentralen Ebene erstreckt, umfasst, wobei die Konzentration agglomerierter Leerstellendefekte in der Oberflächenschicht geringer als die Konzentration in der Grundmaterialschicht ist.

[0016] Ferner ist die vorliegende Erfindung auf einen Prozess zum Erstellen eines Einkristall-Siliziumwafers gerichtet, der im Wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist. Der Prozess umfasst das thermische Tempern eines Einkristall-Siliziumwafers bei einer Temperatur von ungefähr 1000°C in einer Atmosphäre von Wasserstoff, Argon oder einer Mischung daraus, wobei der Wafer eine zentrale Achse, eine Vorderseite und eine Rückseite, die im Allgemeinen senkrecht zu der zentralen Achse sind, eine zentrale Ebene zwischen den Vorder- und Rückseiten, eine Umfangskante, einen Radius, der sich von der zentralen Achse zu der Umfangskante erstreckt, einen ersten axialsymmetrischen Bereich, der sich radial nach innen ausgehend von der Umfangskante erstreckt, in dem Silizium-Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im Wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratomen ist, und einen zweiten axialsymmetrischen Bereich hat, der sich radial einwärts von dem ersten axialsymmetrischen Bereich befindet und in dem Leerstellen die vorherrschende intrinsische Punktfehlstelle sind. Das thermische Ausheilen wirkt, um agglomerierte Leerstellen aufzulösen, die in dem zweiten axialsymmetrischen Bereich innerhalb einer Schicht vorhanden sind, die sich von der Vorderseite in Richtung der zentralen Ebene erstreckt.

[0017] In einem solchen Prozess kann der Einkristall-Siliziumwafer von einem Einkristall-Silizium-Rohling geschnitten werden, der eine zentrale Achse, ei-

nen Kristallkeim-Konus, einen Endkonus und einen Abschnitt mit konstantem Durchmesser hat, der sich zwischen dem Kristallkeim-Konus und dem Endkonus erstreckt, wobei der Abschnitt konstanten Durchmessers eine Umfangskante und einen Radius hat, der sich von der Umfangskante in Richtung auf die zentrale Achse erstreckt, wobei der Rohling von einer Siliziumschmelze gewachsen wurde und daraufhin ausgehend von der Verfestigungstemperatur in Übereinstimmung mit dem Czochralski-Verfahren durch ein Verfahren gekühlt wurde, das umfasst: (i) der Einkristall-Silizium-Rohling wird gewachsen, wobei die Wachstumsrate v und ein mittlerer Axialtemperaturgradient G_0 während des Wachsens des Abschnitts konstanten Durchmessers des Rohlings über einen Temperaturbereich von einer Verfestigung bis zu einer Temperatur von nicht weniger als 1325°C gesteuert werden, um die Bildung eines Segments des Abschnitts konstanten Durchmessers zu verursachen, der nach Köhlen des Rohlings ausgehend von der Verfestigungstemperatur einen ersten axialsymmetrischen Bereich, der sich radial nach innen ausgehend von der Umfangskante in Richtung auf die zentrale Achse erstreckt und in dem Silizium-Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im Wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, und einen zweiten axialsymmetrischen Bereich umfasst, in dem Leerstellen die vorherrschende intrinsische Punktfehlstelle sind; und (ii) das Segment des Abschnitts konstanten Durchmessers wird in Scheiben geschnitten, um den Wafer zu erhalten.

[0018] Weitere Aufgaben und Merkmale dieser Erfindung sind teilweise offensichtlich und werden teilweise im Folgenden aufgezeigt.

KURZBESCHREIBUNG DER ZEICHNUNG

[0019] **Fig. 1** ist ein Graph, der ein Beispiel dessen zeigt, wie sich die Anfangskonzentration von Eigenzwischengitteratomen $[Z]$ und Leerstellen $[L]$ mit einer Zunahme des Wertes des Verhältnisses v/G_0 ändert, wobei v die Wachstumsrate und G_0 der mittlere Axialtemperaturgradient sind.

[0020] **Fig. 2** ist ein Graph, der ein Beispiel dessen zeigt, wie ΔG_Z , die Änderung der freien Energie, die für eine gegebene Anfangskonzentration von Eigenzwischengitteratomen $[Z]$ für die Ausbildung agglomerierter Eigenzwischengitteratom-Fehlstellen erforderlich ist, steigt, während die Temperatur T fällt.

[0021] **Fig. 3** ist ein Graph, der ein Beispiel dessen zeigt, wie sich die Anfangskonzentration der Eigenzwischengitteratome $[Z]$ und der Leerstellen $[L]$ entlang des Radius eines Rohlings oder Wafers ändern kann, während der Wert des Verhältnisses v/G_0 wegen eines Steigens des Wertes G_0 fällt. Es wird angemerkt, dass an der L/Z-Grenzfläche ein Übergang von Leerstellen-dominiertem Material zu Eigenzwischengitteratom-dominiertem Material stattfindet.

[0022] **Fig. 4** ist eine Draufsicht eines Einkristall-Si-

litzium-Rohlings oder -Wafers, die Bereiche von Leerstellen-, L-, dominierten Materialien bzw. Eigenzwischengitteratom-, Z-, dominierten Materialien sowie die dazwischen vorhandene L/Z-Grenzfläche zeigt.

[0023] **Fig. 5** ist eine Längsschnittansicht eines Einkristall-Silizium-Rohlings, die im Einzelnen einen axialsymmetrischen Bereich eines Abschnitts konstanten Durchmessers des Rohlings zeigt.

[0024] **Fig. 6** ist ein Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes des Rohlings nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen erzeugt wurde, das ausführlich einen allgemein zylindrischen Bereich von Leerstellen-dominiertem Material, einen allgemein kreisförmigen axialsymmetrischen Bereich von Eigenzwischengitteratom-dominiertem Material, die zwischen ihnen vorhandene L/Z-Grenzfläche und einen Bereich agglomerierter Zwischengitteratom-Fehlstellen zeigt.

[0025] **Fig. 7** ist ein Graph der Zugrate (d. h. des Kristallkeimanhubes) als Funktion der Kristalllänge, der zeigt, wie die Zugrate über einen Längenabschnitt des Kristalls linear fällt.

[0026] **Fig. 8** ist ein wie in Beispiel 1 beschriebenes Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes des Rohlings nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen, erzeugt wurde.

[0027] **Fig. 9** ist ein wie in Beispiel 1 beschriebener Graph der Zugrate als Funktion der Kristalllänge für jeden der vier jeweils mit 1–4 bezeichneten Einkristall-Silizium-Rohlinge, die zum Liefern einer mit $v^*(Z)$ bezeichneten Kurve verwendet werden.

[0028] **Fig. 10** ist ein wie in Beispiel 2 beschriebener Graph des mittleren Axialtemperaturgradienten an der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche G_0 als Funktion der radialen Position für zwei verschiedene Fälle.

[0029] **Fig. 11** ist ein wie in Beispiel 2 beschriebener Graph der Anfangskonzentration von Leerstellen [L] oder Eigenzwischenstellen [Z] als Funktion der radialen Position für zwei verschiedene Fälle.

[0030] **Fig. 12** ist ein wie in Beispiel 3 beschriebener Graph der Temperatur als Funktion der axialen Position, der das Axialtemperaturprofil in Rohlingen für zwei verschiedene Fälle zeigt.

[0031] **Fig. 13** ist ein wie in Beispiel 3 umfassender beschriebener Graph der Eigenzwischengitteratom-Konzentrationen, die sich aus den zwei in **Fig. 12** gezeigten Abkühlbedingungen ergeben.

[0032] **Fig. 14** ist ein wie in Beispiel 4 beschriebenes Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes eines gesamten Rohlings nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen erzeugt wurde.

[0033] **Fig. 15** ist ein wie in Beispiel 5 beschriebener Graph, der die Position der L/Z-Grenzfläche als Funktion der Länge des Einkristall-Silizium-Rohlings zeigt.

[0034] **Fig. 16a** ist ein wie in Beispiel 6 beschriebe-

nes Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings erzeugt wurde, der von etwa 100 mm bis etwa 250 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen.

[0035] **Fig. 16b** ist ein wie in Beispiel 6 beschriebenes Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings erhalten wurde, der von etwa 250 mm bis etwa 400 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen.

[0036] **Fig. 17** ist ein wie in Beispiel 7 beschriebener Graph eines Axialtemperaturgradienten G_0 in verschiedenen axialen Positionen für einen Rohling.

[0037] **Fig. 18** ist ein Graph der radialen Änderungen des mittleren Axialtemperaturgradienten G_0 in verschiedenen für einen Rohling, wie er in Beispiel 7 beschrieben wurde.

[0038] **Fig. 19** ist ein wie in Beispiel 7 beschriebener Graph, der die Beziehung zwischen der Breite des axialsymmetrischen Bereiches und der Abkühlrate zeigt.

[0039] **Fig. 20** ist eine in Beispiel 7 beschriebene Photographie eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings, das von etwa 235 mm bis etwa 350 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Kupferdekoration und einem Defektdarstellungsätzen.

[0040] **Fig. 21** ist eine in Beispiel 7 beschriebene Photographie eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings, das von etwa 305 mm bis etwa 460 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Kupferdekoration und einem Defektdarstellungsätzen.

[0041] **Fig. 22** ist eine in Beispiel 7 beschriebene Photographie eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings, das von etwa 140 mm bis etwa 275 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Kupferdekoration und einem Defektdarstellungsätzen.

[0042] **Fig. 23** ist eine in Beispiel 7 beschriebene Photographie eines axialen Schnittes eines Segments eines Rohlings, das von etwa 600 mm bis etwa 730 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Kupferdekoration und einem Defektdarstellungsätzen.

[0043] **Fig. 24** ist ein Graph, der die radialen Änderungen des mittleren Axialtemperaturgradienten $G_0(r)$ von der Mitte des Rohlings bis etwa zur Hälfte des Rohlingsradius (bestimmt durch Mitteln des Gradienten von der Verfestigungstemperatur bis zu der Temperatur auf der x-Achse) zeigt, die in heißen Zonen mit verschiedenen Konfigurationen auftreten können.

[0044] **Fig. 25** ist ein Graph, der ein axiales Temperaturprofil für einen Rohling in vier verschiedenen Konfigurationen der heißen Zone zeigt.

[0045] **Fig. 26** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektana-

lyse (Defektgröße über 0,09 μm) für Einkristall-Siliziumwafer vor und nach dem thermischen Tempern zeigt.

[0046] **Fig. 27** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,09–0,11 μm) für Einkristall-Siliziumwafer vor dem thermischen Tempern zeigt.

[0047] **Fig. 28** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,09–0,11 μm) für Einkristall-Siliziumwafer nach dem thermischen Tempern zeigt.

[0048] **Fig. 29** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,11–0,13 μm) für Einkristall-Siliziumwafer vor dem thermischen Tempern zeigt.

[0049] **Fig. 30** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,11–0,13 μm) für Einkristall-Siliziumwafer nach dem thermischen Tempern zeigt.

[0050] **Fig. 31** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,13–0,15 μm) für Einkristall-Siliziumwafer vor dem thermischen Tempern zeigt.

[0051] **Fig. 32** ist ein wie in Beispiel 8 beschriebener Graph, der die Ergebnisse der Lichtstreu-Defektanalyse (Defektgröße zwischen 0,13–0,15 μm) für Einkristall-Siliziumwafer nach dem thermischen Tempern zeigt.

[0052] **Fig. 33a bis 33c** sind Graphen, die die Beziehung zwischen v/G_0 und der Breite des Leerstellenkerns in dem Einkristall-Silizium sowie die Konzentration intrinsischer Punktfehlstellen in dem Kern zeigen.

AUSFÜHRLICHE BESCHREIBUNG DER BEVORZUGTEN AUSFÜHRUNGSFORMEN

[0053] Anhand des bisherigen experimentellen Beweismaterials scheinen der Typ und die Anfangskonzentration intrinsischer Punktfehlstellen wie etwa Siliziumgitter-Leerstellen oder Silizium-Eigenzwischengitteratome in Einkristall-Siliziumwafern anfangs bestimmt zu werden, während sich der Rohling, aus dem diese Wafer erhalten werden, von der Verfestigungstemperatur (d. h. etwa 1410°C) auf eine Temperatur von mehr als 1300°C (d. h. wenigstens etwa 1325°C, wenigstens etwa 1350°C oder sogar wenigstens etwa 1375°C) abkühlt; d. h., der Typ und die Anfangskonzentration dieser Defekte werden durch das Verhältnis v/G_0 gesteuert, wobei v die Wachstumsrate und G_0 der mittlere Axialtemperaturgradient über diesen Temperaturbereich ist.

[0054] Wie nun in **Fig. 1** gezeigt ist, findet in der Nähe eines kritischen Wertes von v/G_0 , der anhand momentan verfügbarer Informationen etwa $2,1 \cdot 10^{-5}$

cm^2/sK zu betragen scheint, wobei G_0 unter den Bedingungen bestimmt wird, unter denen der Axialtemperaturgradient innerhalb des oben definierten Temperaturbereichs konstant ist, für steigende Werte von v/G_0 ein Übergang von fallendem Eigenzwischengitteratom-dominiertem Wachstum zu steigendem Leerstellen-dominiertem Wachstum statt. Bei diesem kritischen Wert sind die Konzentrationen dieser intrinsischen Punktfehlstellen im Gleichgewicht. Allerdings steigt die Konzentration von Leerstellen, während der Wert von v/G_0 den kritischen Wert übersteigt. Ähnlich steigt die Konzentration von Eigenzwischengitteratomen, während der Wert von v/G_0 unter den kritischen Wert fällt. Wenn diese Konzentrationen einen Pegel der kritischen Übersättigung in dem System erreichen und wenn die Beweglichkeit der Punktfehlstellen ausreichend hoch ist, tritt wahrscheinlich ein Reaktions- oder Agglomerationsereignis auf.

[0055] Wie an anderer Stelle berichtet wurde (siehe z. B. PCT/US98/07365 [WO-A-98/45510] und PCT/US98/07304 [WO-A-98/45508]), ist entdeckt worden, dass die Reaktionen, in denen Leerstellen in der Siliziummatrix reagieren und agglomerierte Leerstellendefekte erzeugen und in denen Eigenzwischengitteratome in der Siliziummatrix reagieren und agglomerierte Zwischengitterdefekte erzeugen, dementsprechend unterdrückt werden können. Ohne Bindung an eine besondere Theorie wird allgemein angenommen, dass diese Reaktionen unterdrückt werden können, wenn die Konzentration der Leerstellen und der Eigenzwischengitteratome während des Wachstums und Abkühlens des Kristallrohlings in der Weise gesteuert werden, dass die Änderung der freien Energie (ΔG) des Systems einen kritischen Wert, bei dem diese Agglomerationsreaktionen spontan auftreten, nie übersteigt. Mit anderen Worten, es wird angenommen, dass die Agglomeration von Leerstellen und Zwischengitteratomen, während sich der Rohling von der Erstarrungstemperatur abkühlt, dadurch vermieden werden kann, dass verhindert wird, dass das System an Leerstellen oder Zwischengitteratomen kritisch übersättigt wird.

[0056] Das Verhindern der Ausbildung solcher Defekte kann dadurch erzielt werden, dass eine (durch $v/G_0(r)$ gesteuerte, wobei $v/G_0(r)$, wie unten weiter diskutiert wird, v/G_0 als Funktion der radialen Position darstellt) Anfangskonzentration von Leerstellen oder Zwischengitteratomen hergestellt wird, die ausreichend niedrig ist, so dass nie eine kritische Übersättigung erreicht wird. In der Praxis sind solche Konzentrationen über einen gesamten Kristallradius aber schwer zu erzielen, wobei somit im Allgemeinen eine kritische Übersättigung dadurch vermieden werden kann, dass die Anfangsleerstellenkonzentration oder die Anfangs-Zwischengitteratom-Konzentration nach der Kristallverfestigung (d. h. nach der Herstellung der wie durch $v/G_0(r)$ bestimmten Anfangskonzentration) unterdrückt wird.

[0057] Wegen der verhältnismäßig großen Beweglichkeit von Eigenzwischengitteratomen (die allge-

mein etwa 10^{-4} cm²/Sekunde beträgt) und in geringem Umfang wegen der Beweglichkeit der Leerstellen kann die Unterdrückung von Zwischengitteratomen und Leerstellen über verhältnismäßig große Abstände (d. h. Abstände von etwa 5 cm bis etwa 10 cm oder mehr) durch die radiale Diffusion von Eigenzwischengitteratomen zu Senken, die sich an der Kristalloberfläche befinden, oder zu störstellendominierten Bereichen, die sich in dem Kristall befinden, beeinflusst werden. Die radiale Diffusion kann wirksam zur Unterdrückung der Konzentration von Eigenzwischengitteratomen und Leerstellen verwendet werden, wenn ausreichend Zeit für die radiale Diffusion der Anfangskonzentration der intrinsischen Punktfehlstellen gelassen wird. Im Allgemeinen hängt die Diffusionszeit von der radialen Änderung der Anfangskonzentration der Eigenzwischengitteratome und der Leerstellen ab, wobei weniger radiale Änderungen kürzere Diffusionszeiten erfordern.

[0058] Typischerweise steigt der mittlere Axialtemperaturgradient G_0 für Einkristall-Silizium, das gemäß dem Czochralski-Verfahren gewachsen wird, als Funktion einer Zunahme des Radius. Das heißt, dass der Wert von v/G_0 typischerweise über den Radius eines Rohlings nicht singular ist. Im Ergebnis dieser Änderung sind der Typ und die Anfangskonzentration intrinsischer Punktfehlstellen nicht konstant. Falls an einem gewissen Punkt entlang des Radius **4** des Rohlings der in **Fig. 3** und **4** als die L/Z-Grenzfläche **2** gezeichnete kritische Wert von v/G_0 erreicht ist, wird das Material von Leerstellen-dominiert auf Eigenzwischengitteratom-dominiert umgeschaltet. Außerdem enthält der Rohling einen axialsymmetrischen Bereich von Eigenzwischengitteratom-dominiertem Material **6** (in dem die Anfangskonzentration von Silizium-Eigenzwischengitteratomen als Funktion des Steigens des Radius steigt), das einen allgemein zylindrischen Bereich von Leerstellen-dominiertem Material **8** (in dem die Anfangskonzentration der Leerstellen als Funktion des Steigens des Radius fällt) umgibt.

[0059] Während ein Rohling, der eine L/Z-Grenzfläche enthält, von der Verfestigungstemperatur abgekühlt wird, führt die radiale Diffusion der Zwischengitteratome und der Leerstellen wegen einer Rekombination der Eigenzwischengitteratome mit den Leerstellen zu einer radial nach innen gerichteten Verschiebung der L/Z-Grenzfläche. Außerdem tritt eine radiale Diffusion von Eigenzwischengitteratomen zur Oberfläche des Kristalls auf, während sich der Kristall abkühlt. Die Oberfläche des Kristalls kann Defektkonzentrationen in der Nähe der Gleichgewichts aufrechterhalten, während sich der Kristall abkühlt. Die radiale Diffusion von Punktfehlstellen neigt dazu, die Eigenzwischengitteratom-Konzentration außerhalb der L/Z-Grenzfläche und die Leerstellenkonzentration innerhalb der L/Z-Grenzfläche zu verringern. Somit kann die Konzentration der Leerstelle und der Zwischengitteratome überall so beschaffen sein, dass ΔG_L und ΔG_Z kleiner als die kritischen Werte

sind, bei denen die Leerstellenagglomerationsreaktion und die Zwischengitteratom-Agglomerationsreaktion auftritt, wenn genug Zeit für die Diffusion gelassen wird.

[0060] Wie nun in **Fig. 5** gezeigt ist, werden die Kristallwachstumsbedingungen (einschließlich der Wachstumsrate v , des mittleren Axialtemperaturgradienten G_0 und der Abkühlrate) bevorzugt in der Weise gesteuert, dass die Ausbildung eines in Übereinstimmung mit dem Czochralski-Verfahren gewachsenen Einkristall-Silizium-Rohlings **10** bewirkt wird, der eine zentrale Achse **12**, einen Kristallkeim-Konus **14**, einen Endkonus **16** und einen Abschnitt **18** mit konstantem Durchmesser zwischen dem Kristallkeim-Konus und dem Endkonus umfasst. Der Abschnitt mit konstantem Durchmesser besitzt eine Umfangskante **20** und einen Radius **4**, der sich von der zentralen Achse **12** zu der Umfangskante **20** erstreckt. Die Kristallwachstumsbedingungen können in der Weise gesteuert werden, dass die Ausbildung (i) eines im Wesentlichen defektfreien axialsymmetrischen Bereiches aus Zwischengitteratom-dominiertem Material **6** und/oder (ii) eines allgemein zylindrischen Bereiches aus Leerstellen-dominiertem Material **8**, der auch einen im Wesentlichen defektfreien axialsymmetrischen Bereich **9** enthalten kann, bewirkt. Wie weiter unten ausführlich diskutiert wird, können die axialsymmetrischen Bereiche **6** und **9** veränderliche Breiten haben, wenn sie vorhanden sind.

[0061] Die Wachstumsrate v und der (wie zuvor definierte) mittlere Axialtemperaturgradient G_0 werden typischerweise in der Weise gesteuert, dass der Wert des Verhältnisses v/G_0 vom etwa 0,5-fachen bis zum etwa 2,5-fachen des kritischen Wertes von v/G_0 (d. h. anhand der momentan verfügbaren Informationen für den kritischen Wert von v/G_0 von etwa $1 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK bis etwa $5 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK) reicht. Bevorzugt reicht der Wert des Verhältnisses v/G_0 vom etwa 0,6-fachen bis zum etwa 1,5-fachen des kritischen Wertes von v/G_0 (d. h. anhand der momentan verfügbaren Informationen für den kritischen Wert von v/G_0 von etwa $1,3 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK bis etwa $3 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK). Am meisten bevorzugt reicht der Wert des Verhältnisses v/G_0 vom etwa 0,75-fachen bis zum etwa 1,25-fachen des kritischen Wertes von v/G_0 (d. h. anhand der momentan verfügbaren Informationen für den kritischen Wert von v/G_0 von etwa $1,6 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK bis etwa $2,1 \cdot 10^{-5}$ cm²/sK). In einer besonders bevorzugten Ausführungsform besitzt v/G_0 in dem allgemein zylindrischen Gebiet **9** einen Wert, der zwischen den kritischen Wert von v/G_0 und das 1,1-fache des kritischen Wertes von v/G_0 fällt, während v/G_0 in einer weiteren bevorzugten Ausführungsform in dem allgemein zylindrischen Gebiet **6** einen Wert hat, der zwischen das etwa 0,75-fache des kritischen Wertes von v/G_0 und den kritischen Wert von v/G_0 fällt.

[0062] Um die Breite des axialsymmetrischen Bereiches **6** und/oder **9** zu maximieren, wird der Rohling bevorzugt während einer Zeitdauer von (i) wenig-

tens 5 Stunden, bevorzugt wenigstens 10 Stunden und bevorzugter wenigstens 15 Stunden für Siliziumkristalle mit einem Nenndurchmesser von 150 mm, (ii) wenigstens 5 Stunden, bevorzugt wenigstens 10 Stunden, bevorzugter wenigstens 20 Stunden, noch bevorzugter wenigstens 25 Stunden und am bevorzugtesten wenigstens 30 Stunden für Siliziumkristalle mit einem Nenndurchmesser von 200 mm und (iii) wenigstens 20 Stunden, bevorzugt wenigstens 40 Stunden, bevorzugter wenigstens 60 Stunden und am bevorzugtesten wenigstens 75 Stunden für Siliziumkristalle mit einem Nenndurchmesser von mehr als 200 mm von der Verfestigungstemperatur auf eine Temperatur von mehr als etwa 1050°C abgekühlt. Die Steuerung der Abkühlrate kann unter Verwendung irgendwelcher momentan im Gebiet bekannter Mittel zum Minimieren der Wärmeübertragung einschließlich der Verwendung von Isolatoren, Heizgeräten, Strahlungsabschirmungen und Magnetfeldern erzielt werden.

[0063] Die Steuerung des mittleren Axialtemperaturgradienten G_0 kann durch die Konstruktion der "heißen Zone" des Kristallzüchters (d. h. des Graphits oder der anderen Materialien, aus denen das Heizgerät, die Isolation, die Wärme- und Strahlungsabschirmungen und anderes hergestellt sind) erzielt werden. Obgleich sich die Einzelheiten der Konstruktion je nach der Ausführung und dem Modell des Kristallzüchters ändern können, kann G_0 allgemein unter Verwendung irgendwelcher der Mittel, die momentan im Gebiet zum Steuern der Wärmeübertragung der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche bekannt sind, einschließlich Reflektoren, Strahlungsabschirmungen, Lichtleiter und Heizgeräte, gesteuert werden. Im Allgemeinen können radiale Änderungen von G_0 dadurch minimiert werden, dass eine solche Vorrichtung etwa einen Kristalldurchmesser über der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche positioniert wird. Ferner kann G_0 dadurch gesteuert werden, dass die Position der Vorrichtung in Bezug auf die Schmelze und auf den Kristall eingestellt wird. Dies wird entweder dadurch ausgeführt, dass die Position der Vorrichtung in der heißen Zone eingestellt wird, oder dadurch, dass die Position der Schmelzeoberfläche in der heißen Zone eingestellt wird. Wenn ein Heizgerät verwendet wird, kann G_0 außerdem ferner dadurch gesteuert werden, dass die dem Heizgerät zugefügte Leistung eingestellt wird. Während eines Stapel-Czochralski-Prozesses, in dem das Schmelzevolumen während des Prozesses entleert wird, können irgendeines oder alle dieser Verfahren verwendet werden.

