

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）研究成果報告書

平成25年 3月31日現在

機関番号：32612
研究種目：挑戦的萌芽研究
研究期間：2011～2012
課題番号：23656094
研究課題名（和文） 超短パルス高出力フラッシュランプ照射による単結晶シリコン加工変質層の完全修復
研究課題名（英文） Subsurface damage recovery of single crystal silicon by ultra-short high-output flash lamp irradiation
研究代表者 閻 紀旺（JIWANG YAN） 慶應義塾大学・理工学部・教授 研究者番号：40323042

研究成果の概要（和文）：超短パルス高出力フラッシュランプを単結晶シリコン機械加工面に照射し、加工変質層の修復を試みた。表層アモルファスシリコンの熔融・再結晶の過程を解明するために分子動力学を用いてシミュレーション解析を行い、レーザ照射との比較を行った。また、シリコン研削面および切削面を実験対象として照射実験を行った結果、加工変質層の修復効果が確認された。一方、問題点として、照射時の衝撃波によるウエハ破壊が観察された。

研究成果の概要（英文）：Ultra-short pulsed high-output flash lamp irradiation was used to recover subsurface damage of silicon surfaces after mechanical machining. The subsurface microstructural changes due to lamp irradiation were experimentally characterized and the damage recovery process was modeled using finite element and molecular dynamics, and compared with laser irradiation. Results demonstrated the possibility of recovering machining damage by flash lamp irradiation. However, due to the shock wave generated by flash lamp pulse, the fracture of silicon wafer occurred.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
交付決定額	3,100,000	930,000	4,030,000

研究分野：生産工学・加工学

科研費の分科・細目：超精密加工

キーワード：超精密加工、加工変質層、単結晶シリコン、フラッシュランプ、レーザ

1. 研究開始当初の背景

単結晶シリコン（以下 Si と記す）は、最も重要な半導体材料であると同時に、優れた赤外線光学レンズ材料でもある。Si の形状創成は、通常、ダイヤモンド工具を用いた切削や研削などの機械加工によって行われている。一方、機械加工による Si 結晶のアモルファス化や転位の発生によって表面内部には数十～数百 nm の加工変質層が形成される。現在主にエッチングや化学的機械研磨で加工変質層の除去が行われているが、変質層の残留や能率の低下、形状精度の劣化そして廃液の

排出による汚染などが問題となっている。

申請者らはレーザ照射の研究において、パルス Nd:YAG レーザ第 2 高調波を Si 切削面に 1 回照射するだけで加工変質層における相変態や転位などを一括して完全な単結晶構造に修復することに成功した。これは、加工変質層部分のレーザ吸収率がバルク領域より著しく高いことを利用し、変質層部分のみを瞬間的に熔融させ、その後無転位のバルク領域を種として液相エピタキシャル単結晶成長させた結果である。一方、最近集積回路のエクステンションと呼ばれる部分の活

性化や石英基板上に堆積されたアモルファス Si 膜の多結晶化において、フラッシュランプアニール技術が用いられている。フラッシュランプ照射はパルスレーザー照射とほぼ同様な熱サイクルを有するため、Si を熔融・再結晶化させることが可能である。しかも、1 回の照射で工作物全面を瞬間的に処理できるのが大きな特徴である。もし、超短パルス高出力のフラッシュランプを Si 工作物全面に瞬間的に照射することでレーザー照射と同様な加工変質層修復を成功させれば、大口径 Si 工作物のより高速な修復が可能ではないかと考えられる。

2. 研究の目的

本研究では、切削・研削によって加工された Si 工作物にパルス制御の超高速フラッシュランプ照射を行い、工作物全面の加工変質層を単結晶構造に修復する可能性を検証し、修復を実現するための照射条件（パルス幅、エネルギー密度、照射距離・角度の影響など）を探索する。また、分子動力学シミュレーションを用いて加工変質層の瞬間的熔融・再成長による表面創成機構を解明する。

3. 研究の方法

(1) 分子動力学解析

フラッシュランプ照射による表層アモルファス Si の熔融・再結晶の過程および下層転位の移動機構を解明するために、分子動力学を用いて Si 加工変質層の解析モデルを作成し、照射による Si 原子の温度上昇・熔融・エピ成長および転位の移動・消滅現象のシミュレーション解析を行った。

まず、シリコン切削の解析を行い加工変質層（アモルファス相と転位層）形成の再現を試みた。古典分子動力学法ではシリコンの原子間ポテンシャルとして Tersoff ポテンシャルが現在広く使用されている。しかし、Tersoff ポテンシャルでは転位が動く時に起こる結合破断が再現できないため、転位生成の表現が困難であることが報告されている。このことから、分子動力学でのシリコン切削時の転位発生の再現は未だ実現されていない。そこで本研究では量子分子動力学法により解析を行った。一般に古典分子動力学法では結晶構造を再現するようにポテンシャルパラメータを決定しているの、結晶の結合角からずれるとパラメータの妥当性がなくなる。一方、量子分子動力学法では電子状態を考慮して原子間力を算出するため、結晶構造でない場合でも精度の高い計算が可能であると考えられる。解析プログラムは、Tight-binding 近似を用いることで第 1 原理分子動力学法に比べて大幅な高速計算を実現した高速化量子分子動力学プログラム colors を用いた。