[0064] Für einige Ausführungsformen des Prozesses zum Erstellen eines im Wesentlichen defektfreien Substratwafers wird es allgemein bevorzugt, dass der mittlere Axialtemperaturgradient G_0 als Funktion des Durchmessers des Rohlings verhältnismäßig konstant ist. Allerdings wird angemerkt, dass mechanische Probleme im Zusammenhang mit der Aufrechterhaltung einer konstanten Wachstumsrate zu

einem zunehmend wichtigem Faktor werden, da Verbesserungen der Konstruktion der heißen Zone ermöglichen, die Änderungen in G_0 zu minimieren. Dies liegt daran, dass der Wachstumsprozess wesentlich empfindlicher gegenüber irgendeiner Änderung der Zugrate wird, die ihrerseits die Wachstumsrate v direkt beeinflusst. Hinsichtlich der Prozesssteuerung bedeutet dies, dass Werte für G_0 bevorzugt werden, die sich über den Radius des Rohlings ändern. Wesentliche Unterschiede des Wertes von G_0 können aber zu einer großen Konzentration von Eigenzwischengitteratomen führen, die allgemein in Richtung auf die Waferkante steigt, so dass die Schwierigkeit beim Vermeiden der Ausbildung agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen steigen.

[0065] Angesichts des Vorstehenden umfasst die Steuerung von G_0 ein Gleichgewicht zwischen dem Minimieren radialer Änderungen von G_0 und der Aufrechterhaltung vorteilhafter Prozesssteuerbedingungen. Typischerweise reicht die Zugrate nach etwa einem Durchmesser der Kristalllänge somit von 0,2 mm/Minute bis 0,8 mm/Minute. Bevorzugt reicht die Zugrate von 0,25 mm/Minute bis 0,6 mm/Minute und bevorzugter von 0,3 mm/Minute bis 0,5 mm/Minute. Es wird angemerkt, dass die Zugrate sowohl vom Kristalldurchmesser als auch von der Kristallzüchterkonstruktion abhängt. Die angegebenen Bereiche sind typisch für Kristalle mit einem Durchmesser von 200 mm. Im Allgemeinen sinkt die Zugrate, während der Kristalldurchmesser steigt. Allerdings kann der Kristallzüchter so konstruiert sein, dass er Zugraten über den hier erwähnten ermöglicht. Im Ergebnis ist der Kristallzüchter am bevorzugtesten so konstruiert, dass er ermöglicht, dass die Zugrate so hoch wie möglich ist, während er immer noch die Ausbildung eines axialsymmetrischen Bereiches in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung zulässt.

[0066] Für kommerziell praktische Zwecke wird die Menge der Eigenzwischengitterdiffusion dadurch gesteuert, dass die Abkühlrate gesteuert wird, während der Rohling von der Verfestigungstemperatur (etwa 1410°C) auf die Temperatur abgekühlt wird, bei der die Silizium-Eigenzwischengitteratome unbeweglich werden. Silizium-Eigenzwischengitteratome scheinen bei Temperaturen in der Nähe der Verfestigungstemperatur des Siliziums, d. h. etwa 1410°C, außerordentlich beweglich zu sein. Diese Beweglichkeit sinkt allerdings, während die Temperatur des Einkristall-Silizium-Rohlings sinkt. Allgemein verlangsamt sich die Diffusionsrate der Eigenzwischengitteratome um einen so beträchtlichen Grad, dass sie für kommerziell praktische Zeitdauern bei Temperaturen von weniger als etwa 700°C und vielleicht bei Temperaturen so hoch wie 800°C, 900°C, 1000°C oder sogar 1050°C im Wesentlichen unbeweglich sind.

[0067] Diesbezüglich wird angemerkt, dass, obgleich sich die Temperatur, bei der eine Eigenzwischengitteratom-Agglomerationsreaktion stattfindet, theoretisch über einen breiten Bereich von Temperaturen ändern kann, dieser Bereich für herkömmli-

ches, Czochralski-gewachsenes Silizium in der Praxis verhältnismäßig schmal zu sein scheint. Dies ist eine Folge des verhältnismäßig schmalen Bereiches von Anfangs-Eigenzwischengitteratom-Konzentrationen, die in Silizium, das gemäß dem Czochralski-Verfahren gewachsen wurde, typischerweise erhalten werden. Im Allgemeinen kann eine Eigenzwischengitteratom-Agglomerationsreaktion somit, falls überhaupt, bei Temperaturen in dem Bereich von etwa 1100°C bis etwa 800°C und typischerweise bei einer Temperatur von etwa 1050°C stattfinden.

[0068] Dementsprechend reicht die Abkühlrate im Bereich der Temperaturen, in dem die Eigenzwischengitteratome beweglich zu sein scheinen und je nach der Temperatur in der heißen Zone, von etwa 0,1°C/Minute bis etwa 3°C/Minute. Bevorzugt reicht die Abkühlrate von etwa 0,1°C/Minute bis etwa 1,5°C/Minute, bevorzugter von etwa 0,1°C/Minute bis etwa 1°C/Minute und noch bevorzugter von etwa 0,1°C/Minute bis etwa 0,5°C/Minute.

[0069] Dadurch, dass die Abkühlrate des Rohlings innerhalb eines Temperaturbereichs gesteuert wird, in dem die Eigenzwischengitteratome beweglich zu sein scheinen, kann den Eigenzwischengitteratomen mehr Zeit gelassen werden, um zu Senken, die sich an der Kristalloberfläche befinden, oder zu Leerstellen-dominierten Bereichen zu diffundieren, wo sie vernichtet werden können. Die Konzentration solcher Zwischengitteratome kann somit unterdrückt werden, was bewirkt, dass das Auftreten eines Agglomerationsereignisses verhindert wird. Die Verwendung des Diffusionskoeffizienten von Zwischengitteratomen durch Steuern der Abkühlrate bewirkt ein Lockern der ansonsten strengen Anforderungen an v/G_0 , die erforderlich sein können, um einen axialsymmetrischen Bereich zu erhalten, der im Wesentlichen frei von agglomerierten Defekten ist. Mit anderen Worten, im Ergebnis der Tatsache, dass die Abkühlrate gesteuert werden kann, um den Zwischengitteratomen mehr Zeit zum Diffundieren zu geben, ist ein größerer Bereich von v/G_0 -Werten in Bezug auf den kritischen Wert akzeptabel, um einen axialsymmetrischen Bereich zu erhalten, der frei von Agglomerationsdefekten ist.

[0070] Um solche Abkühlraten über merkliche Längen des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Kristalls zu erzielen, müssen auch der Wachstumsprozess des Endkonus des Rohlings sowie die Behandlung des Rohlings, wenn das Endkonuswachstum abgeschlossen ist, betrachtet werden. Typischerweise wird die Zugrate beim Abschluss des Wachstums des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings erhöht, um die zum Ausbilden des Endkonus erforderliche konische Form zu beginnen. Allerdings führt ein solches Steigen der Zugrate dazu, dass sich das untere Segment des Abschnitts mit konstantem Durchmesser, wie oben diskutiert wurde, in dem Temperaturbereich, in dem die Zwischengitteratome ausreichend beweglich sind, schneller abkühlt. Im Ergebnis können diese Zwi-

schengitteratome nicht genug Zeit haben, um zu Senken zu diffundieren, um vernichtet zu werden; d. h., die Konzentration in diesem unteren Segment kann nicht zu einem ausreichenden Grad unterdrückt werden, wobei es zur Agglomeration von Zwischen-gitteratom-Fehlstellen kommen kann.

[0071] Um das Auftreten der Ausbildung solcher Defekte in diesem unteren Segment des Rohlings zu verhindern, besitzt der Abschnitt mit konstantem Durchmesser des Rohlings in Übereinstimmung mit dem Czochralski-Verfahren somit bevorzugt eine einheitliche thermische Historie. Eine einheitliche thermische Historie kann dadurch erzielt werden, dass der Rohling nicht nur während des Wachstums des Abschnitts mit konstantem Durchmesser, sondern auch während des Wachstums der Endzone des Kristalls und möglicherweise nach dem Wachstum des Endkonus mit einer verhältnismäßig konstanten Rate aus der Siliziumschmelze gezüchtet wird. Genauer wird, wenn das Wachstum des Endkonus begonnen wird, bevorzugt eine Zugrate für den Endkonus hergestellt, die sicherstellt, dass irgendein Segment des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings, das auf einer Temperatur von mehr als etwa 1050°C bleibt, die gleiche thermische Historie wie andere Segmente des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings erfährt, die einen axialsymmetrischen Bereich, der frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlern ist, enthalten, welcher bereits auf eine Temperatur von weniger als 1050°C abgekühlt worden sind. Eine verhältnismäßig konstante Rate kann beispielsweise dadurch erzielt werden, dass (i) die Rotationsraten des Schmelztiegels und des Kristalls während des Wachstums des Endkonus im Verhältnis zu den Schmelztiegel- und Kristallrotationsraten während des Wachstums des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Kristalls verringert werden und/oder (ii) die Leistung, die dem Heizgerät zugeführt wird, das zum Heizen der Siliziumschmelze während des Wachstums des Endkonus verwendet wird, im Verhältnis zu der Leistung, die während des Endkonuswachstums zugeführt wird, erhöht wird. Diese zusätzlichen Einstellungen der Prozessvariablen können entweder einzeln oder gemeinsam stattfinden.

[0072] Wie zuvor erwähnt wurde, gibt es einen minimalen Radius des Leerstellendominierten Bereiches, für den die Unterdrückung agglomerierter Zwischen-gitteratom-Fehlstellen erzielt werden kann. Der Wert des minimalen Radius hängt von $v/G_0(r)$ und von der Abkühlrate ab. Da sich die Konstruktionen des Kristallzüchters und der heißen Zone unterscheiden, unterscheiden sich auch die oben dargestellten Bereiche für $v/G_0(r)$, die Zugrate und die Abkühlrate. Diese Bedingungen können sich gleichfalls entlang der Länge eines wachsenden Kristalls ändern. Wie oben angemerkt wurde, wird außerdem bevorzugt die Breite des Zwischengitteratom-dominierten Bereiches, der frei von agglomerierten Zwischengitterdefekten ist, maximiert. Somit ist es wünschenswert, die Breite

dieses Bereiches entlang der Länge des wachsenden Kristalls in einem gegebenen Kristallzüchter auf einem Wert aufrechtzuerhalten, der so nah wie möglich bei der Differenz zwischen dem Kristallradius und dem minimalen Radius des störstellendominierten Bereiches liegt, ohne ihn zu übersteigen.

[0073] Das Kristallzugratenprofil, das für eine gegebene Konstruktion der heißen Zone des Kristallzüchters erforderlich ist, um die Breite des axialsymmetrischen Bereiches **6** und optional **9** zu maximieren, kann empirisch bestimmt werden. Allgemein gesagt, umfasst dieser empirische Zugang zunächst das Erhalten leicht verfügbarer Daten auf dem axialen Temperaturprofil für einen in einem besonderen Kristallzüchter gewachsenen Rohling sowie der radialen Änderungen des mittleren Axialtemperaturgradienten für einen in dem gleichen Züchter gewachsenen Rohling. Diese Daten werden gemeinsam zum Züchten eines oder mehrerer Einkristall-Silizium-Rohlinge verwendet, die daraufhin auf die Anwesenheit agglomerierter Zwischengitteratom-Fehlstellen analysiert werden. Auf diese Weise kann ein optimales Zugratenprofil bestimmt werden.

[0074] Außer durch die radialen Änderungen in v/G_0 , die sich aus einem Steigen von G_0 über den Radius des Rohlings ergeben, kann sich v/G_0 auch axial im Ergebnis einer Änderung von v oder im Ergebnis natürlicher Schwankungen von G_0 wegen des Czochralski-Prozesses ändern. Für einen Standard-Czochralski-Prozess wird v geändert, während die Wachstumsrate über den gesamten Wachstumszyklus eingestellt wird, um den Rohling auf einem konstantem Durchmesser zu halten. Diese Einstellungen oder Änderungen der Zugrate bewirken ihrerseits, dass sich v/G_0 über die Länge des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings ändert. Dementsprechend ist es somit wünschenswert, die Zugrate in der Weise zu steuern, dass die Breite des axialsymmetrischen Bereiches **6** und/oder **9** in dem Rohling maximiert wird. Allerdings können im Ergebnis Radiusänderungen des Rohlings auftreten. Um sicherzustellen, dass der sich ergebende Rohling einen konstanten Durchmesser hat, wird der Rohling somit bevorzugt mit einem Durchmesser gewachsen, der größer als der gewünschte ist. Darauf wird der Rohling Standardprozessen im Gebiet ausgesetzt, um überschüssiges Material von der Oberfläche zu entfernen, was somit sicherstellt, dass ein Rohling mit einem Abschnitt mit konstantem Durchmesser erhalten wird.

[0075] Wieder anhand von **Fig. 5** werden die Substratwafer der vorliegenden Erfindung aus einem Einkristall-Silizium-Rohling **10** geschnitten, der einen im Wesentlichen defektfreien Bereich von Zwischengitteratom-dominiertem Material **6** enthält, der außerdem einen allgemein zylindrischen Bereich **8** von Leerstellen-dominiertem Material (von dem ein Teil oder alles ebenfalls im Wesentlichen defektfrei sein kann) umgeben kann. Alternativ kann sich der Bereich **6** bis von der Mitte zur Kante erstrecken oder

kann sich der Bereich **9** von der Mitte bis zur Kante erstrecken; d. h., die Breite des im Wesentlichen defektfreien Bereiches **6** oder des Bereiches **9** kann etwa gleich der Breite des Rohlings sein.

[0076] Der axialsymmetrische Bereich **6** hat allgemein eine Breite, die, wenn sie von der Umfangskante **20** radial nach innen in Richtung auf die zentrale Achse **12** gemessen wird, in einigen Ausführungsformen wenigstens 5%, 10%, 20% und sogar 30% des Radius des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings beträgt, während sie in anderen Ausführungsformen wenigstens 40%, wenigstens 60% oder bevorzugt sogar wenigstens 80% des Radius beträgt. Außerdem besitzt der axialsymmetrische Bereich **9**, wenn er vorhanden ist, allgemein eine entlang des Radius, der von der L/Z-Grenzfläche **2** zur Achse **12** verläuft, gemessene Breite, die wenigstens 15 mm breit ist und bevorzugt wenigstens 7,5%, bevorzugter wenigstens 15%, noch bevorzugter wenigstens 25% und am bevorzugtesten wenigstens 50% des Radius des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings beträgt. In einer besonders bevorzugten Ausführungsform umfasst der axialsymmetrische Bereich **9** die Achse **12** des Rohlings, d. h., der axialsymmetrische Bereich **9** und der allgemein zylindrische Bereich **8** fallen zusammen.

[0077] Die axialsymmetrischen Bereiche **6** und **9** erstrecken sich typischerweise über eine Länge von wenigstens 20% der Länge des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings. Bevorzugt haben diese Bereiche aber Längen von wenigstens 40%, bevorzugter wenigstens 60% und noch bevorzugter wenigstens 80% der Länge des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings.

[0078] Es wird angemerkt, dass die Breite der axialsymmetrischen Bereiche **6** und **9** eine gewisse Änderung entlang der Länge der zentralen Achse **12** aufweisen kann. Für einen axialsymmetrischen Bereich **6** mit einer gegebenen Länge ist die Breite somit durch Messung des Abstands von der Umfangskante **20** des Rohlings **10** radial in Richtung zu einem Punkt bestimmt, der am weitesten von der zentralen Achse ist. Ähnlich ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches **9** durch Messung des Abstands von der L/Z-Grenzfläche **2** radial in Richtung zu einem Punkt bestimmt, der am weitesten von der zentralen Achse ist. Mit anderen Worten, die Breite für jeden Bereich wird in der Weise gemessen, dass der minimale Abstand in der gegebenen Länge des axialsymmetrischen Bereiches **6** oder **9** bestimmt wird.

[0079] Für einen Rohling mit einer L/Z-Grenzfläche, d. h. für einen Rohling, der Material enthält, das Leerstellen-dominiert ist, wird typischerweise Material mit niedrigem Sauerstoffgehalt, d. h. weniger als 13 PPMA (10^{-4} Atom-%, ASTM-Norm F-121-83), bevorzugt. Bevorzugter enthält das Einkristall-Silizium weniger als 12 PPMA Sauerstoff, noch bevorzugter weniger als 11 PPMA Sauerstoff und am bevorzugtesten weniger als 10 PPMA Sauerstoff. Ein niedriger Sauerstoffgehalt wird bevorzugt, da die Ausbildung

von sauerstoffinduzierten Stapelfehlern und -bändern mit erhöhter Sauerstoff-Clusterung gerade innerhalb der L/Z-Grenzfläche in Wafern mit mittlerem bis hohem Sauerstoffgehalt (d. h. 14 PPMA bis 18 PPMA) ausgeprägt wird. Jedes von diesen ist eine potenzielle Quelle für Probleme in einem gegebenen Prozess zur Herstellung integrierter Schaltungen.

[0080] Die Wirkungen der verstärkten Sauerstoff-Clusterung können durch eine Anzahl von Verfahren, die einzeln oder zusammen verwendet werden, weiter verringert werden. Beispielsweise werden in Silizium, das bei einer Temperatur im Bereich von etwa 350°C bis etwa 750°C getempert wird, typischerweise Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren ausgebildet. Für einige Anwendungen kann es somit bevorzugt werden, dass der Kristall ein "kurzer" Kristall ist, d. h. ein Kristall, der in einem Czochralski-Prozess gezüchtet worden ist, bis sich das Keimende von dem Schmelzpunkt des Siliziums (etwa 1410°C) auf etwa 750°C abgekühlt hat, wonach der Rohling schnell abgekühlt wird. Auf diese Weise wird die Zeit, die in dem Temperaturbereich verbracht wird, der für die Ausbildung des Keimbildungszentrums entscheidend ist, auf ein Minimum gehalten, wobei die Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren nicht genügend Zeit haben, sich in dem Kristallzüchter auszubilden.

[0081] Bevorzugt werden aber die während des Wachstums des Einkristalls ausgebildeten Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren durch Tempern der Einkristall-Siliziumwafer aufgelöst, die aus dem in Übereinstimmung mit dem vorliegenden Prozess erstellten Rohling geschnitten worden sind. Schneide- sowie Standard-Silizium-Läpp-, -Ätz- und -Poliertechniken sind beispielsweise in F. Shimura, Semiconductor Silicon Crystal Technology, Academic Press, 1989, und in Silicon Chemical Etching, (J. Grabmaier, Hrsg.), Springer-Verlag, New York, 1982, offenbart – Wenn die Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren keiner stabilisierenden Wärmebehandlung ausgesetzt worden sind, können sie durch schnelles Erwärmen des Siliziums auf eine Temperatur von wenigstens etwa 875°C und bevorzugt weiteres Erhöhen der Temperatur auf wenigstens 1000°C, wenigstens 1100°C oder mehr aus den Siliziumwafern getempert werden. Zu dem Zeitpunkt, zu dem das Silizium 1000°C erreicht, sind im Wesentlichen alle (z. B. >99%) diese Defekte ausgetempert worden. Es ist wichtig, dass die Wafer schnell auf diese Temperaturen erwärmt werden, d. h., dass die Rate des Temperaturanstiegs wenigstens etwa 10°C pro Minute und bevorzugter wenigstens etwa 50°C pro Minute beträgt. Ansonsten können einige oder alle Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren durch die Wärmebehandlung stabilisiert werden. Das Gleichgewicht scheint in verhältnismäßig kurzen Zeitdauern, d. h. in der Größenordnung von etwa 60 Sekunden oder weniger, erreicht zu sein. Dementsprechend können Sauerstoffausscheidungs-Keimbildungszentren in dem Einkristall-Silizium dadurch

aufgelöst werden, dass es während einer Zeitdauer von wenigstens etwa 5 Sekunden und bevorzugt von wenigstens etwa 10 Minuten bei einer Temperatur von wenigstens etwa 875°C, bevorzugt von wenigstens etwa 950°C und bevorzugt von wenigstens etwa 1100°C getempert wird.

[0082] Die Auflösung kann in einem herkömmlichen Ofen oder in einem thermischen Schnelltempernsystem (RTA-System) ausgeführt werden. Das thermische Schnelltempern des Silizium kann in irgendeinem einer Anzahl kommerziell verfügbarer thermischer Schnelltemperöfen ("RTA"-Öfen) ausgeführt werden, in denen die Wafer durch Bänke von Hochleistungslampen einzeln erwärmt werden. RTA-Öfen können einen Siliziumwafer schnell erwärmen, wobei sie z. B. einen Wafer in wenigen Sekunden von Zimmertemperatur auf 1200°C erwärmen können. Ein solcher kommerziell verfügbarer RTA-Ofen ist das von AG Associates (Mountain View, CA) verfügbare Ofenmodell 610. Außerdem kann die Auflösung an den Silizium-Rohlingen oder an den Siliziumwafern, bevorzugt an den Wafern, ausgeführt werden.

[0083] In einer Ausführungsform des Prozesses der vorliegenden Erfindung wird die Anfangskonzentration der Silizium-Eigenzwischengitteratome in dem axialsymmetrischen, Eigenzwischengitteratom-dominierten Bereich **6** des Rohlings **10** gesteuert. Wieder anhand von **Fig. 1** wird die Anfangskonzentration der Silizium-Eigenzwischengitteratome allgemein dadurch gesteuert, dass die Kristallwachstumsrate v und der mittlere Axialtemperaturgradient G_0 in der Weise gesteuert werden, dass der Wert des Verhältnisses v/G_0 dem kritischen Wert dieses Verhältnisses, bei dem die L/Z-Grenzfläche auftritt, verhältnismäßig nahe liegt. Außerdem kann der mittlere Axialtemperaturgradient G_0 in der Weise hergestellt werden, dass die Änderung von G_0 als Funktion des Rohlingsradius (d. h. $G_0(r)$ und somit $v/G_0(r)$) ebenfalls gesteuert wird.

[0084] In einer weiteren Ausführungsform der vorliegenden Erfindung wird V/G_0 in der Weise gesteuert, dass entlang des Radius wenigstens über einen Abschnitt der Länge des Rohlings keine L/Z-Grenzfläche vorhanden ist. In dieser Länge ist das Silizium von der Mitte bis zur Umfangskante Leerstellen-dominiert, wobei in einem axialsymmetrischen Bereich, der sich von der Umfangskante des Rohlings radial nach innen erstreckt, durch Steuern von V/G_0 agglomerierte Leerstellendefekte prinzipiell vermieden werden. Das heißt, die Wachstumsbedingungen werden in der Weise gesteuert, dass v/G_0 einen Wert hat, der zwischen den kritischen Wert von v/G_0 und das 1,1-fache des kritischen Wertes von v/G_0 fällt. Es wird angemerkt, dass Wafer, die in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung erstellt werden, zur Verwendung als Substrate geeignet sind, auf denen eine Epitaxieschicht abgelagert werden kann. Die Epitaxieablagerung kann mit Mitteln ausgeführt werden, die im Gebiet üblich sind.

[0085] Außerdem wird angemerkt, dass, wie durch

das Beispiel 8 unten gezeigt wird, Wafer, die in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung erstellt werden, zur Verwendung in Verbindung mit thermischen Temperbehandlungen in hochreinen Atmosphären von Wasserstoff, Argon, Sauerstoff oder Stickstoff sowie Mischungen davon besonders gut geeignet sind. Genauer kann ein Wafer, wenn in ihm ein Leerstellen-dominierte Bereich vorhanden ist und dieser Bereich agglomerierte Leerstellendefekte enthält, einem thermischen Tempern ausgesetzt werden; die Temperatur, die Dauer und die Atmosphäre des Temperns sind so beschaffen, dass die agglomerierten Leerstellendefekte in einer Oberflächenschicht des Wafers effektiv beseitigt oder aufgelöst werden oder ihre Größe verringert wird. Allgemein sind die Bedingungen für dieses thermische Tempern jene, die üblicherweise im Gebiet zum Auflösen solcher Defekte verwendet werden. (Siehe z. B. Fusegawa u. a., europäische Patentanmeldung 503.816 A1; S. Nadahara u. a., "Hydrogen Annealed Silicon Wafer", Solid State Phenomena, Bd. 57–58, S. 19–26 (1997); und D. Graph u. a., "High-Temperature Annealed Silicon Wafers", Electrochemical Society Proceedings, Bd. 97–22, S. 18–25 (1997).) Außerdem werden die Waferbeladungsbedingungen, der Temperaturanstieg und die Druck/Zug-Raten geeignet ausgewählt, um sicherzustellen, dass ein Schlupf und eine Durchbiegung verhindert werden.

[0086] Vor dem thermischen Tempern werden die Wafer typischerweise einem Reinigungsprozess ausgesetzt, um irgendwelche metallischen Verunreinigungen zu entfernen, die auf der Waferoberfläche oder in der Nähe der Waferoberfläche vorhanden sind, und um zu verhindern, dass diese Verunreinigungen während des Temperns in das Grundmaterial der Wafer getrieben werden. Außerdem können die Wafer wiederholt unter Verwendung einer RCA-SC-1-Reinigungslösung (siehe z. B. F. Shimura, Semiconductor Silicon Crystal Technology, Academic Press, 1989, S. 188–191 und Anhang XII) gereinigt werden, um irgendwelche vorhandenen Oberflächenoxide zu entfernen, die zu Oberflächentrübungsproblemen führen könnten, wenn sie nicht entfernt werden.

[0087] In Übereinstimmung mit dem vorliegenden Prozess werden die Wafer typischerweise während einer Dauer, die ausreichend ist, um agglomerierte Leerstellendefekte aufzulösen, die in einer Oberflächenschicht vorhanden sind, die von der Oberfläche bis in eine gewünschte Tiefe reicht, mit einer Temperatur erwärmt, wobei die Temperatur und die Dauer steigen, während die gewünschte Tiefe steigt. Genauer werden die Wafer wenigstens etwa 1 Stunde lang in einem herkömmlichen Quarzrohrföfen bei einer Temperatur von mehr als etwa 1000°C erwärmt. Bevorzugt werden die Wafer aber eine 1 Stunde lang bis etwa 4 Stunden lang auf eine Temperatur erwärmt, die von etwa 1100°C bis etwa 1300°C reicht, und bevorzugter etwa 2 bis etwa 3 Stunden lang auf eine Temperatur erwärmt, die von etwa 1200°C bis

etwa 1250°C reicht.

[0088] Es wird angemerkt, dass agglomerierte Leerstellendefekte auch unter Verwendung eines RTA-Systems aufgelöst werden können, das die Verwendung kürzerer Prozesszeiten ermöglicht. Typischerweise wird der Wafer, wenn ein solcher Prozess verwendet wird, schnell auf die Zieltemperatur erwärmt und während einer verhältnismäßig kurzen Zeitdauer bei dieser Temperatur getempert. Im Allgemeinen wird der Wafer einer Temperatur von mehr als etwa 1100°C, bevorzugt etwa 1150°C und bevorzugter etwa 1200°C, ausgesetzt. Allgemein wird der Wafer wenigstens eine Sekunde lang, typischerweise wenigstens mehrere Sekunden (z. B. 2, 6, 10 oder mehr) lang und je nach den gewünschten Eigenschaften des Wafers während einer Zeitdauer, die bis zu etwa 60 Sekunden reichen kann (was nahe der Grenze kommerziell verfügbarer thermischer Schnelltemperer liegt), auf dieser Temperatur gehalten.

[0089] Außerdem wird angemerkt, dass bevorzugt hochreine Quarz- oder Siliziumcarbid-Ofenkomponenten wie etwa Rohre und Wannen verwendet werden, um die Einführung von Verunreinigungen während des thermischen Temperns zu vermeiden.

[0090] Außer der Temperatur, der Dauer, der Atmosphäre und den Anstiegsbedingungen (d. h. der Rate, mit der die Ziel-Tempertemperatur erreicht wird) des thermischen Temperns ist die Größe der aufzulösenden agglomerierten Defekte ein Faktor bei der Wirksamkeit des Temperns beim Entfernen solcher Defekte. Dementsprechend können die Bedingungen, die erforderlich sind, um das gewünschte Ergebnis zu erzielen, empirisch dadurch bestimmt werden, dass die Behandlungstemperatur, die Zeitdauer und die Atmosphärenzusammensetzung für eine Anzahl von Proben empirisch geändert werden, bis eine Schicht der gewünschten Tiefe erzielt wird. Die gewünschte Tiefe der Oberflächenschicht, gemessen von der Oberfläche in Richtung der Mittel- oder Zentralebene des Wafers, kann von wenigen Mikrometern (d. h. 1, 2, 4, 6, 8, 10 µm) bis zu mehreren zehn Mikrometern (d. h. 20, 40, 80 µm oder mehr) bis zu Hunderten von Mikrometern (100, 200, 300 µm oder mehr) bis zur Mitte des Wafers reichen.

[0091] Wie in Beispiel 8 unten weiter diskutiert wird, führt der Umstand, dass ein Wafer dieser Defektauflösungsbehandlung ausgesetzt wird, zu einer wesentlichen Verringerung der Anzahl dichte agglomerierter Leerstellendefekte, die in der Oberflächenschicht im Vergleich zu der Grundmaterialschicht (d. h. der Schicht, die sich von der Oberflächenschicht zur Mitte oder zur zentralen Ebene des Wafers erstreckt) vorhanden sind. Genauer kann die Anzahl dichte dieser Defekte in dieser Oberflächenschicht im Vergleich zum Grundmaterial des Wafers um etwa 20%, 40%, 60%, 80% oder mehr gesenkt werden. Bevorzugt wird diese Oberflächenschicht aber im Wesentlichen von agglomerierten Leerstellendefekten befreit.

[0092] Außerdem wird angemerkt, dass die Größe der agglomerierten Leerstellendefekte, die in der Oberflächenschicht vorhanden sind, ebenfalls wesentlich verringert werden kann. Weiter wird angemerkt, dass die Anfangsgröße dieser Defekte die Ergebnisse des vorliegenden Prozesses beeinflussen kann, da kleinere Agglomerate

[0093] Text fehlt

[0094] leichter verringert werden kann. Allgemein gesagt, sinkt die Größe der agglomerierten Defekte, während die Breite des Leerstellen-dominierten Bereiches, der solche Defekte enthält, sinkt. Dementsprechend wird die Breite des Störstellenbereichs für einige Ausführungsformen bevorzugt minimiert, um die effizientere Auflösung solcher agglomerierten Defekte zu ermöglichen, wenn sie vorhanden sind.

[0095] Im Vergleich zu herkömmlichen Schnellzüchtungsverfahren, bei denen der Rohling in einem Versuch, das Material vollständig Leerstellen-dominiert zu machen, mit einer hohen Rate gewachsen wird, kann der Prozess der vorliegenden Erfindung besonders bevorzugt sein, während der Durchmesser des Einkristall-Silizium-Rohlings steigt. Ohne sich an eine besondere Theorie zu halten, wird allgemein angenommen, dass es für Rohlinge mit verhältnismäßig großen Durchmessern (z. B. wenigstens etwa 300 mm oder mehr) unmöglich sein kann, eine Wachstumsrate aufrechtzuerhalten, die ausreichend hoch ist, um sicherzustellen, dass das Siliziummaterial vollständig Leerstellen-dominiert ist. Mit anderen Worten, während der Durchmesser des Rohlings steigt, ist es wahrscheinlicher, dass der Abschnitt mit konstantem Durchmesser des Rohlings ein Segment mit einem Bereich von Zwischengitteratom-dominiertem Material enthält. Somit müssen die Wachstumsbedingungen geeignet gesteuert werden, um die Ausbildung von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen in diesem Bereich zu verhindern.

Visuelle Erfassung agglomerierter Defekte

[0096] Agglomerierte Defekte können durch eine Anzahl verschiedener Techniken erfasst werden. Beispielsweise werden Flussbilddefekte oder D-Defekte typischerweise dadurch erfasst, dass die Einkristall-Siliziumprobe bevorzugt etwa 30 Minuten in einer Secco-Ätzlösung geätzt und daraufhin der mikroskopischen Untersuchung ausgesetzt wird. (Siehe z. B. H. Yamagishi u. a., Semicond. Sci. Technol. 7, A135 (1992).) Obgleich dieser Prozess der Standard für die Erfassung agglomerierter Leerstellendefekte ist, kann er auch zur Erfassung agglomerierter Zwischengitteratom-Fehlstellen verwendet werden. Wenn diese Technik verwendet wird, erscheinen solche Defekte, wenn sie vorhanden sind, als große Vertiefungen auf der Oberfläche der Probe.

[0097] Agglomerierte Defekte können außerdem unter Verwendung von Laserstreutechniken wie etwa der Laserstreutomographie, die typischerweise eine niedrigere Defektdichte-Erfassungsgrenze als ande-

re Ätztechniken haben, erfasst werden.

[0098] Außerdem können agglomerierte intrinsische Punktfehlstellen visuell dadurch erfasst werden, dass diese Effekte mit einem Metall dekoriert werden, das bei der Anwendung von Wärme in die Einkristall-Siliziummatrix diffundieren kann. Genauer können Einkristall-Siliziumproben wie etwa Wafer, Blöcke oder Platten visuell dadurch auf die Anwesenheit solcher Defekte untersucht werden, dass zunächst eine Oberfläche der Probe mit einer Verbindung, die ein Metall enthält, das diese Defekte dekorieren kann, wie etwa mit einer konzentrierten Lösung von Kupfernitrat beschichtet wird. Daraufhin wird die beschichtete Probe etwa 5 Minuten lang bis etwa 15 Minuten lang auf eine Temperatur zwischen etwa 900°C und etwa 1000°C erwärmt, um das Metall in die Probe zu diffundieren. Daraufhin wird die wärmebehandelte Probe auf Zimmertemperatur abgekühlt, was somit bewirkt, dass das Metall an den Stellen in der Probenmatrix, an denen Defekte vorhanden sind, kritisch übersättigt und ausgeschieden wird.

[0099] Nach dem Abkühlen wird die Probe zunächst etwa acht bis etwa zwölf Minuten dadurch, dass sie mit einer hellen Ätzlösung behandelt wird, etwa 8 bis etwa 12 Minuten lang einem Nicht-defektdarstellenden Ätzen ausgesetzt, um Oberflächenreste und -ausscheidungen zu entfernen. Eine typische helle Ätzlösung umfasst etwa 55 Prozent Salpetersäure (70 Gew.-% der Lösung), etwa 20 Prozent Flusssäure (49 Gew.-% der Lösung) und etwa 25 Prozent Salzsäure (konzentrierte Lösung).

[0100] Daraufhin wird die Probe mit entionisiertem Wasser gespült und dadurch, dass sie in eine Secco- oder Wright-Ätzlösung getaucht oder mit ihr behandelt wird, etwa 35 bis etwa 55 Minuten lang einem zweiten Ätzschritt ausgesetzt. Typischerweise wird die Probe unter Verwendung einer Secco-Ätzlösung geätzt, die etwa ein Verhältnis von 1 : 2 von 0,15 M Kaliumdichromat und Flusssäure (49 Gew.-% der Lösung) enthält. Dieser Ätzschritt bewirkt das Offenbaren oder Darstellen agglomerierter Defekte, die vorhanden sein können.

[0101] Im Allgemeinen können durch die obenbeschriebene Kupferdekorationstechnik Bereiche von Zwischengitteratom-dominiertem Material und von Leerstellendominiertem Material, die frei von agglomerierten Defekten sind, voneinander und von Material, das agglomerierte Defekte enthält, unterschieden werden. Bereiche aus defektfreiem Zwischengitteratom-dominiertem Material enthalten keine dekorierten Merkmale, die durch das Ätzen offenbart werden, während Bereiche von defektfreiem Leerstellen-dominiertem Material (vor einer wie obenbeschriebenen Hochtemperatur-Sauerstoffkeim-Auflösungsbehandlung) wegen der Kupferdekoration der Sauerstoffkeime kleine Ätzvertiefungen enthalten.

Definitionen

[0102] Die folgenden Wendungen oder Begriffe sol-

len so, wie sie hier verwendet werden, die folgenden Bedeutungen haben: "agglomerierte intrinsische Punktfehlstellen" bedeuten Defekte, die verursacht werden: (i) durch die Reaktion, in der Leerstellen agglomerieren und D-Defekte, Flussbilddefekte, Gate-Oxid-Integritätsdefekte, durch den Kristall erzeugte Partikeldefekte, durch den Kristall erzeugte Lichtpunktfehlstellen und andere solche leerstellenbezogene Defekte erzeugen, oder (ii) durch die Reaktion, in der Eigenzwischengitteratome agglomerieren und Versetzungsschleifen und -netze und andere solche Eigenzwischengitteratombezogene Defekte erzeugen; "agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen" soll agglomerierte intrinsische Punktfehlstellen bedeuten, die durch die Reaktion verursacht werden, in der Silizium-Eigenzwischengitteratome agglomerieren; "agglomerierte Leerstellendefekte" soll agglomerierte Leerstellenpunktfehlstellen bedeuten, die durch die Reaktion verursacht werden, in der Kristallgitter-Leerstellen agglomerieren; "Radius" bedeutet den Abstand, gemessen von einer zentralen Achse zu einer Umfangskante eines Wafers oder Rohlings; "im Wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen" bedeutet eine Konzentration agglomerierter Defekte, die kleiner als die Erfassungsgrenze dieser Defekte ist, die momentan etwa 10^3 Defekte/cm³ beträgt; "L/Z-Grenzfläche" bedeutet die Position entlang des Radius eines Rohlings oder Wafers, an der sich das Material von Leerstellen-dominiert zu Zwischengitteratom-dominiert ändert; und "Leerstellen-dominiert" und "Zwischengitteratom-dominiert" bedeutet Material, in dem die intrinsischen Punktfehlstellen vorrangig Leerstellen bzw. Eigenzwischengitteratome sind.

Beispiele

[0103] Die Beispiele 1 bis 7 zeigen die Erstellung eines Einkristall-Silizium-Rohlings, aus dem ein Wafer erhalten werden kann, wobei das Kristallsägen für das thermische Ausheilen in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung geeignet ist; d. h., diese Beispiele zeigen, dass ein Einkristall-Siliziumwafer mit einem im Wesentlichen defektfreien axialsymmetrischen Bereich von Zwischengitteratom-dominiertem Material erstellt werden kann, der einen Kern von Leerstellen-dominiertem Material umgibt. Beispiel 8 zeigt die Wirkung, die das thermische Tempern auf agglomerierte Leerstellendefekte hat, die im Kern eines solchen Wafers vorhanden sind.

[0104] In Bezug auf die Beispiele 1 bis 7 wird angemerkt, dass diese Beispiele einen Satz von Bedingungen darstellen, die zum Erzielen des gewünschten Ergebnisses verwendet werden können. Für einen gegebenen Kristallzüchter gibt es alternative Zugänge zur Bestimmung eines optimalen Zugratenprofils. Anstatt eine Reihe von Rohlingen mit verschiedenen Zugraten zu wachsen, könnte beispielsweise ein Einkristall mit verschiedenen Zugraten gewachsen werden, die entlang der Länge des Kristalls

steigen und sinken; in diesem Zugang würde bewirkt, dass während des Wachstums eines Einkristalls mehrmals agglomerierte Eigenzwischengitteratom-Fehlstellen erscheinen und verschwinden. Daraufhin könnten für eine Anzahl verschiedener Kristallpositionen optimale Zugraten bestimmt werden. [0105] Sämtliche Beispiele werden lediglich für Erläuterungszwecke dargestellt und sollten somit nicht in einem beschränkenden Sinn ausgelegt werden.

Beispiel 1

Optimierungsprozedur für einen Kristallzüchter mit einer zuvor vorhandenen Konstruktion der heißen Zone

[0106] Ein erster 200 mm-Einkristall-Silizium-Rohling wurde unter Bedingungen gewachsen, unter denen die Zugrate über die Länge des Kristalls von etwa 0,75 mm/Min. bis etwa 0,35 mm/Min. linear anstieg. **Fig. 7** zeigt die Zugrate als Funktion der Kristall-Länge. Unter Berücksichtigung des zuvor hergestellten Axialtemperaturprofils eines wachsenden 200 mm-Rohlings in dem Kristallzüchter und der zuvor hergestellten radialen Änderungen des mittleren Axialtemperaturgradienten G_0 , d. h. des Axialtemperaturgradienten an der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche, wurden diese Zugraten in der Weise ausgewählt, dass sichergestellt ist, dass der Rohling von der Mitte bis zur Kante an einem Ende des Rohlings Leerstellendominiertes Material ist, während er von der Mitte bis zur Kante des anderen Endes des Rohlings Zwischengitteratom-dominiertes Material ist. Der gewachsene Rohling wurde in Längsrichtung geschnitten und analysiert, um zu bestimmen, wo die Ausbildung der agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen beginnt.

[0107] **Fig. 8** ist ein Bild, das durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträger-Lebensdauer eines axialen Schnittes des Rohlings über einen Schnitt, der von etwa 635 mm bis etwa 760 mm vom Absatz des Rohlings reicht, nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen, die die Defektverteilungsmuster offenlegen, erzeugt wurde. An einer Kristallposition von etwa 680 mm ist ein Band agglomerierter Zwischengitteratom-Fehlstellen 28 zu sehen. Diese Position entspricht einer kritischen Zugrate von $v^*(680 \text{ mm}) = 0,33 \text{ mm/Min.}$ An diesem Punkt ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches 6 (eines Bereiches, welcher Zwischengitteratom-dominiertes Material ist, in dem aber keine agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen vorhanden sind) an ihrem Maximum; die Breite des Leerstellen-dominierten Bereiches 8 $R_{LH}^*(680)$ beträgt etwa 35 mm und die Breite des axialsymmetrischen Bereiches $R_z^*(680)$ etwa 65 mm.

[0108] Daraufhin wurden eine Reihe von vier Einkristall-Silizium-Rohlingen bei stationären Zugraten gewachsen, die etwas größer und etwas kleiner als die Zugrate waren, bei der die maximale Breite des

axialsymmetrischen Bereiches des ersten 200 mm-Rohlings erhalten wurde. **Fig. 9** zeigt für jeden der vier jeweils als 1–4 bezeichneten Kristalle die Zugrate als Funktion der Kristalllänge. Diese vier Kristalle wurden daraufhin analysiert, um die axiale Position (und die entsprechende Zugrate) zu bestimmen, bei der agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen erstmals erscheinen oder verschwinden. Diese vier (mit "*" gekennzeichneten) empirisch bestimmten Punkte sind in **Fig. 9** gezeigt. Die Interpolation zwischen diesen Punkten und die Extrapolation von diesen Punkten lieferten eine Kurve, die in **Fig. 9** mit $v^*(Z)$ bezeichnet ist. Diese Kurve repräsentiert in einer ersten Näherung die Zugrate für 200 mm-Kristalle als Funktion der Länge in dem Kristallzüchter, bei der der axialsymmetrische Bereich seine maximale Breite hat.

[0109] Das Wachstum zusätzlicher Kristalle mit anderen Zugraten und die weitere Analyse dieser Kristalle würden die empirische Definition von $v^*(Z)$ weiter verfeinern.

Beispiel 2

Verringerung der radialen Änderung von $G_0(r)$

[0110] Die **Fig. 10** und **11** zeigen die Verbesserung der Qualität, die durch eine Verringerung der radialen Änderung des Axialtemperaturgradienten bei der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche $G_0(r)$ erzielt werden kann. Die Anfangskonzentration (etwa 1 cm von der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche) der Leerstellen und Zwischengitteratome wird für zwei Fälle mit verschiedenen $G_0(r)$ berechnet: (1) $G_0(r) = 2,65 + 5 \cdot 10^{-4}r^2$ (K/mm) und (2) $G_0(r) = 2,65 + 5 \cdot 10^{-5}r^2$ (K/mm). Die Zugrate wurde für jeden Fall in der Weise eingestellt, dass die Grenzfläche zwischen dem Leerstellen-reichen Silizium und dem Zwischengitteratom-reichen Silizium bei einem Radius von 3 cm liegt. Die für den Fall 1 und 2 verwendeten Zugraten betrugen 0,4 bzw. 0,35 mm/Min. Aus **Fig. 11** ist klar, dass die Anfangskonzentration der Zwischengitteratome in dem Zwischengitteratom-reichen Abschnitt des Kristalls drastisch verringert wird, während die radiale Änderung des Anfangsaxialtemperaturgradienten verringert wird. Dies führt dies zu einer Verbesserung der Qualität des Materials, da es leichter wird, die Ausbildung von Zwischengitteratom-Fehlstellen-Clustern wegen der Übersättigung der Zwischengitteratome zu vermeiden.

Beispiel 3

Erhöhte Ausdiffusionszeit für Zwischengitteratome

[0111] Die **Fig. 12** und **13** zeigen die Verbesserung der Qualität, die durch Erhöhen der Zeit für die Ausdiffusion der Zwischengitteratome erzielt werden kann. Die Konzentration der Zwischengitteratome wird für zwei Fälle mit verschiedenen Axialtempera-

turprofilen in dem Kristall, dT/dz , berechnet. Der Axialtemperaturgradient einer Schmelze/Festkörper-Grenzfläche ist für beide Fälle der gleiche, so dass die Anfangskonzentration (etwa 1 cm von der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche) der Zwischengitteratome für beide Fälle die gleiche ist. Die Zugrate wurde in diesem Beispiel in der Weise eingestellt, dass der gesamte Kristall Zwischengitteratomreich ist. Die Zugrate war für beide Fälle die gleiche, 0,32 mm/Min. Die längere Zeitdauer für die Ausdiffusion der Zwischengitteratome im Fall 2 führt zu einer Gesamtverringerung der Zwischengitteratom-Konzentration. Dies führt zu einer Verbesserung der Qualität des Materials, da es leichter wird, die Ausbildung von Zwischengitteratom-Fehlstellen-Clustern wegen der Übersättigung der Zwischengitteratome zu vermeiden.

Beispiel 4

[0112] Es wurde ein 700 mm langer Kristall mit einem Durchmesser von 150 mm mit einer veränderlichen Zugrate gewachsen. Die Zugrate änderte sich nahezu linear von etwa 1,2 mm/Min am Absatz auf etwa 0,4 mm/Min bei 430 mm vom Absatz und daraufhin nahezu linear zurück auf etwa 0,65 mm/Min bei etwa 700 mm vom Absatz. Unter diesen Bedingungen wird in diesem besonderen Kristallzüchter der gesamte Radius über die Länge des Kristalls, die von etwa 320 mm bis etwa 525 mm vom Absatz des Kristalls reicht, unter Zwischengitteratom-reichen Bedingungen gewachsen. Wie in **Fig. 14** gezeigt ist, ist der Kristall bei einer axialen Position von etwa 525 mm und bei einer Zugrate von etwa 0,47 mm/Min über den gesamten Durchmesser frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen. Mit anderen Worten, es gibt einen kleinen Bereich des Kristalls, in dem die Breite des axialsymmetrischen Bereiches, d. h. des Bereiches, der im Wesentlichen frei von agglomerierten Defekten ist, gleich dem Radius des Rohlings ist.

BEISPIEL 5

[0113] Wie in **Fig. 1** beschrieben wurde, wurden eine Reihe von Einkristall-Silizium-Rohlingen bei verschiedenen Zugraten gewachsen und daraufhin analysiert, um die axiale Position (und die entsprechende Zugrate) zu bestimmen, bei der die agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen zuerst erschienen oder verschwanden. Die Interpolation zwischen diesen Punkten und die Extrapolation von diesen Punkten, die auf einem Graphen der Zugrate als Funktion der axialen Position graphisch dargestellt sind, lieferte eine Kurve, die in erster Näherung die Zugrate für einen 200 mm-Kristall als Funktion der Länge in dem Kristallzüchter lieferte, bei der der axialsymmetrische Bereich seine maximale Breite hat. Daraufhin wurden zusätzliche Kristalle mit anderen Zugraten gewachsen, wobei eine weitere Analyse dieser Kristalle ver-

wendet wurde, um dieses empirisch bestimmte optimale Zugratenprofil zu verfeinern.

[0114] Unter Verwendung dieser Daten und diesem optimalen Zugratenprofil folgend, wurde ein Kristall mit einer Länge von etwa 1000 mm und mit einem Durchmesser von etwa 200 mm gewachsen. Daraufhin wurden unter Verwendung von Sauerstoffausscheidungsverfahren, die ein Standard im Gebiet sind, die von unterschiedlichen axialen Positionen erhaltenen Schnitte des gewachsenen Kristalls analysiert, um (i) zu bestimmen, ob agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen ausgebildet wurden, und (ii) die Position der L/Z-Grenzfläche als Funktion des Radius des Schnittes zu bestimmen. Auf diese Weise wurden die Anwesenheit eines axialsymmetrischen Bereiches sowie die Breite dieses Bereiches als Funktion der Kristalllänge oder -position bestimmt.

[0115] Die Ergebnisse, die für axiale Positionen erhalten wurden, die von etwa 200 mm bis etwa 950 mm vom Absatz des Rohlings reichen, sind in dem Graphen aus **Fig. 15** vorhanden. Diese Ergebnisse zeigen, dass ein Zugratenprofil für das Wachstum eines Einkristall-Silizium-Rohlings in der Weise bestimmt werden kann, dass der Abschnitt mit konstantem Durchmesser des Rohlings einen axialsymmetrischen Bereich mit einer Breite, gemessen von der Umfangskante radial in Richtung der zentralen Achse des Rohlings, enthalten kann, die wenigstens etwa 40% der Länge des Radius des Abschnitts mit konstantem Durchmesser ist. Außerdem zeigen diese Ergebnisse, dass dieser axialsymmetrische Bereich eine Länge, gemessen entlang der zentralen Achse des Rohlings, haben kann, die etwa 75% der Länge des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings beträgt.

Beispiel 6

[0116] Ein Einkristall-Silizium-Rohling mit einer Länge von etwa 1100 mm und einem Durchmesser von etwa 150 mm wurde mit einer sinkenden Zugrate gewachsen. Die Zugrate am Absatz des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings betrug etwa 1 mm/Min. Die Zugrate sank exponentiell auf etwa 0,4 mm/Min., was einer axialen Position von etwa 200 mm vom Absatz entsprach. Daraufhin sank die Zugrate linear, bis in der Nähe des Endes des Abschnitts mit konstantem Durchmesser des Rohlings eine Rate von etwa 0,3 mm/Min erreicht war.