(2) フラッシュランプ照射実験

Si の機械加工変質層を完全に修復するために、フラッシュランプのパルス幅が十分に小さく、出力が十分に大きい照射装置が必要である。本研究では平均波長約 500nm、パルス幅が 1msec 以下という極めて短い時間での加熱が可能な高速フラッシュランプ照射ユニットをステージに搭載し、簡易型の照射装置を構築した。フラッシュランプ照射による加工変質層の結晶構造変化を究明するために、顕微レーザーラマン分光光度計および透過電子顕微鏡による評価を行った。

4. 研究成果

(1) 加工変質層修復過程の解明

解析モデルとして a-Si/c-Si 界面が (001) 面の構造を用い、シリコン原子 128 個中 32 個を固定した。このときのセルサイズは $10.9 \text{ \AA} \times 10.9 \text{ \AA} \times 21.7 \text{ \AA}$ である。結晶成長時の温度を 1100 - 1700 K の範囲で 100 K ずつ変化させ、各温度で 4 回解析を行った。図 1 に、1500 K における熔融 Si の結晶化の解析結果の一例を示す。時間の経過に伴い固定原子部分の上下両方向から結晶成長が進行しているのが確認できる。

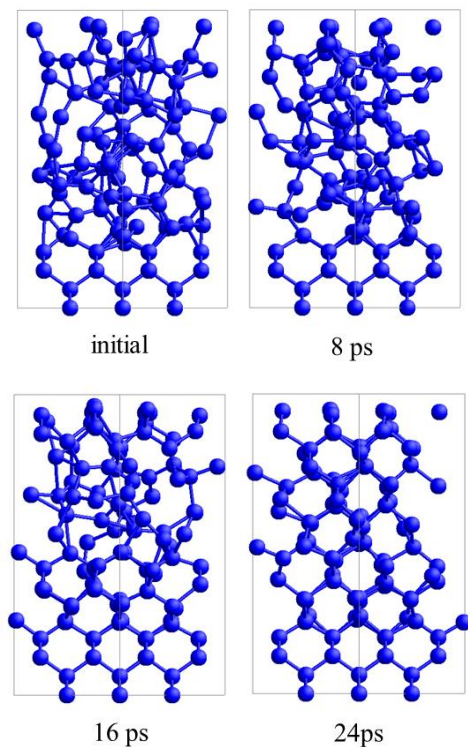


図 1 アモルファス Si の熔融と再結晶

図 2 に、熔融されていない領域の転位の修復の解析結果の一例を示す。500 K で加熱することにより、転位が上方のアモルファス層に向かって移動している。16 ps で転位が完全にアモルファス層に抜け、転位層が単結晶

化していることが確認できる。それに対し、より深い転位においては、500 K以下では転位は移動せず、800 Kまで加熱することで転位が界面付近まで移動し、1000 Kで完全に消滅することがわかった。したがって、転位が深くなると、上昇運動による転位の移動度が低下すると考えられる。その場合、より深い領域まで熔融させる必要がある。

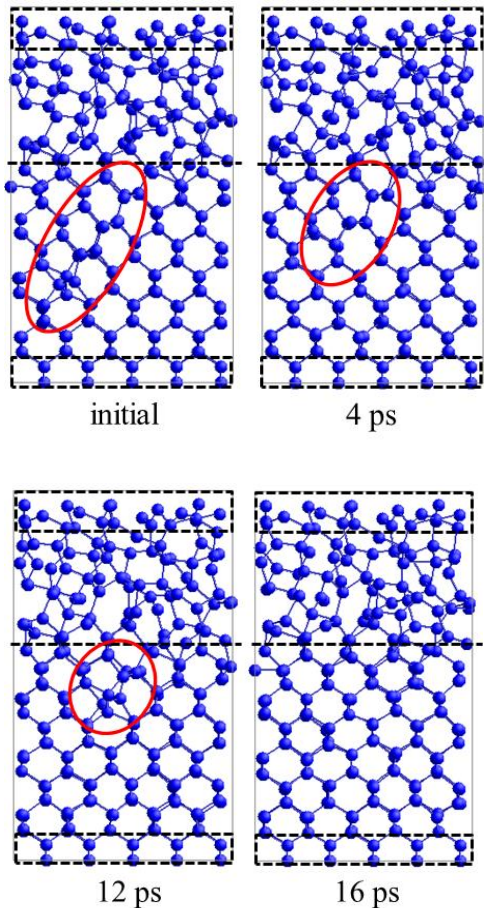
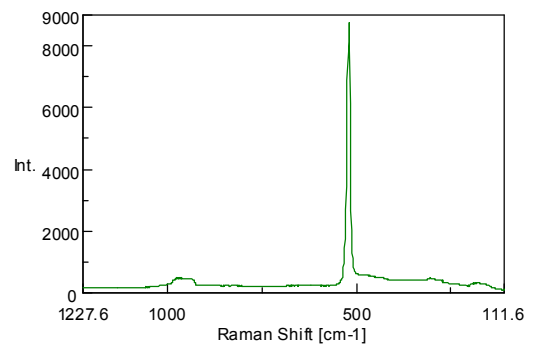