[0117] Unter diesen Prozessbedingungen in dieser besonderen Konfiguration der heißen Zone enthält der resultierende Rohling einen Bereich, in dem der axialsymmetrische Bereich eine Breite hat, die etwa gleich dem Radius des Rohlings ist. Wie nun in den **Fig. 16a** und **16b** gezeigt ist, die Bilder sind, die durch eine Abtastung der Minoritätsladungsträgerlebensdauer eines axialen Schnittes eines Abschnitts des Rohlings nach einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen erzeugt wurden, sind aufeinander folgende Segmente des Rohlings

vorhanden, deren axiale Position von etwa 100 mm bis etwa 250 mm und von etwa 250 mm bis etwa 400 mm reicht. Aus diesen Figuren ist zu sehen, dass in dem Rohling ein Bereich vorhanden ist, dessen axiale Position von etwa 170 mm bis etwa 290 mm vom Absatz reicht, der über den gesamten Durchmesser frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist. Mit anderen Worten, in dem Rohling ist ein Bereich vorhanden, in dem die Breite des axialsymmetrischen Bereiches, d. h. des Bereiches, der im Wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, etwa gleich dem Radius des Rohlings ist.

[0118] Außerdem gibt es in einem Bereich, der von einer axialen Position von etwa 125 mm bis etwa 170 mm und von etwa 290 mm bis mehr als 400 mm reicht, axialsymmetrische Bereiche von Zwischengitteratom-dominiertem Material, die frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen sind, wobei sie einen allgemein zylindrischen Kern von Leerstellen-dominiertem Material umgeben, das ebenfalls frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist.

[0119] Schließlich gibt es in einem Bereich, der von einer axialen Position von etwa 100 mm bis etwa 125 mm reicht, einen axialsymmetrischen Bereich von Zwischengitteratom-dominiertem Material, der frei von agglomerierten Defekten ist, wobei er einen allgemein zylindrischen Kern von Leerstellen-dominiertem Material umgibt. In dem Leerstellen-dominierten Material gibt es einen axialsymmetrischen Bereich, der frei von agglomerierten Defekten ist, der einen Kern umgibt, der agglomerierte Leerstellendefekte umgibt.

Beispiel 7

Abkühlrate und Position der L/Z-Grenzfläche

[0120] In Übereinstimmung mit dem Czochralski-Verfahren wurden unter Verwendung verschiedener Konfigurationen der heißen Zone, die durch im Gebiet übliche Mittel konstruiert wurden, die die Ruhezeit des Siliziums bei Temperaturen von mehr als etwa 1050°C beeinflussten, eine Reihe von Einkristall-Silizium-Rohlingen (Nenndurchmesser 150 mm und 200 mm) gewachsen. In einem Versuch, einen Übergang von einem Bereich agglomerierter Leerstellen-Punktfehlstellen zu einem Bereich agglomerierter Zwischengitteratom-Punktfehlstellen zu erzeugen, wurde das Zugratenprofil für jeden Rohling entlang der Länge des Rohlings geändert.

[0121] Nachdem die Rohlinge gewachsen wurden, wurden sie in Längsrichtung entlang der parallel zur Wachstumsrichtung verlaufenden zentralen Achse geschnitten und daraufhin weiter in Schnitte unterteilt, die jeweils eine Dicke von etwa 2 mm hatten. Unter Verwendung der zuvor beschriebenen Kupferdekorationstechnik wurden daraufhin eine Menge dieser Längsschnitte erwärmt und absichtlich mit Kupfer verunreinigt, wobei die Erwärmungsbedin-

gungen für die Auflösung einer hohen Konzentration von Kupfergitterzwischenatomen geeignet waren. Nach dieser Wärmebehandlung wurden die Proben daraufhin schnell abgekühlt, wobei die Kupferstörstellen während dieser Zeit entweder ausdiffundierten oder sich an Stellen ausschieden, an denen Oxidcluster oder agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen vorhanden waren. Nach einem Standard-Defektkennzeichnungs-Ätzen wurden die Proben visuell auf das Vorhandensein ausgeschiedener Störstellen untersucht; jene Bereiche, die frei von solchen ausgeschiedenen Störstellen waren, entsprachen Bereichen, die frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen waren.

[0122] Eine weitere Menge von Längsschnitten wurden vor der Ladungsträgerlebensdauerabbildung einer Reihe von Sauerstoffausscheidungs-Wärmebehandlungen ausgesetzt, um die Keimbildung und das Wachstum neuer Oxidcluster zu bewirken. Um die Form der momentanen Schmelze/Festkörper-Grenzfläche an verschiedenen axialen Positionen in jedem Rohling zu bestimmen und zu messen, wurden Kontrastbänder in der Lebensdauerabbildung verwendet. Wie weiter unten diskutiert wird, wurden daraufhin Informationen über die Form der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche verwendet, um den Absolutwert und die radiale Änderung des mittleren Axialtemperaturgradienten G_0 zu schätzen. Diese Informationen wurden außerdem in Verbindung mit der Zugrate verwendet, um die radiale Änderung von v/G_0 zu schätzen.

[0123] Um die Wirkung, die die Züchtungsbedingungen auf die sich ergebende Qualität eines Einkristall-Silizium-Rohlings haben, genauer zu untersuchen, wurden mehrere Annahmen gemacht, von denen anhand der bisher verfügbaren experimentellen Beweisführung angenommen wird, dass sie gerechtfertigt sind. Um die Behandlung der thermischen Historie hinsichtlich der Zeit, die das Abkühlen auf eine Temperatur dauert, bei der die Agglomeration von Zwischengitteratom-Fehlstellen stattfindet, zu vereinfachen, wurde zunächst angenommen, dass etwa 1050°C eine sinnvolle Näherung für die Temperatur ist, bei der die Agglomeration von Silizium-Eigenzwischengitteratomen stattfindet. Diese Temperatur scheint mit Änderungen der agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen-Dichte zusammenzufallen, die während Experimenten beobachtet wurden, in denen verschiedene Abkühlraten verwendet wurden. Obgleich, ob die Agglomeration stattfindet, wie oben angemerkt wurde, auch ein Faktor der Konzentration von Zwischengitteratomen ist, wird angenommen, dass die Agglomeration bei Temperaturen von über etwa 1050°C nicht stattfindet, da es ausgehend von dem Bereich der Zwischengitteratom-Konzentrationen, der typisch für Czochralski-Wachstumsprozesse ist, sinnvoll ist anzunehmen, dass das System oberhalb dieser Temperatur nicht mit Zwischengitteratomen kritisch übersättigt wird. Mit anderen Worten, für Konzentrationen von Zwischengitteratomen,

die typisch für Czochralski-Wachstumsprozesse sind, ist es sinnvoll anzunehmen, dass das System nicht kritisch übersättigt wird, so dass oberhalb einer Temperatur von etwa 1050°C kein Agglomerationsereignis stattfindet.

[0124] Die zweite Annahme, die gemacht wurde, um die Wirkung der Wachstumsbedingungen auf die Qualität von Einkristall-Silizium zu parametrisieren, ist die, dass die Temperaturabhängigkeit des Silizium-Eigenzwischengitteratom-Diffusionskoeffizienten vernachlässigbar ist. Mit anderen Worten, es wird angenommen, dass die Eigenzwischengitteratome bei allen Temperaturen zwischen etwa 1400°C und etwa 1050°C mit der gleichen Rate diffundieren. Unter der Annahme, dass etwa 1050°C als sinnvolle Näherung für die Temperatur der Agglomeration betrachtet wird, ist der wesentliche Punkt dieser Annahme, dass die Einzelheiten der Abkühlkurve von dem Schmelzpunkt ohne Bedeutung sind. Der Diffusionsabstand hängt lediglich von der Gesamtzeit ab, die das Abkühlen von dem Schmelzpunkt auf etwa 1050°C dauert.

[0125] Unter Verwendung der Axialtemperaturprofilen für jede Konstruktion der heißen Zone und des tatsächlichen Zugratenprofils für einen besonderen Rohling kann die Gesamtabkühlzeit von etwa 1400°C auf etwa 1050°C berechnet werden. Es wird angemerkt, dass die Rate, mit der sich die Temperatur für jede der heißen Zonen ändert, recht gleichförmig ist. Diese Gleichförmigkeit bedeutet, dass irgendein Fehler bei der Auswahl einer Keimbildungstemperatur für agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen, d. h. von etwa 1050°C, wahrscheinlich lediglich zu skalierten Fehlern in der berechneten Abkühlzeit führt.

[0126] Um die radiale Ausdehnung des Leerstellen-dominierten Bereiches des Rohlings ($R_{\text{Leerstelle}}$) oder alternativ die Breite des axialsymmetrischen Bereiches zu bestimmen, wurde weiter angenommen, dass der Radius des wie durch die Lebensdauerabbildung bestimmten Leerstellen-dominierten Kerns gleichwertig dem Verfestigungspunkt ist, wo $v/G_0 = v/G_0$ kritisch ist. Mit anderen Worten, es wurde allgemein angenommen, dass die Breite des axialsymmetrischen Bereiches nach dem Abkühlen auf Zimmertemperatur auf der Position der L/Z-Grenzfläche beruht. Darauf wird hingewiesen, da wie oben erwähnt eine Rekombination von Leerstellen und Silizium-Eigenzwischengitteratomen stattfinden kann, während sich der Rohling abkühlt. Wenn eine Rekombination stattfindet, verschiebt sich die tatsächliche Position der L/Z-Grenzfläche in Richtung der zentralen Achse des Rohlings nach innen. Es ist diese Endposition, auf die hier Bezug genommen wird.

[0127] Zur Vereinfachung der Berechnung von G_0 , dem mittleren Axialtemperaturgradienten in dem Kristall zum Zeitpunkt der Verfestigung, wurde angenommen, dass die Form der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche die Schmelzpunktisotherme ist. Die Kristalloberflächentemperaturen wurden unter Verwendung von Endliche-Elemente-Modellierungs-

techniken (FEA-Techniken) und der Einzelheiten der Konstruktion der heißen Zone berechnet. Das gesamte Temperaturfeld in dem Kristall und somit G_0 wurden durch Lösen der Laplace-Gleichung mit den richtigen Randbedingungen, d. h. dem Schmelzpunkt entlang der Schmelze/Festkörper-Grenzfläche und den FEA-Ergebnissen für die Oberflächentemperatur entlang der Achse des Kristalls, abgeleitet. Die Ergebnisse, die von einem der erstellten und bewerteten Rohlinge bei verschiedenen axialen Positionen erhalten wurden, sind in **Fig. 17** dargestellt.

[0128] Um die Wirkung abzuschätzen, die radiale Änderungen in G_0 auf die Anfangs-Zwischengitteratom-Konzentration haben, wurde angenommen, dass eine radiale Position R' , d. h. eine Position in der Hälfte zwischen der L/Z-Grenzfläche und der Kristalloberfläche, der weiteste Punkt ist, bei dem ein Silizium-Eigenzwischengitteratom von einer Senke in dem Rohling entfernt sein kann, unabhängig davon, ob sich diese Senke in dem Leerstellen-dominierten Bereich oder an der Kristalloberfläche befindet. Unter Verwendung der Wachstumsrate und der G_0 -Daten für den obigen Rohling liefert die Differenz zwischen dem berechneten v/G_0 an der Position R' und dem v/G_0 an der L/Z-Grenzfläche (d. h. dem kritischen v/G_0 -Wert) eine Angabe der radialen Änderung der Anfangs-Zwischengitteratom-Konzentration sowie der Wirkung, die diese auf die Fähigkeit haben, dass Überschuss-Zwischengitteratome eine Senke auf der Kristalloberfläche oder in dem Leerstellen-dominierten Bereich erreichen.

[0129] Für diesen besonderen Datensatz scheint es keine systematische Abhängigkeit der Qualität des Kristalls von der radialen Änderung von v/G_0 zu geben. Wie in **Fig. 18** zu sehen ist, ist die axiale Abhängigkeit in dem Rohling in dieser Probe minimal. Die in dieser Reihe von Experimenten enthaltenen Wachstumsbedingungen stellen einen recht engen Bereich in der radialen Änderung von G_0 dar. Im Ergebnis ist dieser Datensatz zu schmal, um eine wahrnehmbare Abhängigkeit der Qualität (d. h. der Anwesenheit des Fehlens eines Bands agglomerierter intrinsischer Punktfehlstellen) von der radialen Änderung von G_0 aufzulösen.

[0130] Wie angemerkt wurde, wurden die Proben jedes erstellten Rohlings bei verschiedenen axialen Positionen auf die Anwesenheit oder Abwesenheit agglomerierter Zwischengitteratom-Fehlstellen bewertet. Für jede untersuchte axiale Position kann eine Korrelation zwischen der Qualität der Probe und der Breite des axialsymmetrischen Bereiches hergestellt werden. Wie nun in **Fig. 19** gezeigt ist, kann ein Graph erstellt werden, der die Qualität der gegebenen Probe mit der Zeitdauer vergleicht, die die Probe an einer besonderen axialen Position von der Verfestigung bis etwa 1050°C abkühlen konnte. Erwartungsgemäß zeigt dieser Graph, dass die Breite des axialsymmetrischen Bereiches (d. h. $R_{\text{Kristall}} - R_{\text{Leerstelle}}$) in diesem besonderen Temperaturbereich eine starke Abhängigkeit von der Abkühlhistorie der Probe

aufweist. Der Trend legt nahe, dass zum Erhöhen der Breite des axialsymmetrischen Bereiches längere Diffusionszeiten oder langsamere Abkühlraten erforderlich sind.

[0131] Anhand der in diesem Graphen vorhandenen Daten kann eine Linie der besten Anpassung berechnet werden, die allgemein einen Übergang der Qualität des Siliziums von "gut" (d. h. defektfrei) zu "schlecht" (d. h. Defekte enthaltend) als Funktion der Abkühlzeit, die für einen gegebenen Rohlingsdurchmesser in diesem besonderen Temperaturbereich zugelassen wird, darstellt. Diese allgemeine Beziehung zwischen der Breite des axialsymmetrischen Bereiches und der Abkühlrate kann durch die folgende Gleichung ausgedrückt werden:

$$(R_{\text{Kristall}} - R_{\text{Übergang}})^2 = D_{\text{Eff}} t_{1050^\circ\text{C}},$$

wobei

R_{Kristall} der Radius des Rohlings,

$R_{\text{Übergang}}$ der Radius des axialsymmetrischen Bereiches an der axialen Position in der Probe ist, an dem in dem Zwischengitteratom-dominierten Material ein Übergang von defektfrei in defekthaltig oder umgekehrt stattfindet,

D_{Eff} eine Konstante von etwa $9,3 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ ist, die die mittlere Zeit und Temperatur des Zwischengitteratom-Diffusionskoeffizienten repräsentiert, und $t_{1050^\circ\text{C}}$ die Zeitdauer ist, die es dauert, dass die gegebene axiale Position der Probe von der Verfestigung auf etwa 1050°C abkühlt.

[0132] Wieder anhand von **Fig. 19** ist zu sehen, dass für einen gegebenen Rohlingsdurchmesser eine Abkühlzeit geschätzt werden kann, um einen axialsymmetrischen Bereich mit einem gewünschten Durchmesser zu erhalten. Beispielsweise kann für einen Rohling mit einem Durchmesser von etwa 150 mm ein axialsymmetrischer Bereich mit einer Breite etwa gleich dem Radius des Rohlings erhalten werden, wenn sich dieser besondere Bereich des Rohlings zwischen dem Temperaturbereich von etwa 1410°C und etwa 1050°C etwa 10 bis etwa 15 Stunden abkühlen kann. Ähnlich kann für einen Rohling mit einem Durchmesser von etwa 200 mm ein axialsymmetrischer Bereich mit einer Breite etwa gleich dem Radius des Rohlings erhalten werden, wenn sich dieser besondere Abschnitt des Rohlings zwischen diesem Temperaturbereich etwa 25 bis etwa 35 Stunden abkühlen kann. Wenn diese Linie weiter extrapoliert wird, können Abkühlzeiten von etwa 65 bis etwa 75 Stunden erforderlich sein, um einen axialsymmetrischen Bereich mit einer Breite etwa gleich dem Radius eines Rohlings mit einem Durchmesser von etwa 300 mm zu erhalten. Diesbezüglich wird angemerkt, dass wegen der Zunahme des Abstands, den die Zwischengitteratome diffundieren müssen, um Senken an der Rohlingsoberfläche oder im Leerstellenkern zu erreichen, eine zusätzliche Abkühlzeit erforderlich ist, während der Durchmesser des Rohlings steigt.

[0133] Anhand der **Fig. 20, 21, 22 und 23** können nun die Wirkungen der erhöhten Abkühlzeit für verschiedene Rohlinge beobachtet werden. Jede dieser Figuren zeigt einen Abschnitt eines Rohlings mit einem Nenndurchmesser von 200 mm, wobei die Abkühlzeit von der Verfestigungstemperatur auf 1050°C von **Fig. 20** zu **Fig. 23** zunehmend steigt.

[0134] In **Fig. 20** ist ein Abschnitt eines Rohlings gezeigt, dessen axiale Position von etwa 235 mm bis etwa 350 mm vom Absatz reicht. Bei einer axialen Position von etwa 255 mm ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches, der frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, maximal, d. h. etwa 45% vom Radius des Rohlings. Jenseits dieser Position findet ein Übergang von einem Bereich, der frei von solchen Defekten ist, zu einem Bereich, in dem solche Defekte vorhanden sind, statt.

[0135] In **Fig. 21** ist nun ein Abschnitt eines Rohlings gezeigt, dessen axiale Position von etwa 305 mm bis etwa 460 mm vom Absatz reicht. Bei einer axialen Position von etwa 360 mm ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches, der frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, maximal, d. h. etwa 65% des Radius des Rohlings. Jenseits dieser Position beginnt die Defektausbildung.

[0136] In **Fig. 22** ist nun ein Abschnitt eines Rohlings gezeigt, dessen axiale Position von etwa 140 mm bis etwa 275 mm vom Absatz reicht. Bei einer axialen Position von etwa 210 mm ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches etwa gleich dem Radius des Rohlings; d. h. ein kleiner Abschnitt des Rohlings in diesem Bereich ist frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen.

[0137] In **Fig. 23** ist nun ein Abschnitt eines Rohlings gezeigt, dessen axiale Position von etwa 600 mm bis etwa 730 mm vom Absatz reicht. Über eine axiale Position, die von etwa 640 mm bis etwa 665 mm reicht, ist die Breite des axialsymmetrischen Bereiches etwa gleich dem Radius des Rohlings. Außerdem ist die Länge des Rohlingssegments, in dem die Breite des axialsymmetrischen Bereiches etwa gleich dem Radius des Rohlings ist, größer als die, die in Verbindung mit dem Rohling aus **Fig. 22** beobachtet wird.

[0138] Somit demonstrieren die **Fig. 20, 21, 22 und 23** im Zusammenhang gesehen die Wirkung der Abkühlzeit auf 1050°C auf die Breite und auf die Länge des defektfreien axialsymmetrischen Bereiches. Im Allgemeinen traten die Bereiche, die agglomerierte Zwischengitteratom-Fehlstellen enthielten, im Ergebnis eines ständigen Sinkens der Kristallzugrate auf, was zu einer Anfangszwischengitterkonzentration führte, die für die Abkühlzeit dieses Abschnitts des Kristalls zu groß, um sie verringern, war. Eine größere Länge des axialsymmetrischen Bereiches bedeutet, dass ein größerer Bereich von Zugraten (d. h. der Anfangs-Zwischengitteratom-Konzentration) für das Wachstum dieses defektfreien Materials verfügbar ist. Das Erhöhen der Abkühlzeit ermöglicht eine anfangs höhere Konzentration der Zwischengitterato-

me, da ausreichend Zeit erzielt werden kann, damit die radiale Diffusion die Konzentration unter die kritische Konzentration unterdrückt, die für die Agglomeration von Zwischengitteratom-Fehlstellen erforderlich ist. Mit anderen Worten, für längere Abkühlzeiten führen etwas niedrigere Zugraten (und somit höhere Anfangs-Zwischengitteratom-Konzentrationen) immer noch zu einem maximalen axialsymmetrischen Bereich **6**. Somit führen längere Abkühlzeiten zu einem Steigen der zusätzlichen Änderung der Zugrate um den Zustand, der für den maximalen Durchmesser des axialsymmetrischen Bereiches erforderlich ist, und lockern somit die Beschränkungen an die Prozesssteuerung. Im Ergebnis wird der Prozess für einen axialsymmetrischen Bereich über große Längen des Rohlings leichter.

[0139] Wie wieder in **Fig. 23** gezeigt ist, ist über eine axiale Position, die von etwa 665 mm bis zu mehr als 730 mm vom Absatz des Kristalls reicht, ein Bereich von Leerstellen-dominiertem Material, der frei von agglomerierten Defekten ist, vorhanden, wobei die Breite des Bereiches gleich dem Radius des Rohlings ist.

Beispiel 8

Thermisches Tempern von Wafern mit einem Kern agglomerierter Leerstellendefekte

[0140] Wie nun in **Fig. 26** gezeigt ist, wurden eine Anzahl von 200-mm-Wafern, die aus dem Prozess der vorliegenden Erfindung erhalten wurden, mit einem Laserstrahl-Oberflächenab tastgerät analysiert, das im Gebiet üblich ist (siehe z. B. der Laserabtaster Tencor SP1, kommerziell verfügbar von Tencor Inc aus Mountain View, Kalifornien), um die mittlere Anzahl von Lichtpunktfehlstellen (LPDs) einschließlich agglomerierter Leerstellendefekte mit einer Größe von mehr als etwa 0,09 µm zu bestimmen, die pro Quadratzentimeter auf der Oberfläche des Wafers vorhanden sind. (Die Ergebnisse der Analyse sind als Funktion des Abstands von der zentralen Achse der Wafer dargestellt.) Daraufhin wurden die Wafer thermisch getempert, wobei die Wafer etwa 2 Stunden lang auf etwa 1200°C erwärmt wurden. Daraufhin wurden die Wafer mit dem gleichen Verfahren noch einmal analysiert.

[0141] Wie die Ergebnisse zeigen, enthielten die Wafer anfangs über einen Abstand von etwa 50 mm von der zentralen Achse einen Durchschnitt von etwa 5 LPDs/cm² (Lichtpunktfehlstellen pro Quadratzentimeter) bis etwa 0,2 LPD/cm², wobei die Anzahl sinkt, während der Abstand von der zentralen Achse steigt. Allerdings enthielten die Wafer einen Durchschnitt von etwa 1 LPD/cm² bis etwa 0,2 LPD/cm² in dem gleichen Bereich, nachdem das thermische Tempern abgeschlossen war. Die Ergebnisse zeigen deutlich, dass agglomerierte Leerstellendefekte im Ergebnis des thermischen Temperns in dem axialsymmetrischen Bereich des Leerstellenmaterials aufgelöst

wurden oder ihre Größe verringert wurde. In dem Bereich, in dem die Anzahl der LPDs mit mehr als etwa $0,09\text{ }\mu\text{m}$ am höchsten war, d. h. in dem Bereich, der sich von der zentralen Achse bis zu etwa 10 mm erstreckt, wurde die Größe der Defekte (d. h. die untere Grenze der Defektgröße, die beobachtet wurde) unter $0,09\text{ }\mu\text{m}$ verringert, was effektiv bewirkte, dass die Anzahl der Defekte in diesem Größenbereich um etwa 80 verringert wurde (d. h. die Anzahldichte um etwa 80% verringert wurde).

[0142] In Bezug auf die Anzahl der pro Quadratzentimeter erfassten Defekte wird angemerkt, dass die Lichtstreuanalyse außerdem Partikel und andere Defekte erfasst, die auf der Oberfläche des Wafers vorhanden sind und nicht agglomerierten Leerstellendefekten zuzuschreiben sind. Beispielsweise geben die Ergebnisse an, dass eine Anzahl von LPDs bei radialen Positionen von mehr als etwa 50 mm vorhanden sind. Allerdings ist dieses Material Zwischengitteratom-Material, so dass es keine agglomerierten Leerstellendefekte enthält. Dementsprechend können diese Defekte, obgleich die Ergebnisse zeigen, dass nach dem thermischen Tempern immer noch LPDs vorhanden sind, selbstverständlich agglomerierte Leerstellendefekte sein, die das thermische Tempern überstanden haben, oder keine solchen Defekte sein.

[0143] In den **Fig. 27 bis 32** sind nun die Anfangs- und Endergebnisse der Oberflächenanalyse weiter nach der Defektgröße unterteilt. Zunächst kann beobachtet werden, dass das thermische Tempern agglomerierte Leerstellendefekte, deren Größe von etwa $0,09\text{ }\mu\text{m}$ bis etwa $0,15\text{ }\mu\text{m}$ reicht, erfolgreich auflöst oder ihre Größe verringert. Ferner kann aus diesen Ergebnissen beobachtet werden, dass die Mehrzahl der erfassten LPDs klein waren und ihre Größe von etwa $0,09\text{ }\mu\text{m}$ bis zu etwa $0,13\text{ }\mu\text{m}$ reichte. Ohne an einer besonderen Theorie festzuhalten, wird angenommen, dass dies der Fall ist, da die Breite des Leerstellenkerns allgemein klein ist und sich lediglich über etwa 50% des Radius erstreckt. Dementsprechend wird angemerkt, dass die Breite des axialsymmetrischen Bereiches, der im Wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist, bevorzugt wenigstens etwa 50% des Radius des Wafers beträgt, um sicherzustellen, dass agglomerierte Leerstellendefekte (falls sie vorhanden sind) leichter aufgelöst werden; d. h., die Breite des Leerstellenkerns beträgt bevorzugt weniger als etwa 50% des Radius des Wafers.

[0144] Nunmehr anhand der **Fig. 33a bis 33b** kann beobachtet werden, dass die resultierende Leerstellenkonzentration in dem Material, wenn das Einkristall-Siliziummaterial von der Mitte bis zur Kante Leerstellen-dominiert gewachsen wird (mit "Fall I" bezeichnet; siehe **Fig. 33a** und **33b**), sehr hoch ist im Vergleich zum Material, das in Übereinstimmung mit der vorliegenden Erfindung erstellt wurde (mit "Fall II" bezeichnet; siehe **Fig. 33a** und **33c**). Material, das durch den vorliegenden Prozess mit einem Leerstel-

lenkern minimaler Breite erstellt wurde, besitzt eine wesentlich niedrigere Konzentration intrinsischer Leerstellen-Punktfehlstellen, so dass die resultierende Größe der agglomerierten Defekte, falls sie ausgebildet werden, wesentlich kleiner ist. Wie aus den **Fig. 27 bis 30** zu sehen ist, werden kleinere Defekte leichter aufgelöst.

[0145] Angesichts des obenstehenden ist zu sehen, dass die mehreren Aufgaben der Erfindung gelöst sind.

[0146] Da an den obigen Strukturen und Prozessen verschiedene Änderungen vorgenommen werden können, ohne vom Umfang der Erfindung abzuweichen, soll jede in der obigen Beschreibung diskutierte Angelegenheit als erläuternd und nicht in einem beschränkenden Sinn ausgelegt werden.

Patentansprüche

1. Einkristall-Siliziumwafer mit einer zentralen Achse (**12**), einer Vorderseite und einer Rückseite, die im allgemeinen senkrecht zur der zentralen Achse (**12**) sind, einer zentralen Ebene zwischen der Vorder- und Rückseite, einer Umfangskante (**20**) und einem Radius (**4**), der sich von der zentralen Achse (**12**) zu der Umfangskante (**20**) erstreckt, wobei der Wafer folgendes umfasst:

einen ersten axialsymmetrischen Bereich (**6**), der sich radial nach innen von der Umfangskante (**20**) erstreckt und in dem Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Fehlstellen ist; und

einen zweiten axialsymmetrischen Bereich (**9**), bei dem Leerstellen die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind, wobei der zweite axialsymmetrische Bereich (**9**) eine Oberflächenschicht, die sich von der Vorderseite in Richtung auf die zentrale Ebene erstreckt, und eine Grundmaterialsicht, die sich von der Oberflächenschicht zu der zentralen Ebene erstreckt, umfasst, wobei die Anzahldichte agglomerierter Leerstellendefekte in der Oberflächenschicht geringer ist als die Konzentration in der Grundmaterialsicht.

2. Wafer nach Anspruch 1, bei welchem die Oberflächenschicht eine Tiefe hat, wenn von der Vorderseite in Richtung auf die zentrale Ebene gemessen wird, und zwar von wenigstens $2\text{ }\mu\text{m}$.

3. Wafer nach Anspruch 1 oder Anspruch 2, bei welchem die Oberflächenschicht eine Tiefe von wenigstens $4\text{ }\mu\text{m}$ hat, und zwar wenn man von der Vorderseite in Richtung zu der zentralen Ebene misst.

4. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 3, bei welchem die Oberflächenschicht eine Tiefe von wenigstens $8\text{ }\mu\text{m}$ hat, und zwar wenn man von der Vorderseite in Richtung auf die zentrale Ebene misst.

5. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 4, bei welchem die Oberflächenschicht eine Tiefe von wenigstens 10 µm hat, wenn man von der Vorderseite in Richtung auf die zentrale Ebene misst.

6. Wafer gemäß einem der Ansprüche 1 bis 5, bei welchem der Wafer einen Sauerstoffinhalt hat, der weniger als 13 POMA ist.

7. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 6, bei welchem der zweite axialsymmetrische Bereich (9) eine Breite hat, die wenigstens 25% der Länge des Radius ist, wenn radial ausgehend von der zentralen Achse in Richtung auf die Umfangskante gemessen wird.

8. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 7, bei welchem der zweite axialsymmetrische Bereich (9) eine Breite hat, die wenigstens 50% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der zentralen Achse in Richtung auf die Umfangskante gemessen wird.

9. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 6, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich (6) eine Breite hat, die wenigstens 10% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

10. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 6, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich (6) eine Breite hat, die wenigstens 30% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

11. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 6, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich (6) eine Breite hat, die wenigstens 60% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

12. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 6, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich (6) eine Breite hat, die wenigstens 80% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

13. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 12, bei welchem die Anzahldichte agglomerierter Leerstellendefekte, die in der Oberflächenschicht vorhanden sind, ungefähr 20% geringer ist, als die Anzahldichte der Grundmaterialschiicht.

14. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 12, bei welchem die Anzahldichte der agglomerierten Leerstellendefekte, die in der Oberflächenschicht vorhanden sind, ungefähr 40% geringer ist, als die

Anzahldichte der Grundmaterialschiicht.

15. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 12, bei welchem die Anzahldichte der agglomerierten Leerstellendefekte, die in der Oberflächenschicht vorhanden sind, ungefähr 80% geringer ist, als die Anzahldichte der Grundmaterialschiicht.

16. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 12, bei welchem die Oberflächenschicht im wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist.

17. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 16, bei welchem der Wafer einen Durchmesser von wenigstens ungefähr 150 mm hat.

18. Wafer nach einem der Ansprüche 1 bis 17, bei welchem der Wafer einen Durchmesser von wenigstens ungefähr 200 mm hat.

19. Prozess zum Erstellen eines Einkristall-Siliziumwafers, der im wesentlichen frei von agglomerierten intrinsischen Punktfehlstellen ist, wobei der Prozess das thermische Tempern eines Einkristall-Siliziumwafers bei einer Temperatur von ungefähr 1000°C in einer Atmosphäre von Wasserstoff, Argon, Sauerstoff, Stickstoff oder einer Mischung daraus umfasst, wobei der Wafer eine zentrale Achse, eine Vorderseite und eine Rückseite, die im allgemeinen senkrecht zu der zentralen Achse sind, eine zentrale Ebene zwischen den Vorder- und Rückseiten, eine Umfangskante, einen Radius, der sich von der zentralen Achse zu der Umfangskante erstreckt, einen ersten axialsymmetrischen Bereich, der sich radial nach innen ausgehend von der Umfangskante erstreckt in dem Silizium-Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Defekten ist, und einen zweiten axialsymmetrischen Bereich hat, der sich radial einwärts von dem ersten axialsymmetrischen Bereich befindet und in dem Leerstellen die vorherrschende intrinsische Punktfehlstelle sind, wobei das thermische Ausheilen wirkt, um agglomerierte Leerstellendefekte aufzulösen, die in dem zweiten axialsymmetrischen Bereich innerhalb einer Schicht vorhanden sind, die sich von der Vorderseite in Richtung zu der zentralen Ebene erstreckt.

20. Prozess nach Anspruch 19, bei welchem der Wafer thermisch in einer Argonatmosphäre ausgeheilt wird.

21. Prozess nach Anspruch 19 oder Anspruch 20, bei welchem der Wafer thermisch ausgeheilt wird, indem der Wafer auf eine Temperatur erhitzt wird, die von 1100 bis 1300°C reicht.

22. Prozess nach Anspruch 21, bei welchem der

Wafer thermisch für 1 bis 4 Stunden ausgeheilt wird.

23. Prozess nach Anspruch 19 oder Anspruch 20, bei welchem der Wafer thermisch ausgeheilt wird, indem der Wafer auf eine Temperatur erhitzt wird, die von 1200 bis 1250° C reicht.

24. Prozess nach Anspruch 23, bei welchem der Wafer thermisch für 2 bis 3 Stunden ausgeheilt wird.

25. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 24, bei welchem die Schicht sich von der Vorderseite und in Richtung auf die zentrale Ebene zu einer Tiefe von wenigstens 4 µm hin erstreckt.

26. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 25, bei welchem die Schicht sich von der Vorderseite und in Richtung auf die zentrale Ebene zu einer Tiefe von ungefähr 4 µm erstreckt.

27. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 25, bei welchem die Schicht sich von der Vorderseite und in Richtung auf die zentrale Ebene zu einer Tiefe von ungefähr 8 µm erstreckt.

28. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 25, bei welchem die Schicht sich von der Vorderseite und in Richtung auf die zentrale Ebene zu einer Tiefe von ungefähr 10 µm erstreckt.

29. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 25, bei welchem sich die Schicht von der Vorderseite und in Richtung auf die zentrale Ebene zu einer Tiefe von ungefähr 20 µm erstreckt.

30. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 29, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich eine Breite hat, die wenigstens 10% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

31. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 30, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich eine Breite hat, die wenigstens ungefähr 30% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

32. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 31, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich eine Breite hat, die wenigstens ungefähr 60% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Umfangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

33. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 32, bei welchem der erste axialsymmetrische Bereich eine Breite hat, die wenigstens ungefähr 80% der Länge des Radius ist, wenn ausgehend von der Um-

fangskante radial in Richtung auf die zentrale Achse gemessen wird.

34. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 33, bei welchem der Wafer einen Durchmesser von wenigstens ungefähr 150 mm hat.

35. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 34, bei welchem der Wafer einen Durchmesser von wenigstens ungefähr 200 mm hat.

36. Prozess nach einem der Ansprüche 19 bis 35, bei dem der Einkristall-Silizium-Wafer ausgehend von einem Einkristall-Silizium-Rohling in Scheiben geschnitten wird, der eine zentrale Achse, einen Kristallkeim-Konus, einen Endkonus und einen Abschnitt mit konstanten Durchmesser hat, der sich zwischen dem Kristallkeim-Konus und dem Endkonus erstreckt, wobei der Abschnitt konstanten Durchmessers eine Umfangskante und einen Radius hat, der sich von der Umfangskante in Richtung auf die zentrale Achse erstreckt, wobei der Rohling von einer Siliziumschmelze gewachsen wurde und dann ausgehend von der Verfestigungstemperatur in Übereinstimmung mit dem Chzochralski-Verfahren durch ein Verfahren gekühlt wurde, das folgendes umfasst: der Einkristall-Silizium-Rohling wird gewachsen, wobei die Wachstumsgeschwindigkeit v und ein mittlerer Axialtemperaturgradient G_0 während des Wachstums des Abschnitts konstanten Durchmessers des Rohlings über einen Temperaturbereich von einer Verfestigung bis zu einer Temperatur von nicht weniger als 1325°C gesteuert werden, um die Bildung eines Segments des Abschnitts konstanten Durchmessers zu verursachen, der nach Kühlen des Rohlings ausgehend von der Verfestigungstemperatur einen ersten axialsymmetrischen Bereich, der sich radial nach innen ausgehend von der Umfangskante in Richtung auf die zentrale Achse erstreckt und in dem Silizium-Eigenzwischengitteratome die vorherrschenden intrinsischen Punktfehlstellen sind und der im wesentlichen frei von agglomerierten Zwischengitteratom-Defekten ist, und einen zweiten axialsymmetrischen Bereich umfasst, in dem Leerstellen die vorherrschende intrinsische Punktfehlstelle sind; und das Segment des Abschnitts konstanten Durchmessers wird in Scheiben geschnitten, um den Wafer zu erhalten.

Es folgen 30 Blatt Zeichnungen

Anhängende Zeichnungen

Fig. 1

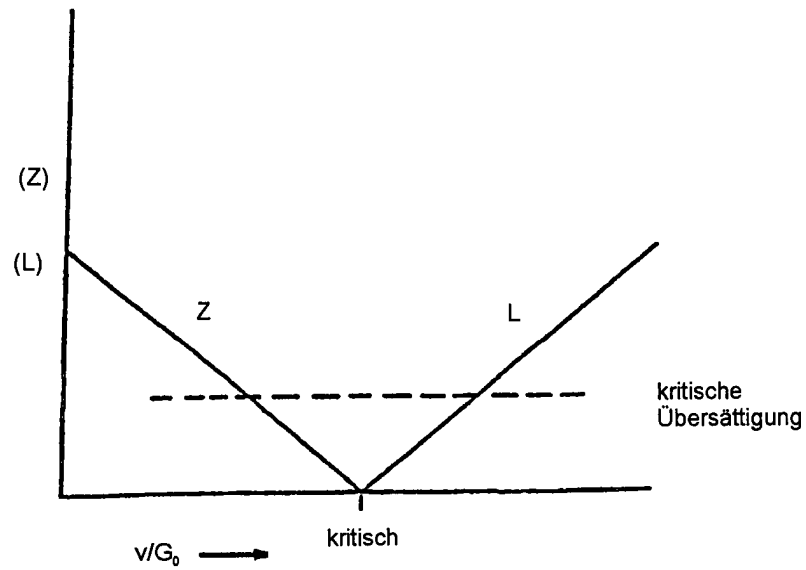


Fig. 2

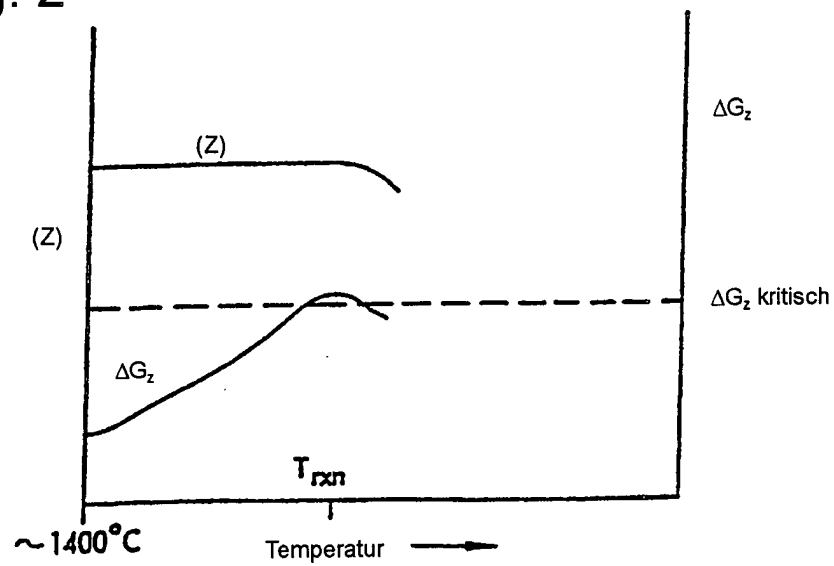


Fig. 3

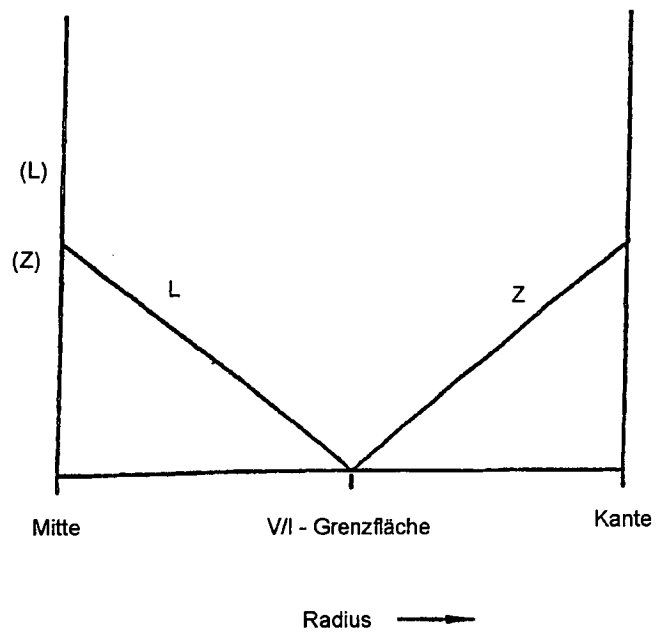


Fig. 4

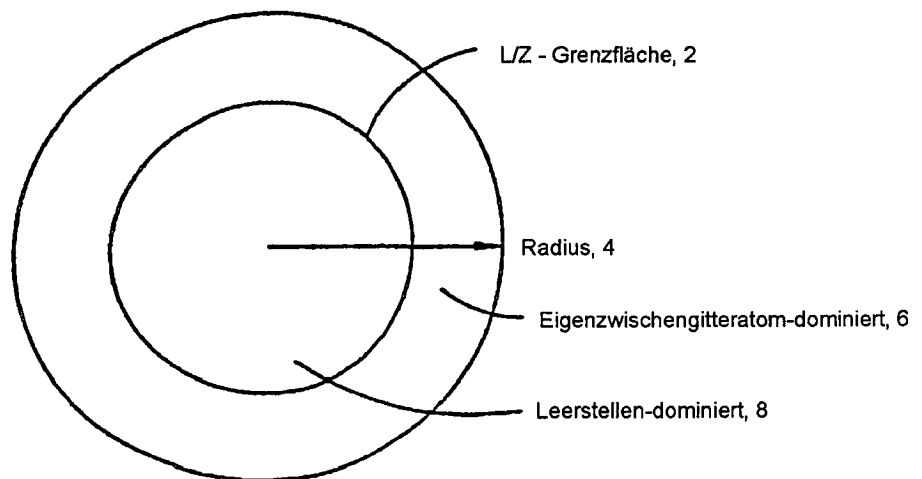


Fig. 5

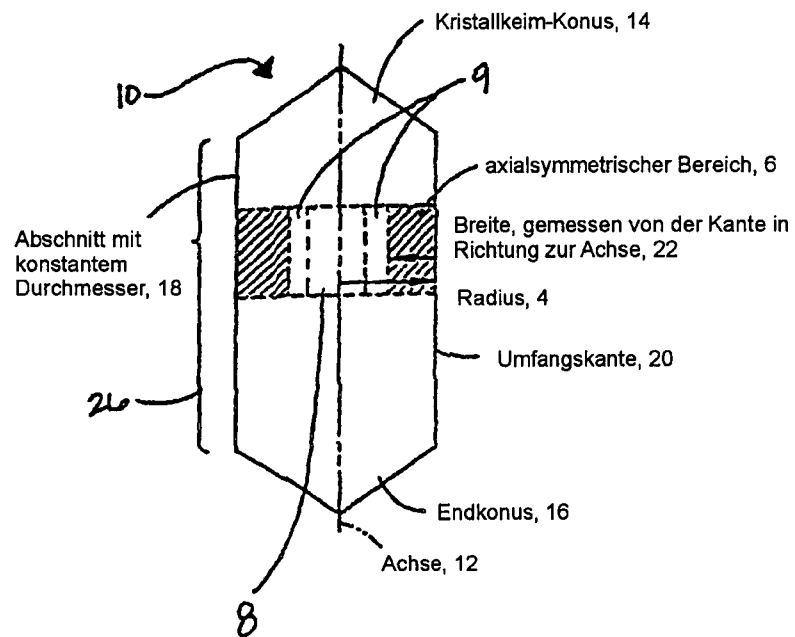


Fig. 6

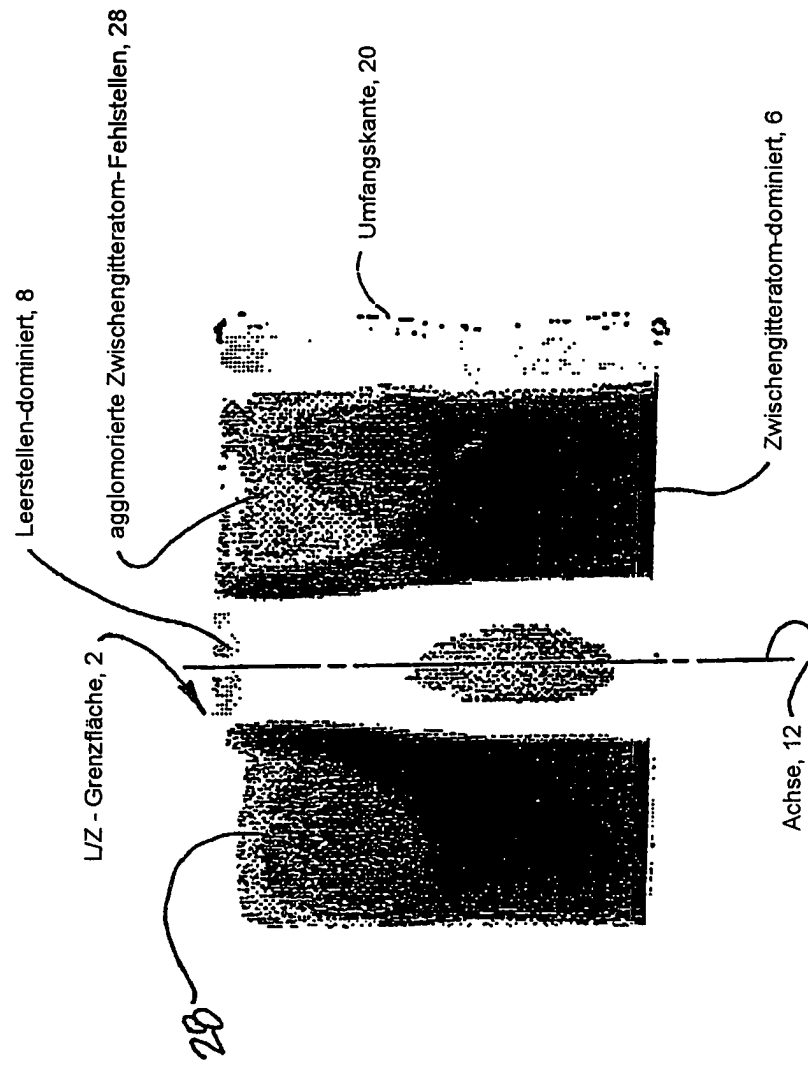


Fig. 7

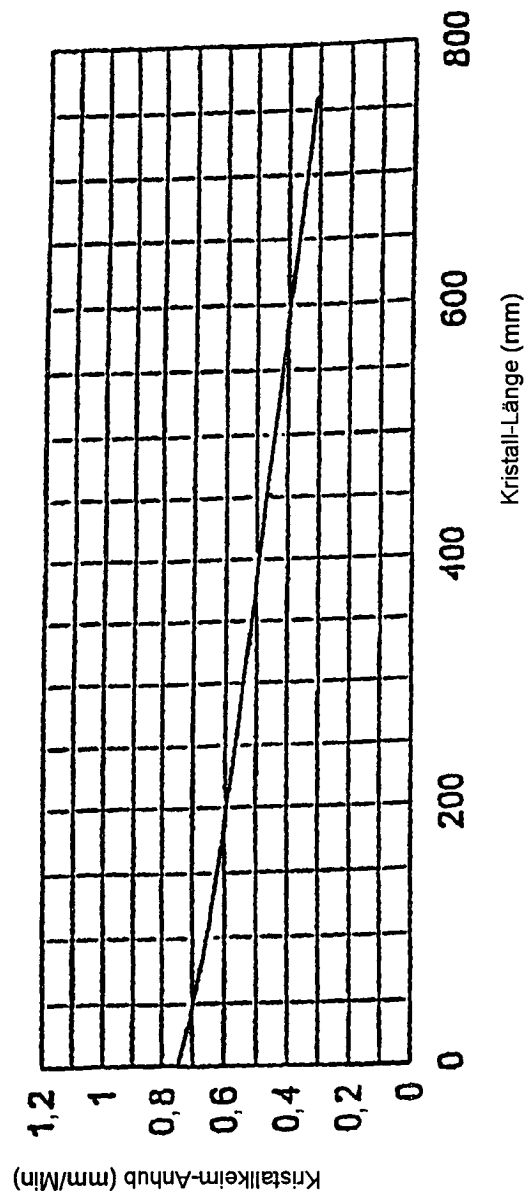


Fig. 8

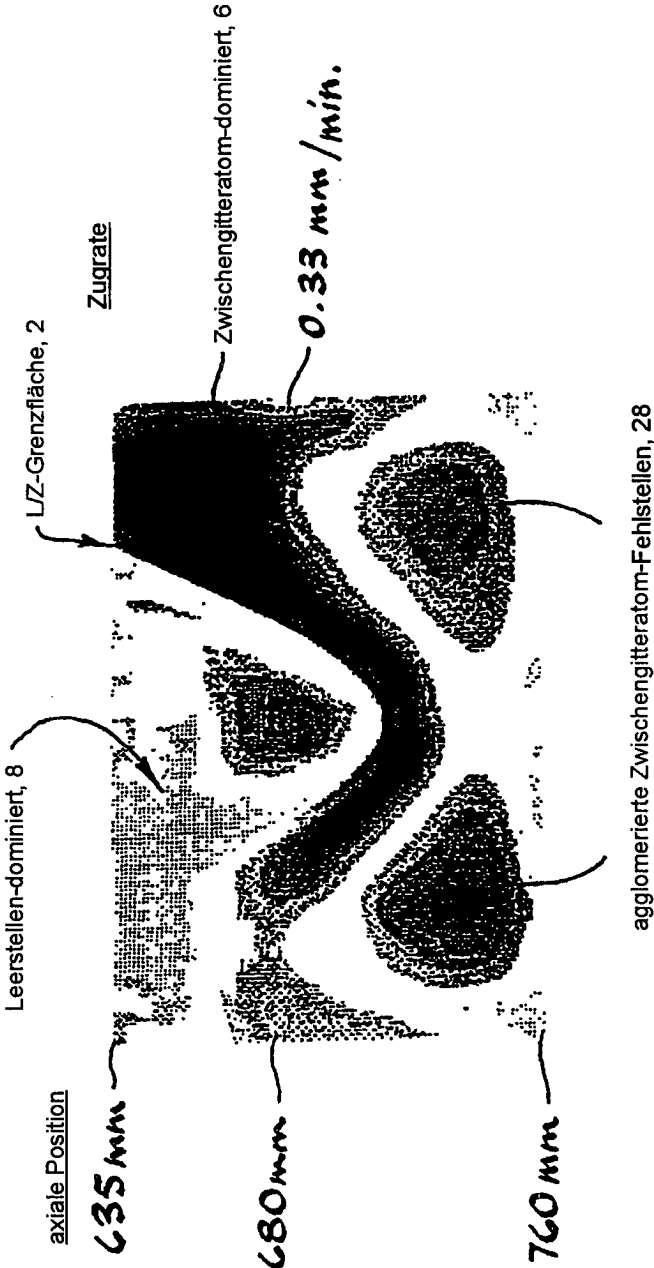


Fig. 9

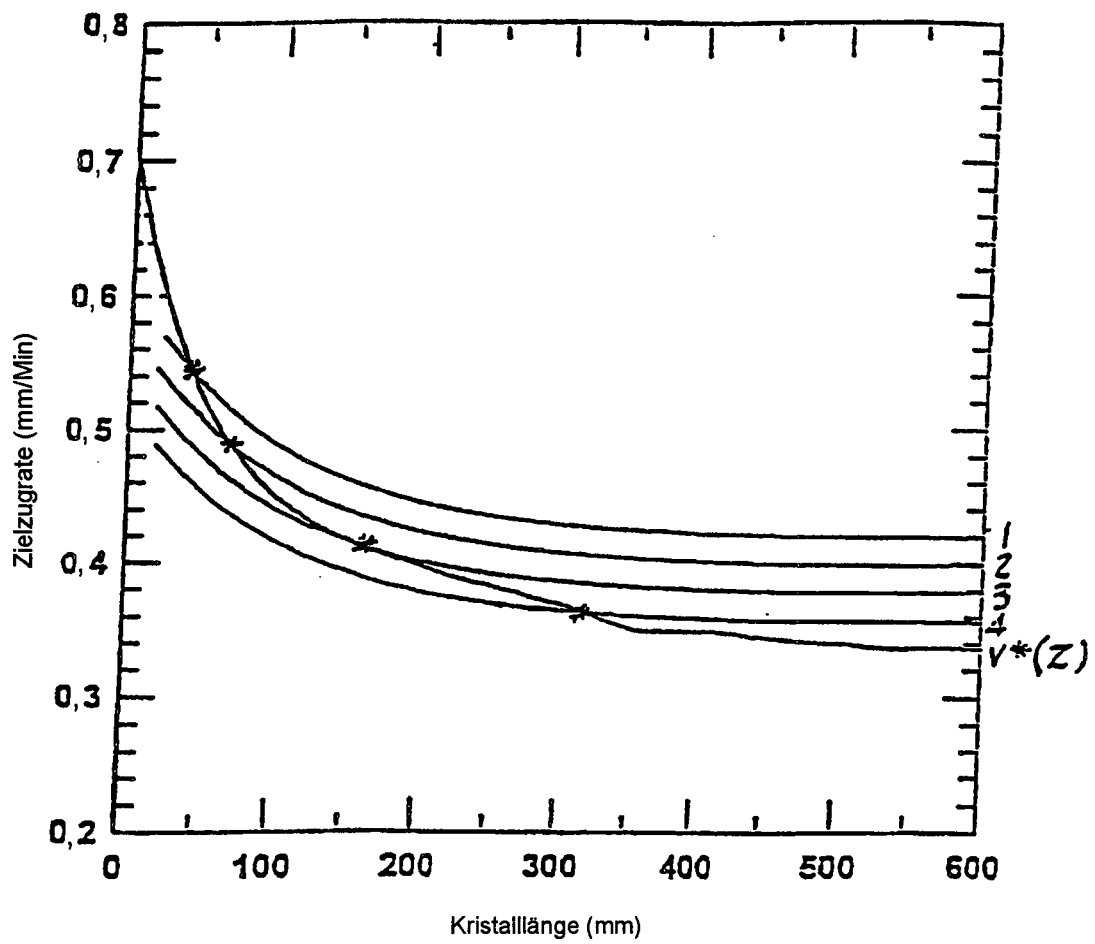


Fig. 10

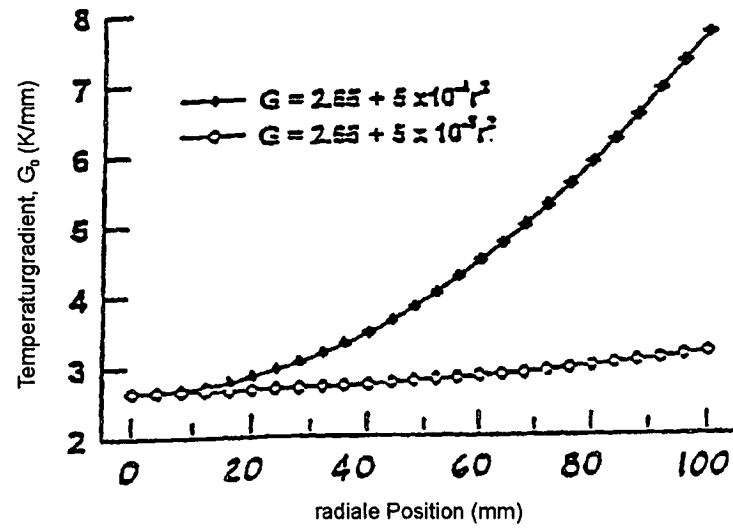


Fig. 11

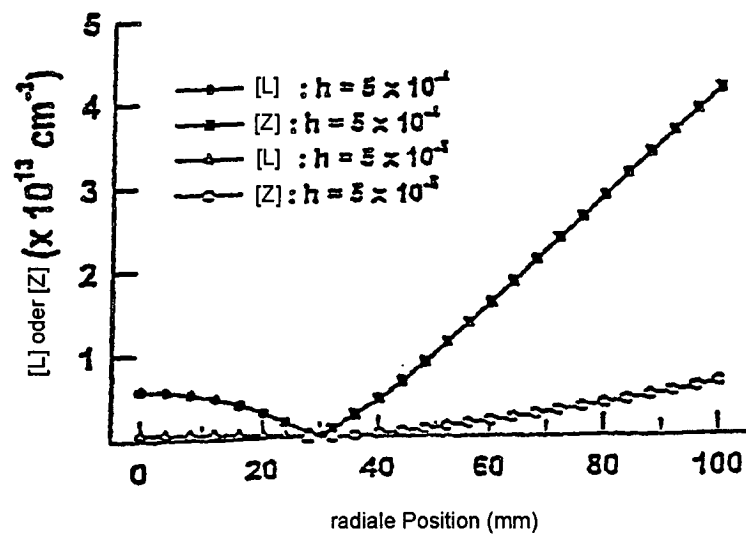


Fig. 12

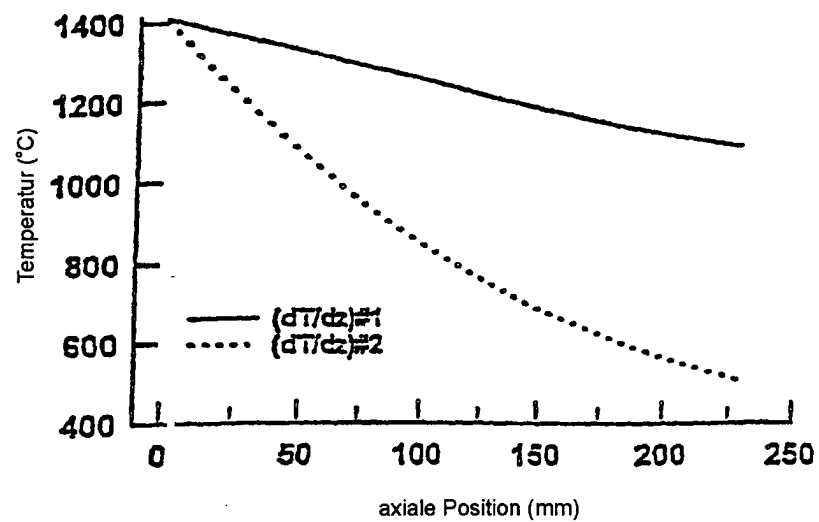


Fig. 13

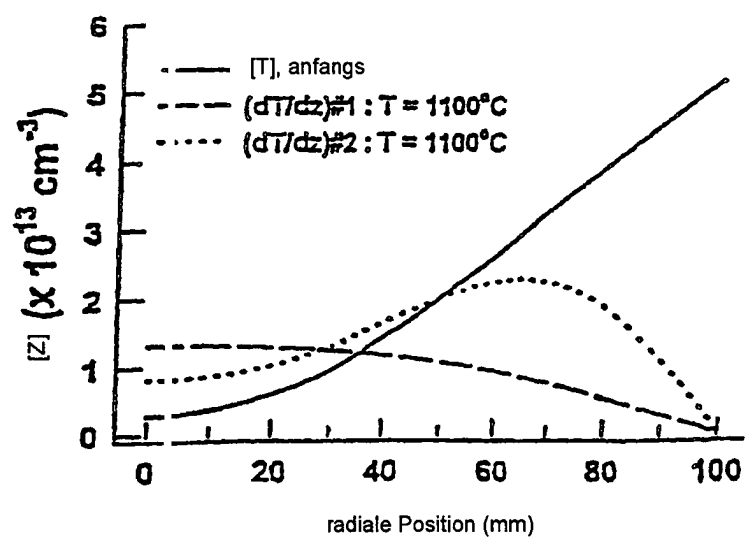


Fig. 14

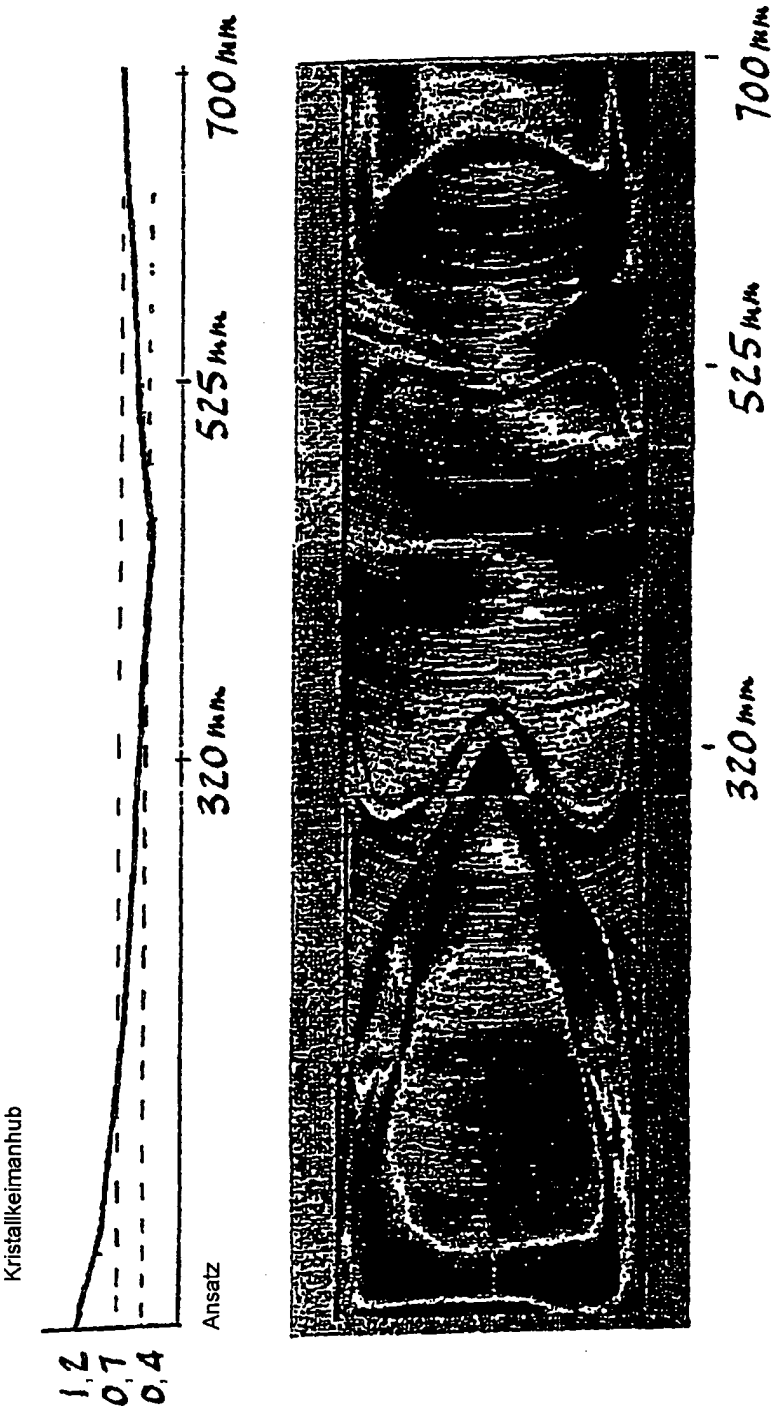


Fig. 15

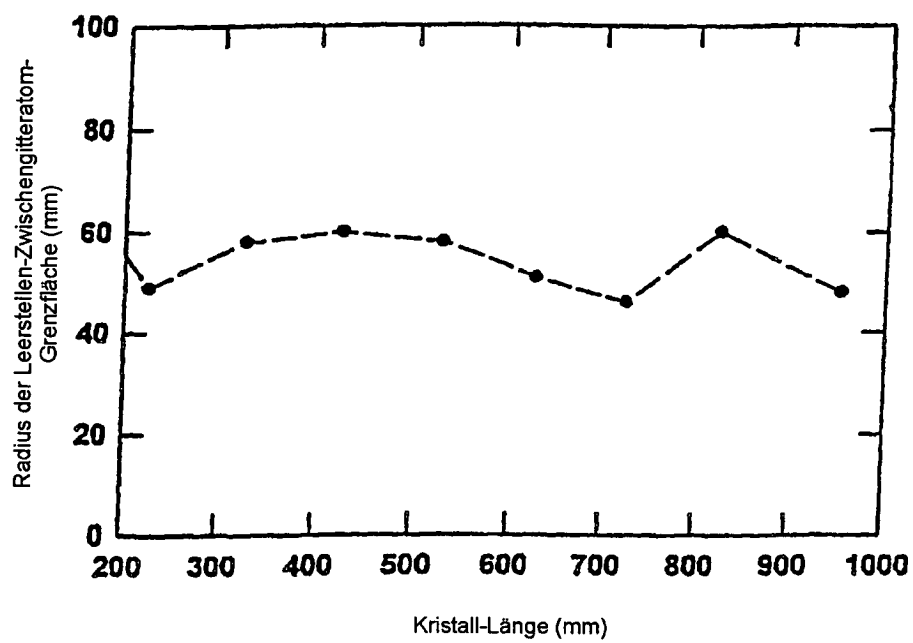


Fig. 16a

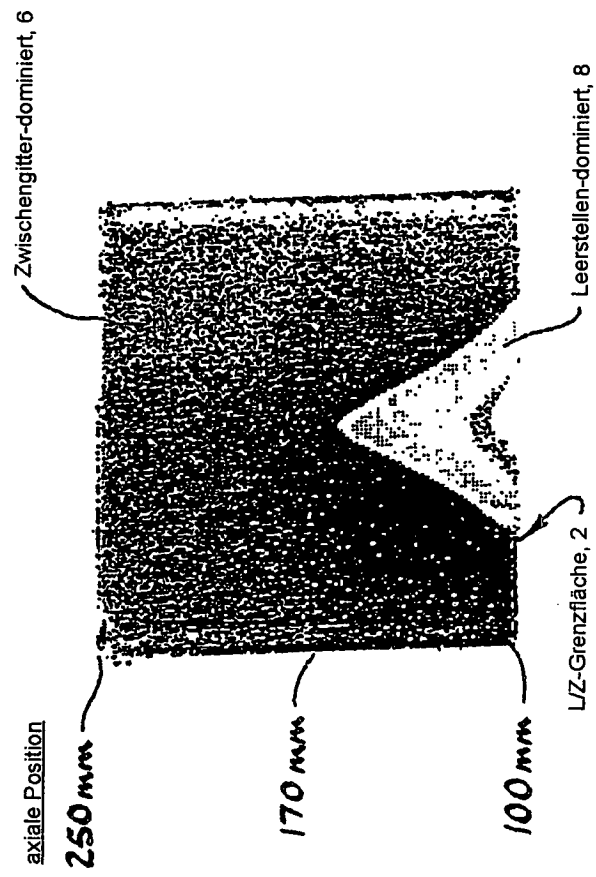


Fig. 16b

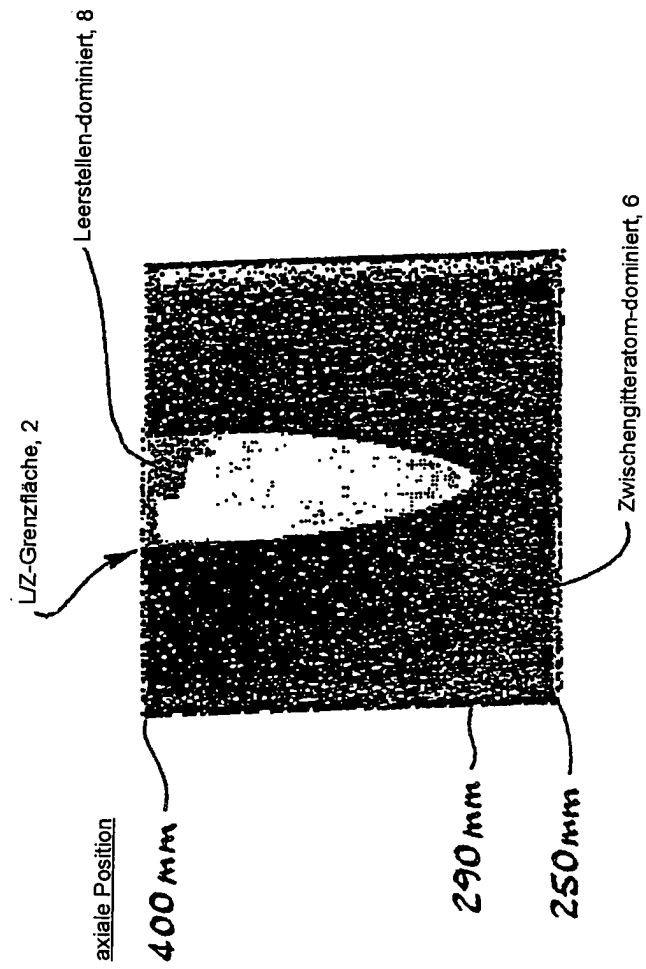


Fig. 17

Axialtemperaturgradient als Funktion des Radius

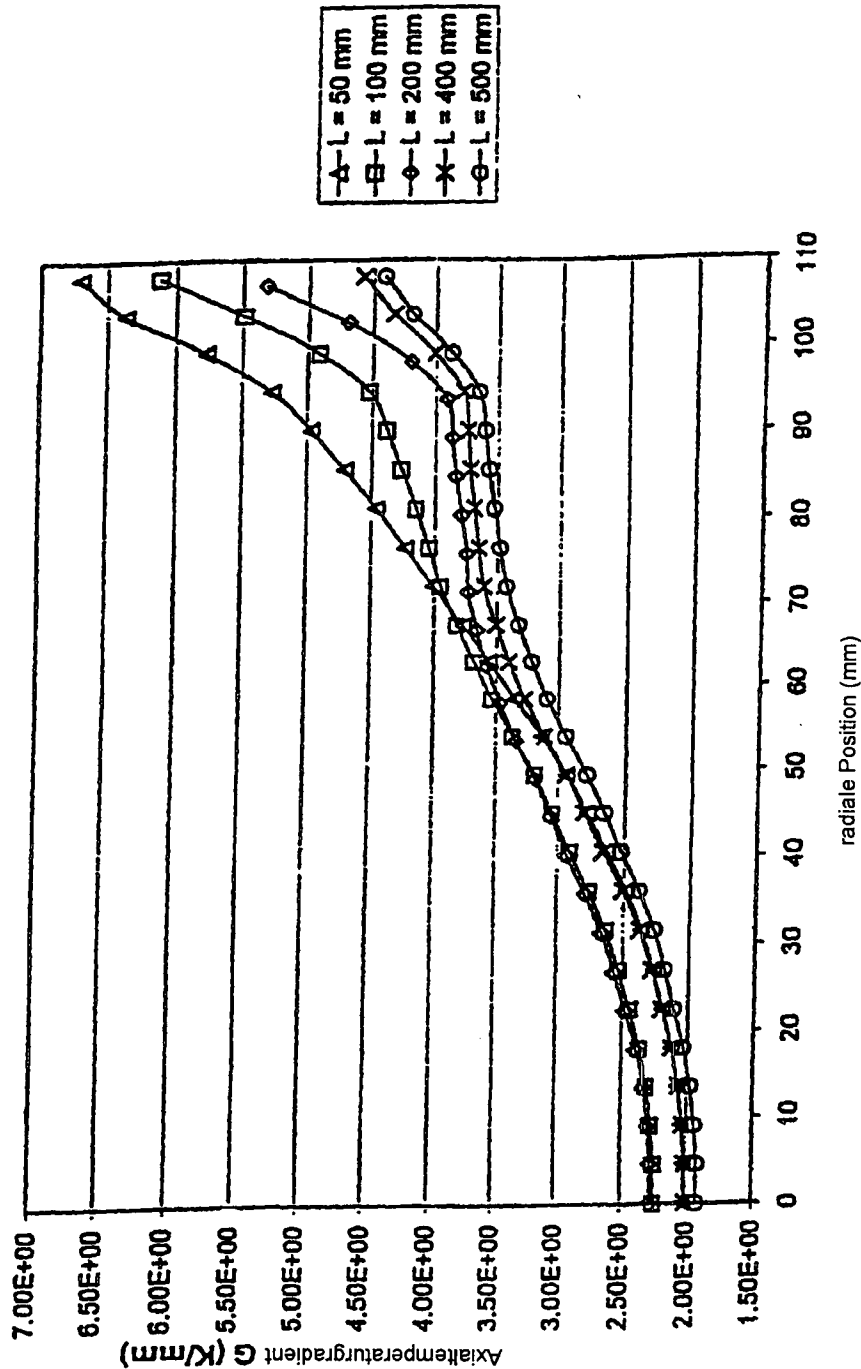


Fig. 18

v/G als Funktion des Radius

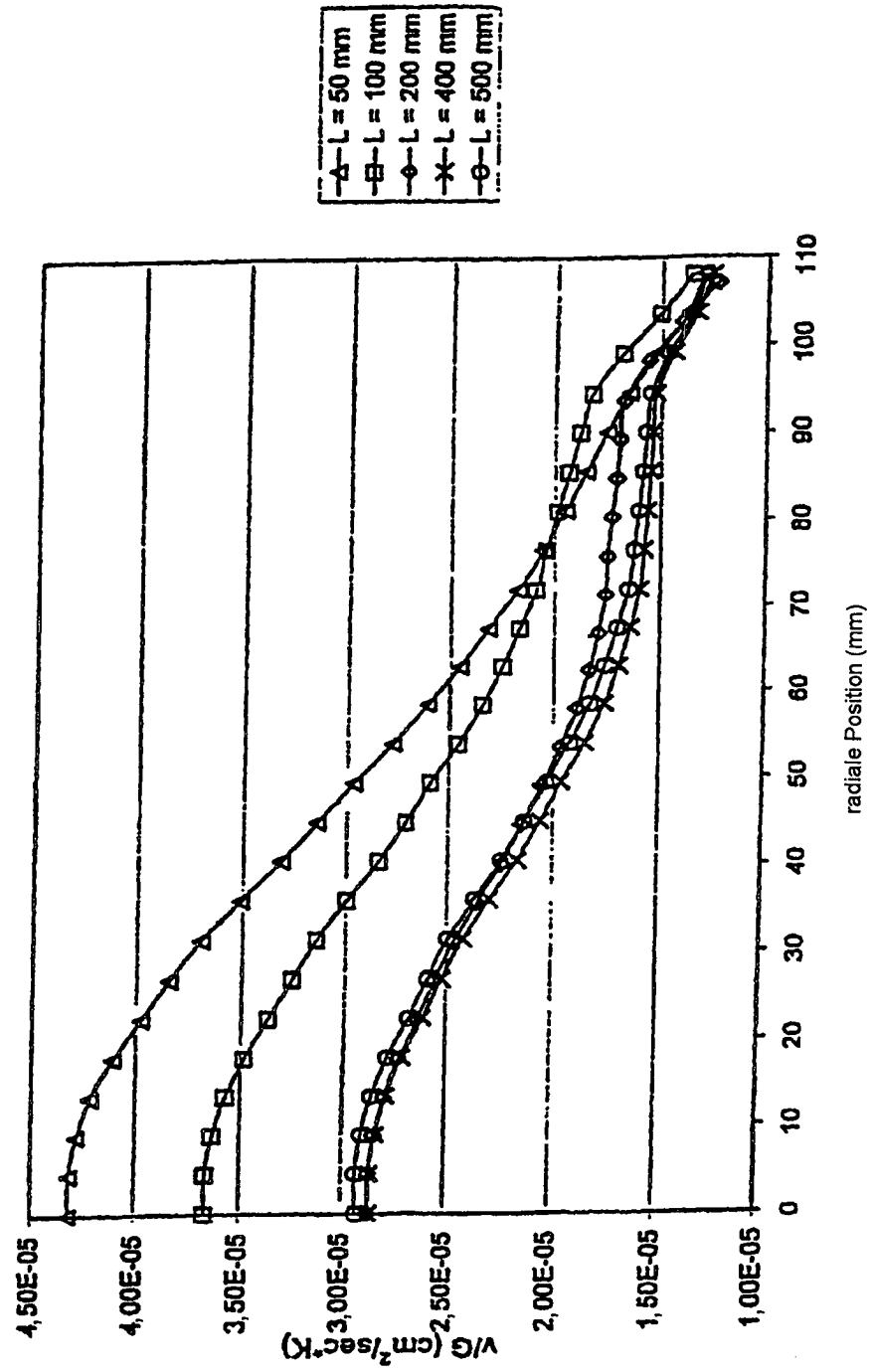


Fig. 19

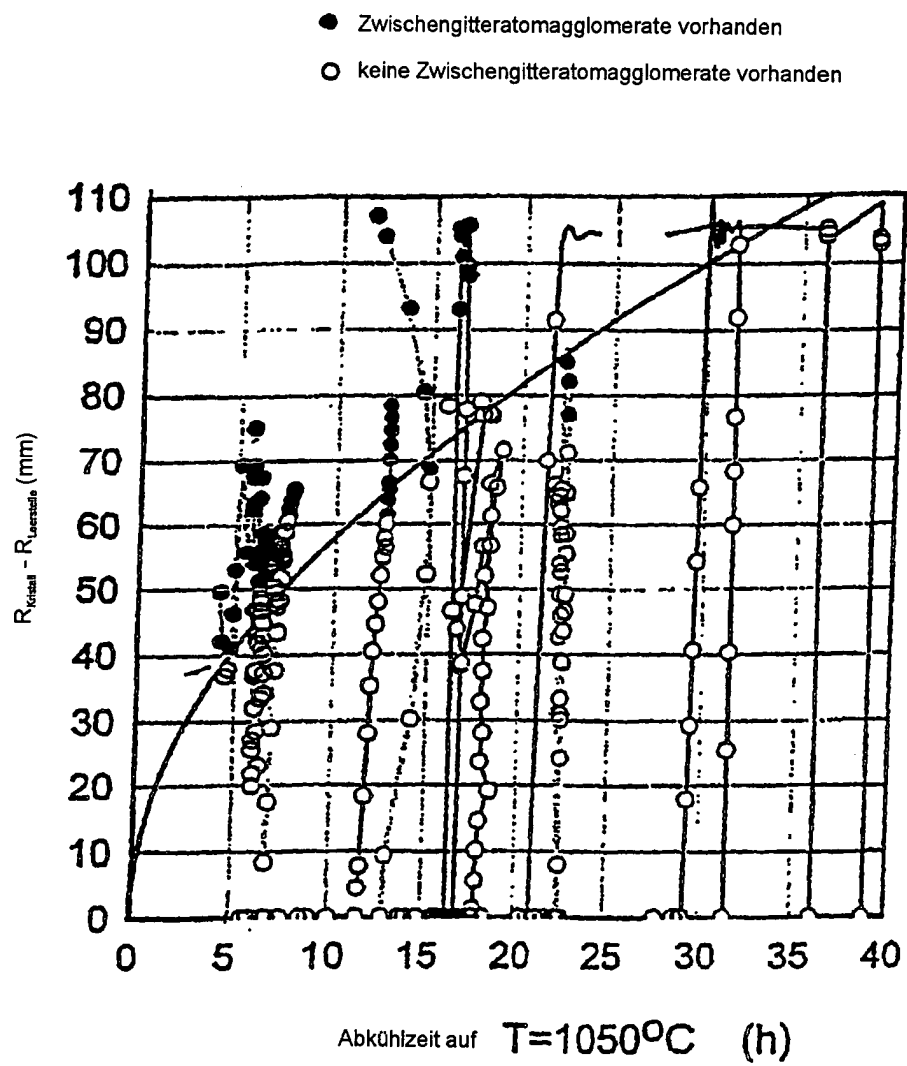


Fig. 20

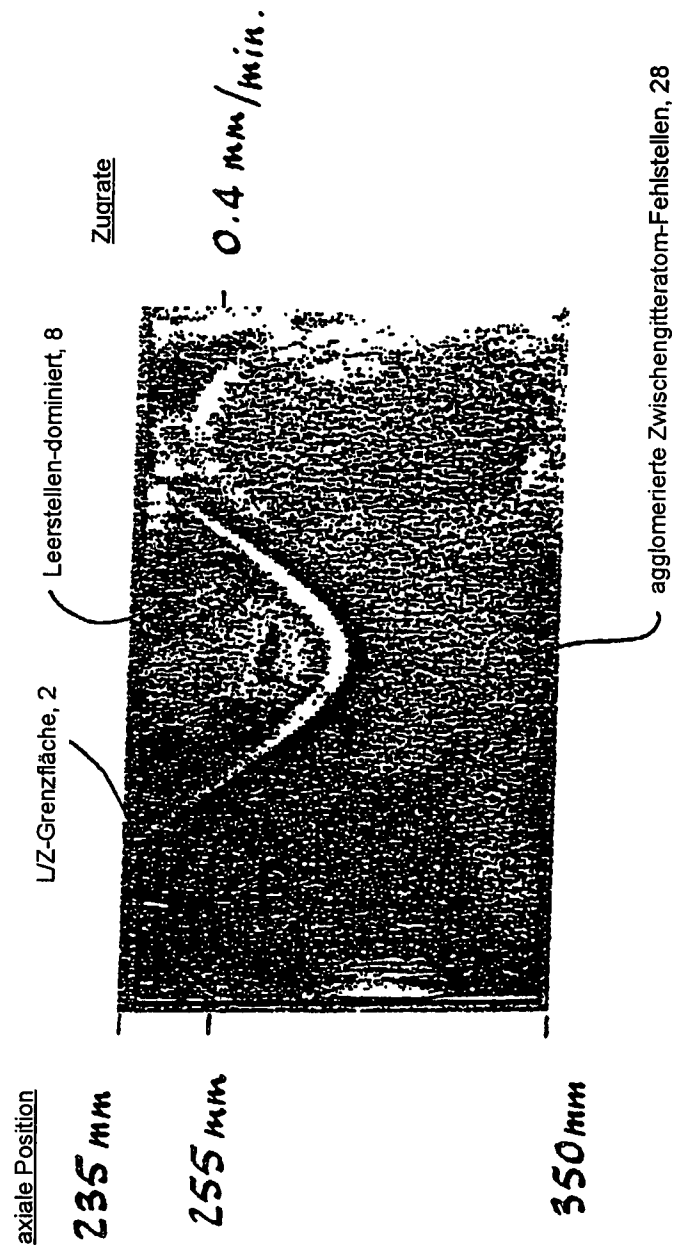


Fig. 21

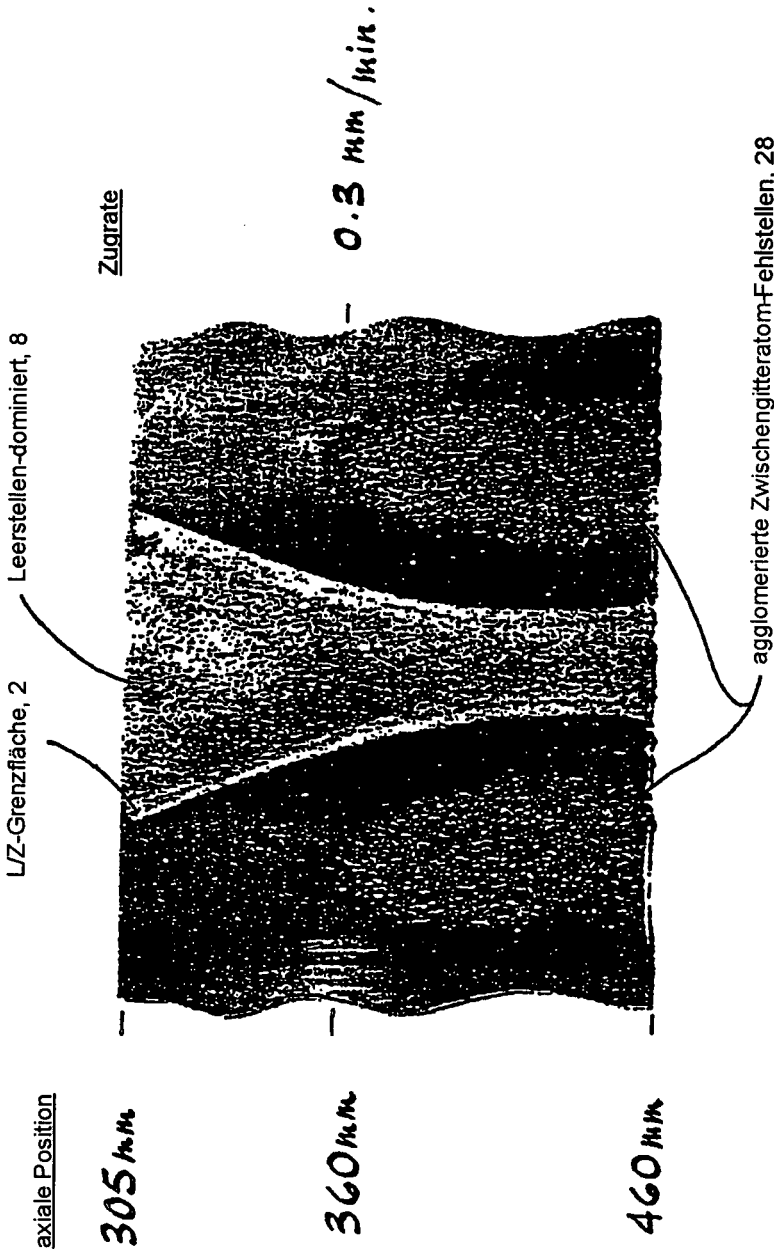


Fig. 22

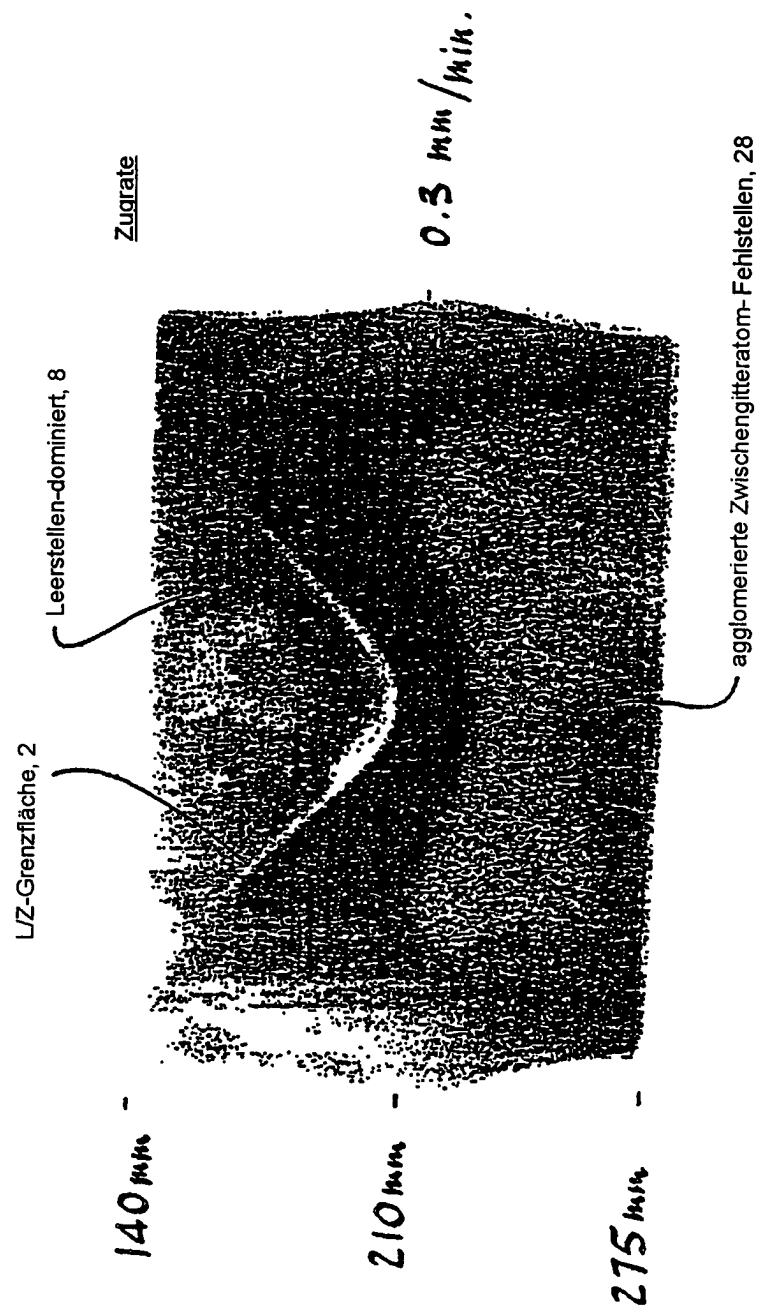


Fig. 23

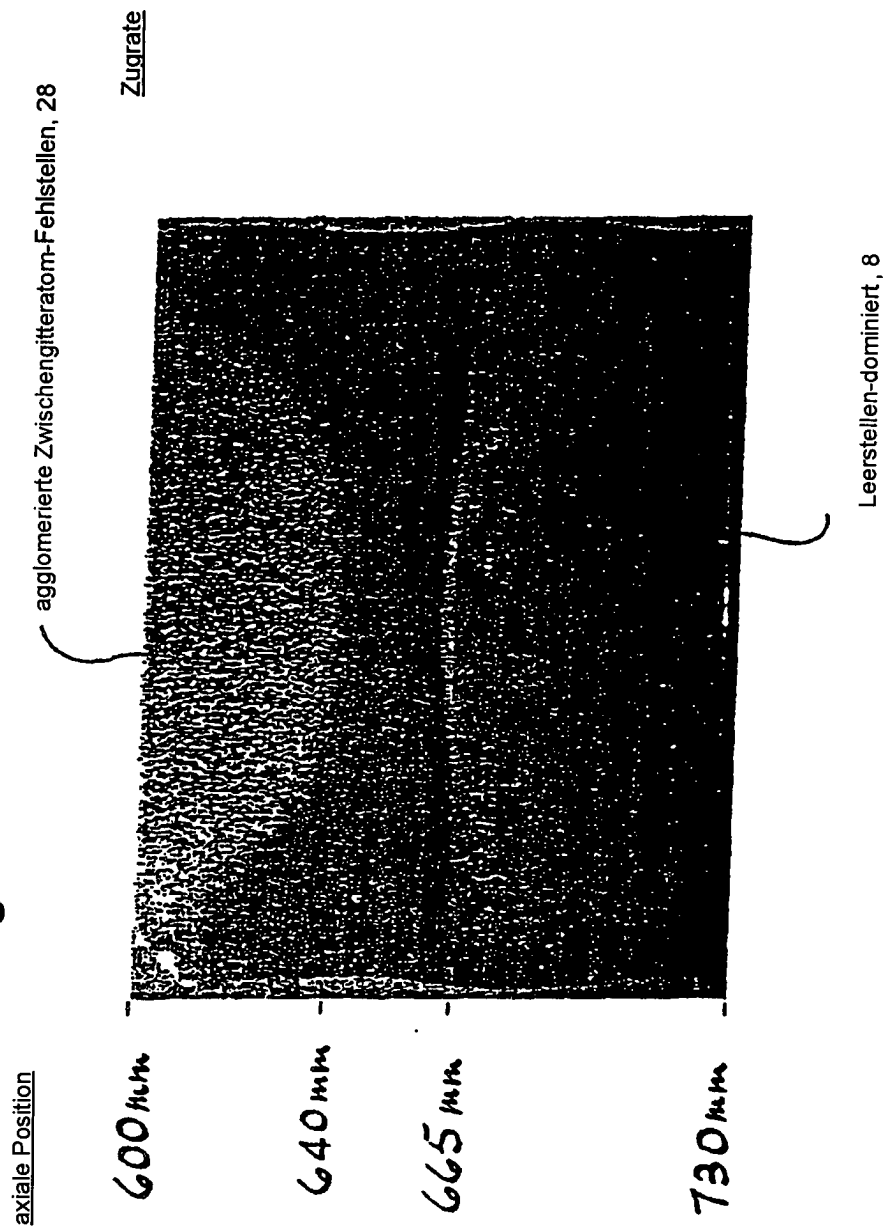


Fig. 24

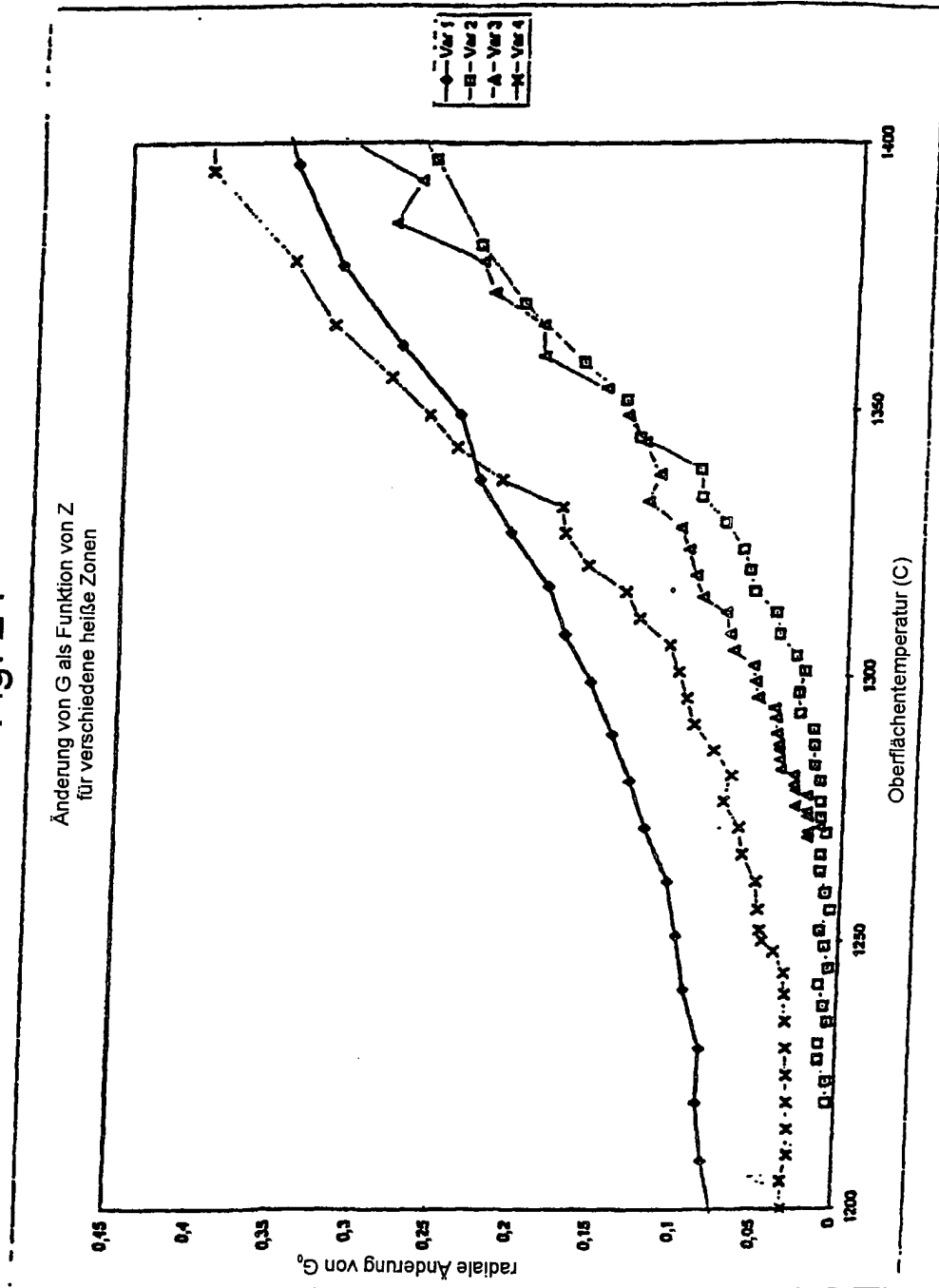


Fig. 25

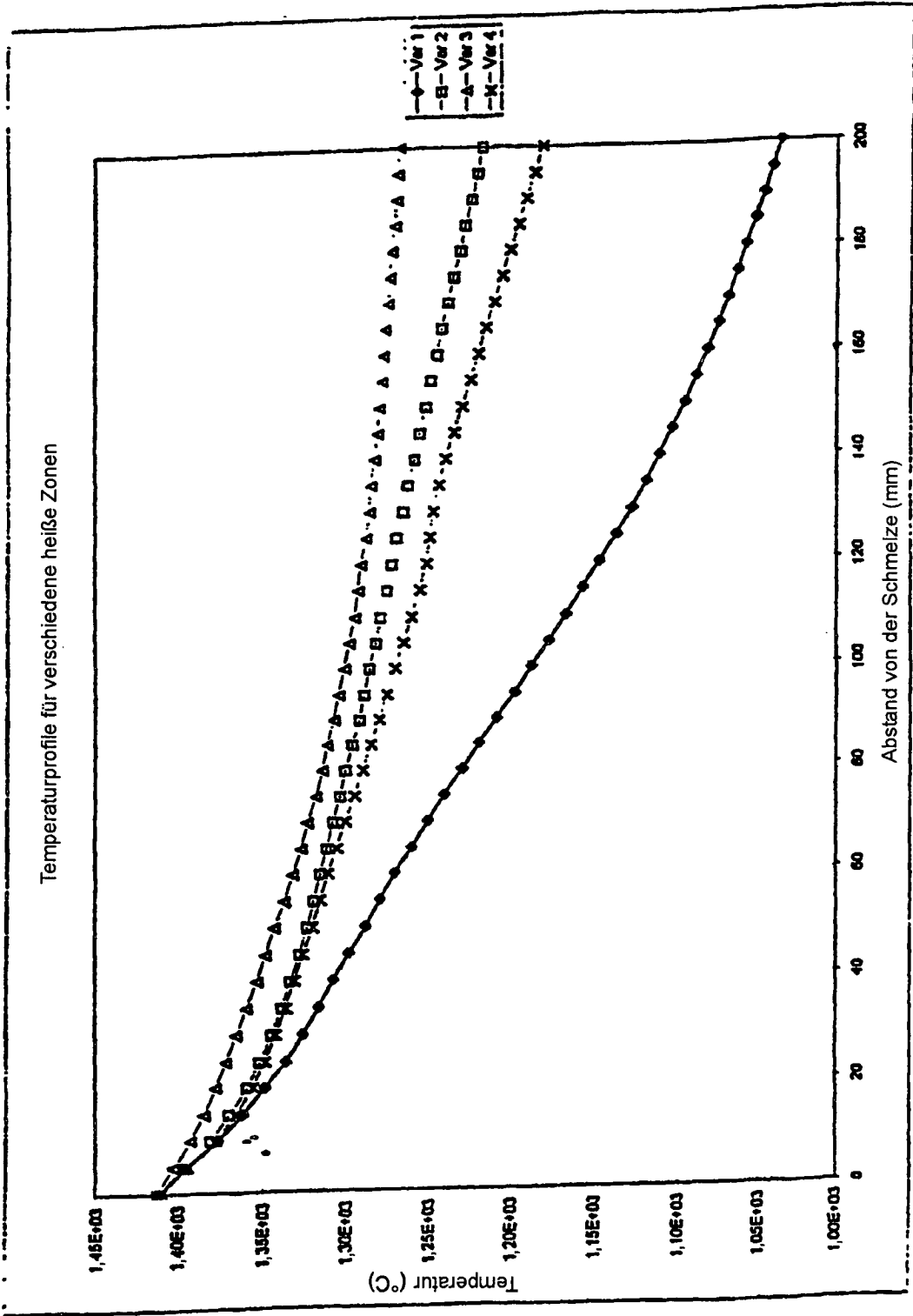


Fig. 26

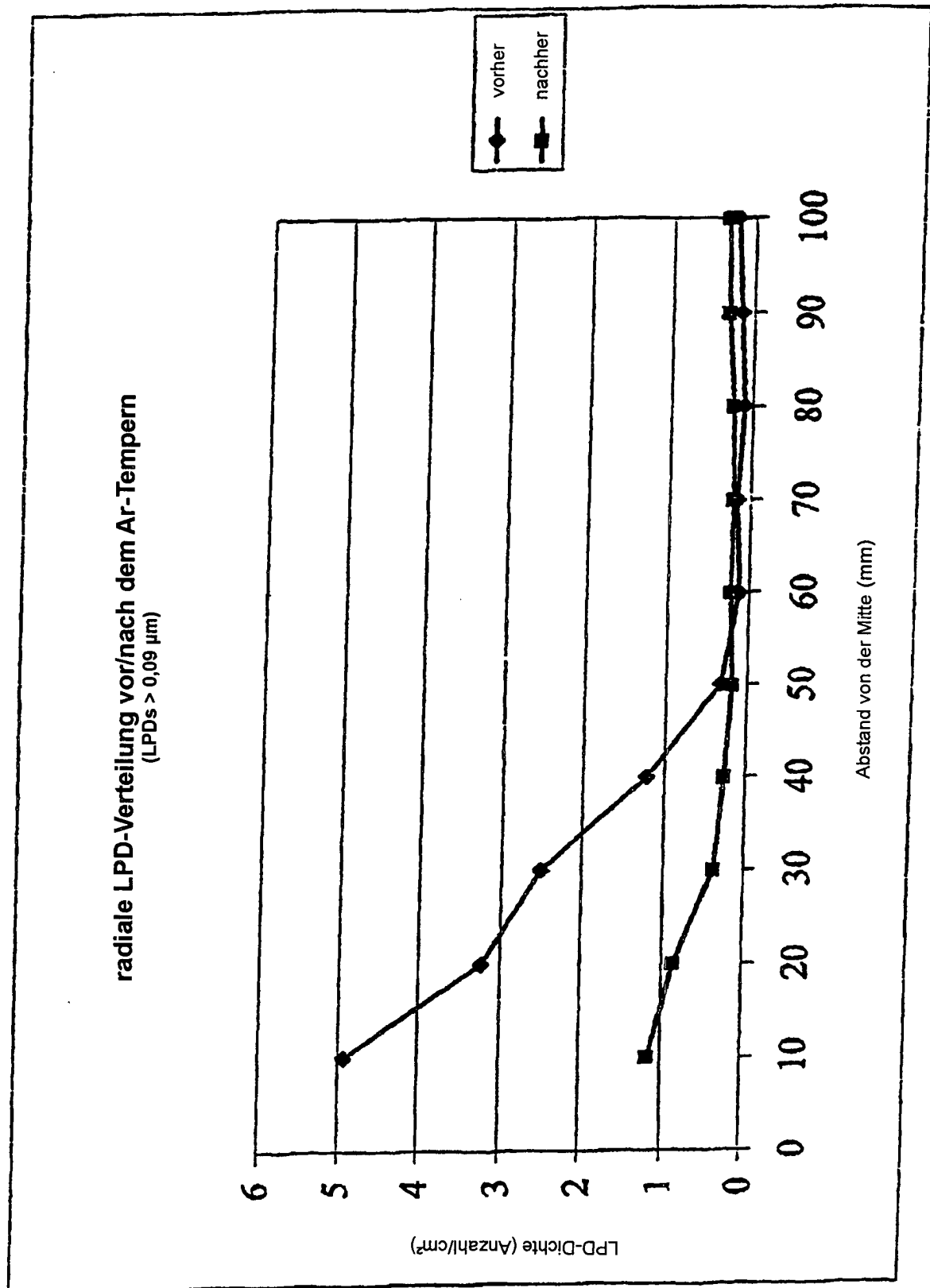


Fig. 27

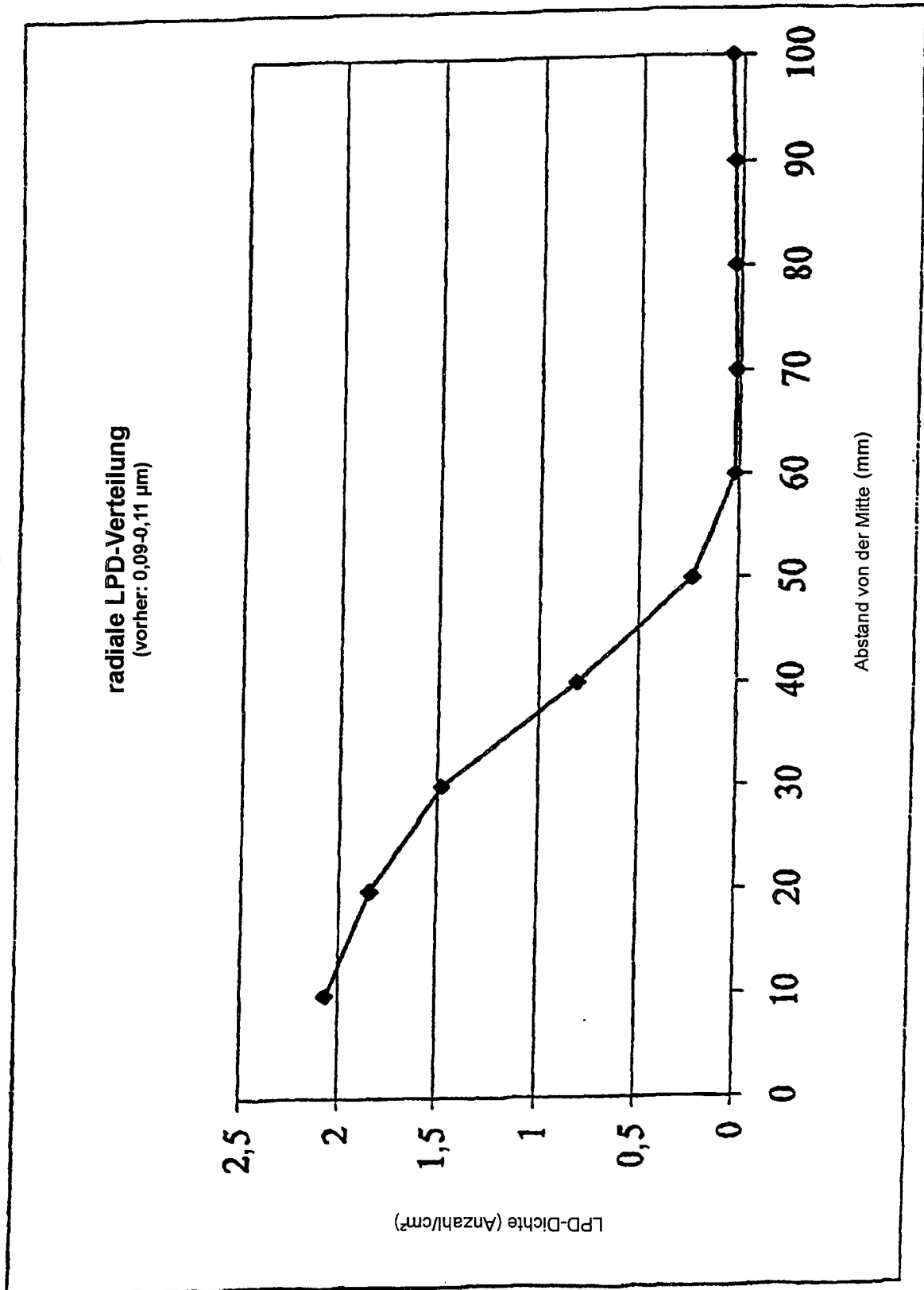


Fig. 28

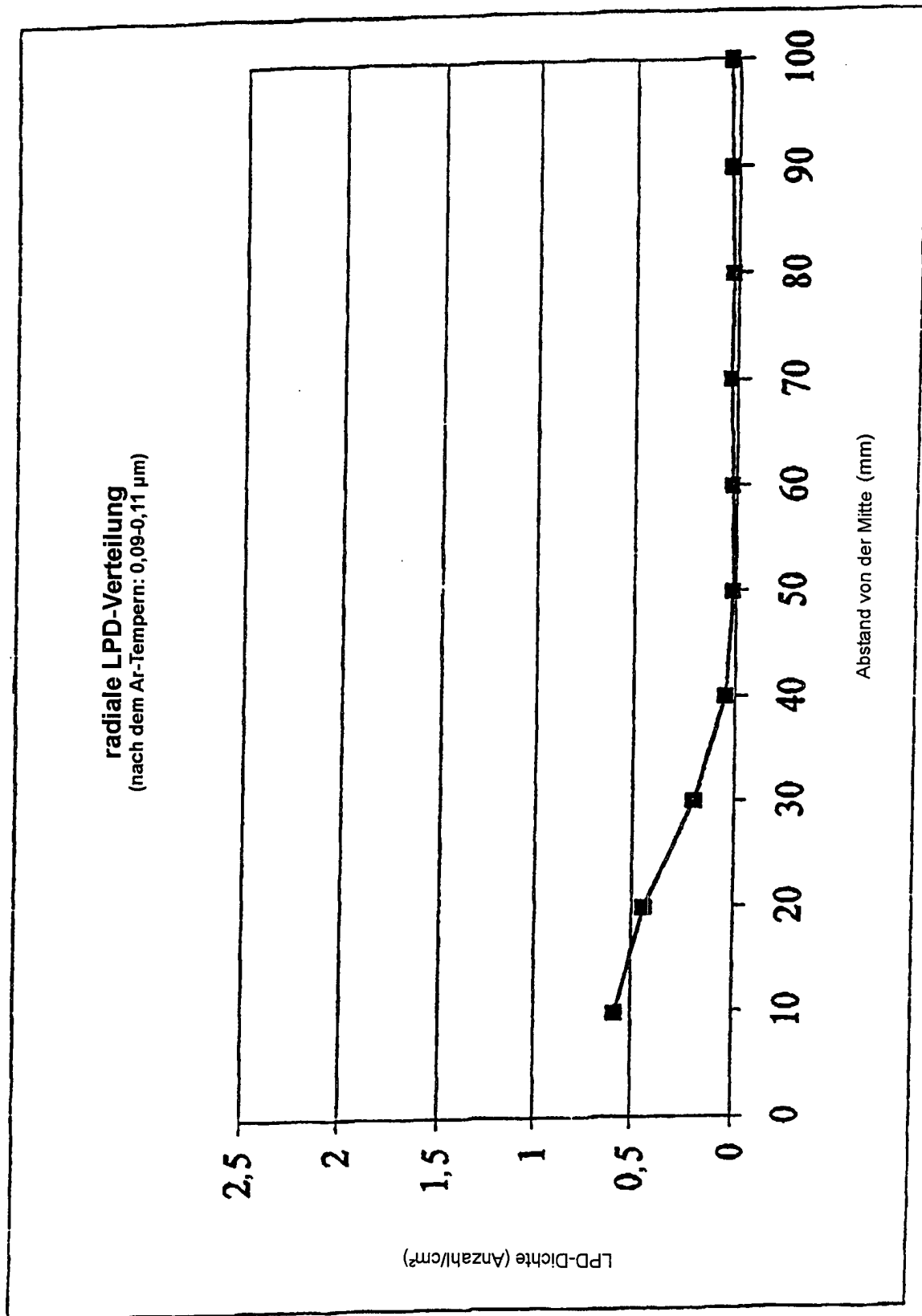


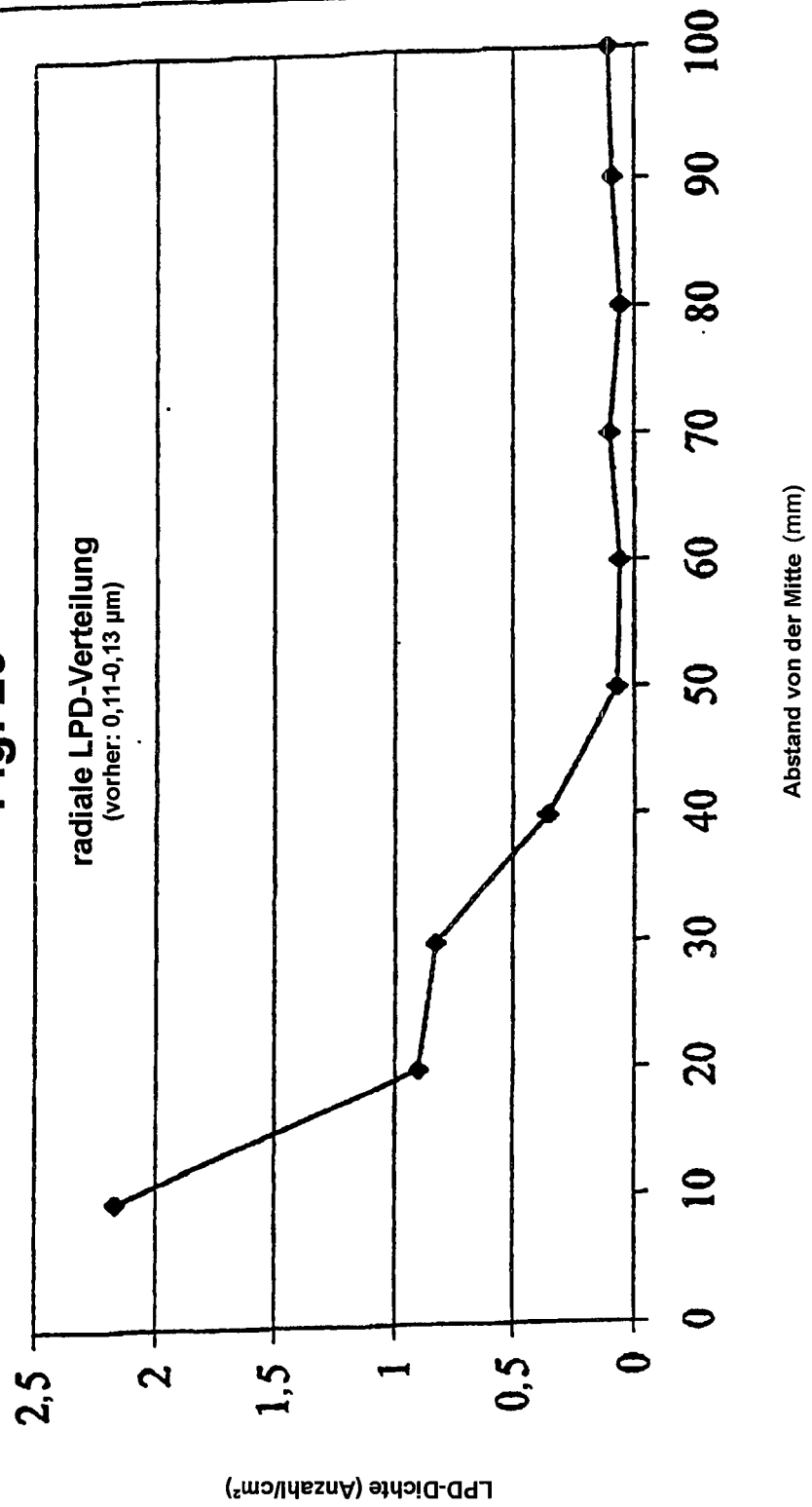
Fig. 29

Fig. 30

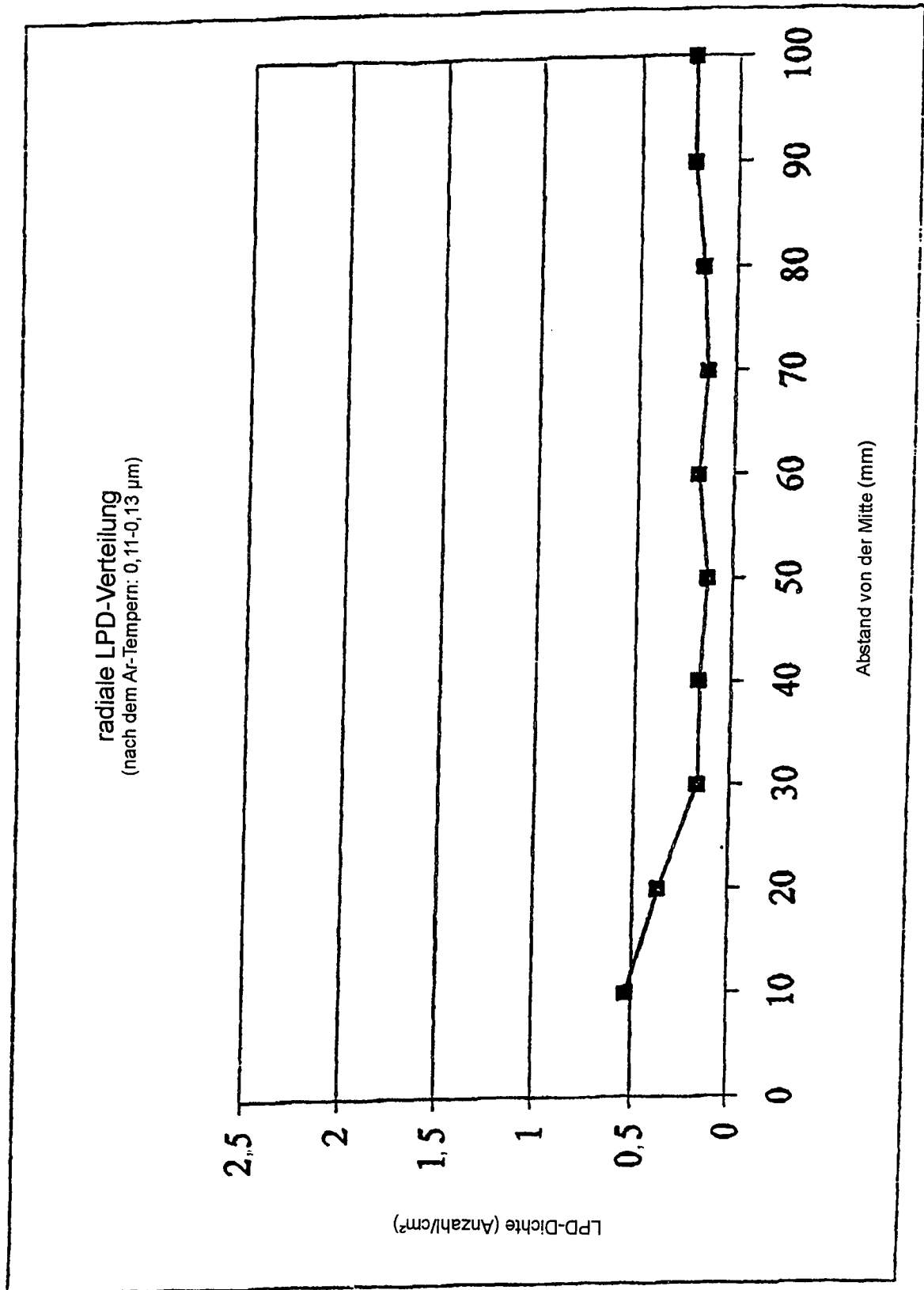


Fig. 31

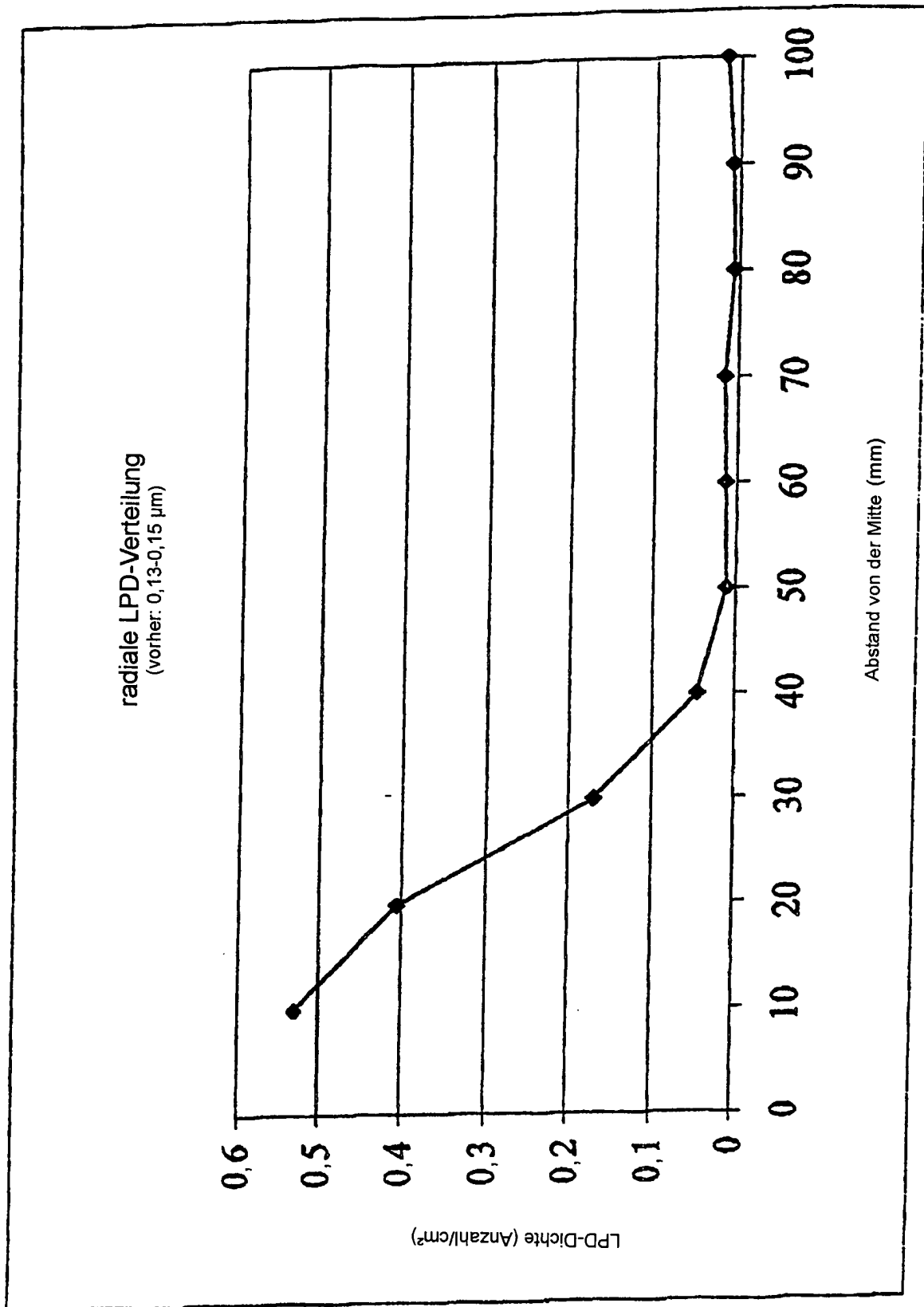


Fig. 32

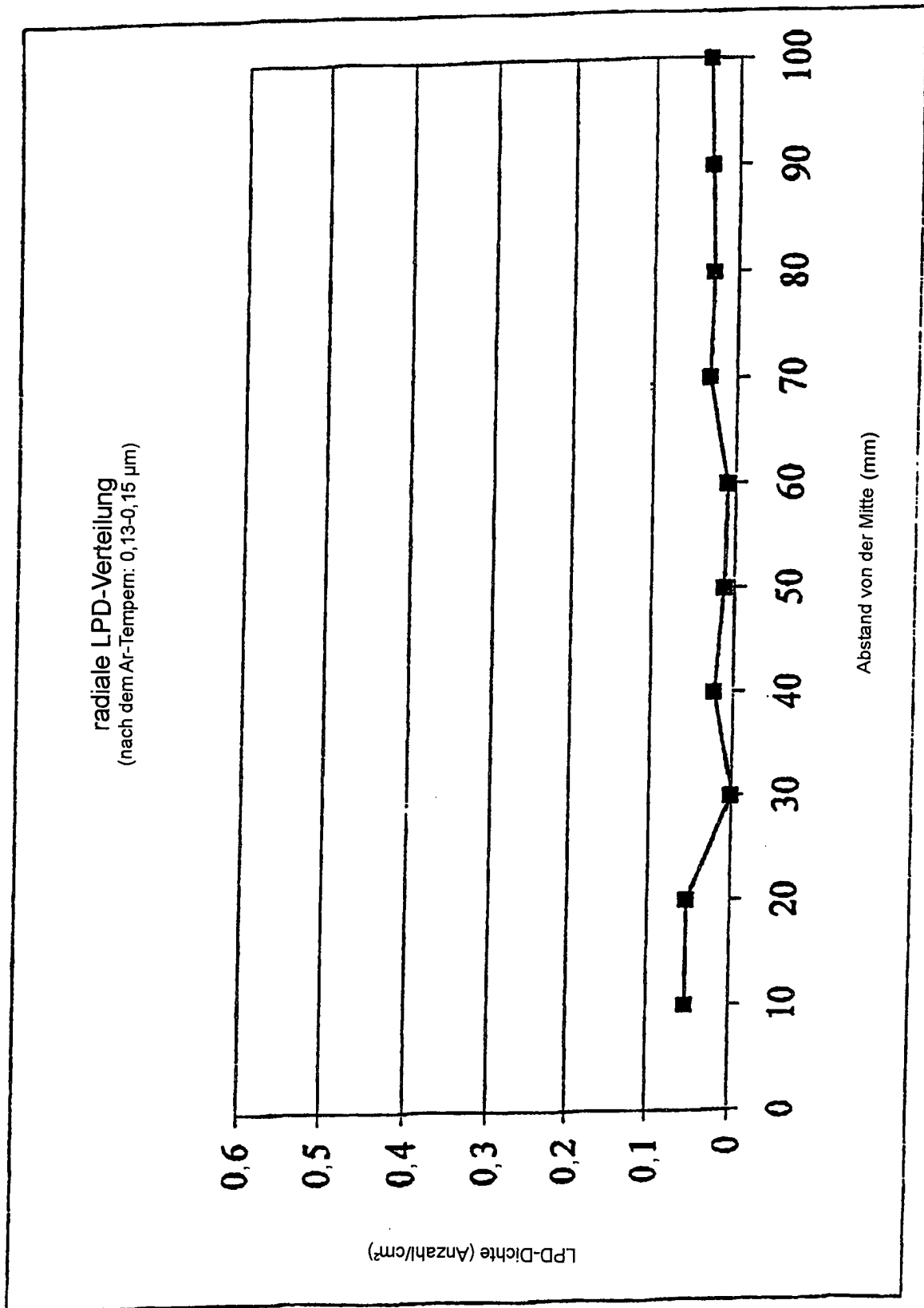


Fig. 33