図2 修復過程における転位移動

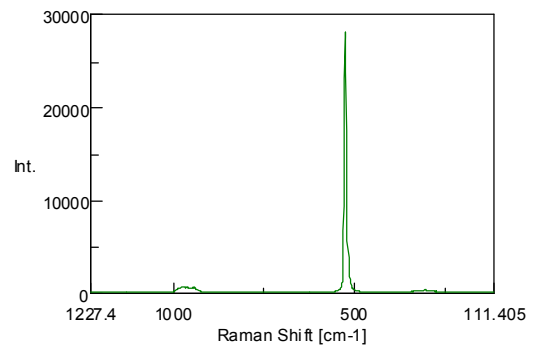
分子動力学解析の結果より、フラッシュランプ照射による加工変質層修復の原理を次のように考察する。すなわち、加工変質層に対してフラッシュランプを照射すると、光吸収率が単結晶より高いアモルファス部分が急激な温度上昇により熔融する。比較的浅い転位は融液/固相界面に向けて移動することで消滅する。一方、深い転位は上昇運動しにくく移動に時間を要する。そのため、十分に高いエネルギーを供給し、転位層が完全に融解し無欠陥単結晶部からの結晶成長による修復が必要である。その後、無転位のバルク領域を種として結晶成長し、アモルファス層が修復される。その結果、結晶構造における欠陥がなくなり、バルク領域と同様な単結晶構造が得られると考えられる。

(2) 加工変質層修復の実験結果

次に、異なる条件下でのフラッシュランプ照射実験を行った。図3に、1例として電圧950V、パルス幅0.99msecの条件でフラッシュランプ照射を行った前後の単結晶Si研削面(3000#砥石)のレーザラマンスペクトルを示す。照射前はアモルファスSi(470 cm^{-1})を含む多数のピークが現れており、研削加工により加工変質層が形成されていることがわかる。一方、フラッシュランプ照射後は単結晶Siのピーク(521 cm^{-1})がより顕著になり、アモルファスSiなどほかの成分がほぼ消滅した。このことから、フラッシュランプ照射による加工変質層修復の効果が確認できた。



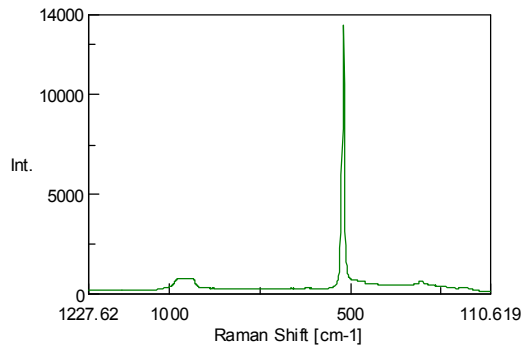
(a)



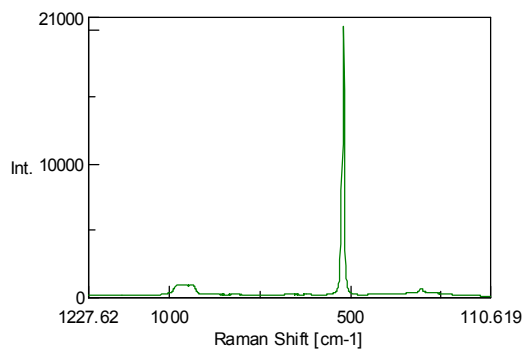
(b)

図3 フラッシュランプ照射前後のSi研削面(3000#)の顕微レーザラマンスペクトル

図4に、フラッシュランプ照射を行った前後の単結晶Si研削面(800#砥石)のレーザラマンスペクトルを示す。図3(a)と同様に、照射前はアモルファスSi(470 cm^{-1})を含む多数のピークが現れており、研削加工により加工変質層が形成されていることがわかる。フラッシュランプ照射後、単結晶Siのピークがより顕著になり、アモルファスSiなどほかの成分が低減した。しかし、図4(b)では、フラッシュランプ照射後も単結晶以外の成分が完全に消えておらず、加工変質層が一部残留していることがわかる。



(a)



(b)

図4 フラッシュランプ照射前後のSi研削面(800#)の顕微レーザーラマンスペクトル



図5 フラッシュランプ照射によるSi研削ウエハの脆性破壊

加工変質層残留の原因として、800#砥石研削において3000#砥石研削に比べて加工変質層がより深く形成されていると考えられる。したがって、それを完全に修復するにはより大きいエネルギー密度が必要であると考えられる。

また、フラッシュランプ照射による加工変質層修復におけるもう1つの問題点として、衝撃波によるウエハの脆性破壊が挙げられる。すなわち、フラッシュランプ照射に伴って、ウエハ全面に対して衝撃波が発生する。エネルギー密度が大きいほど、パルス幅が小さいほど、発生する衝撃波が強くなる。特に薄いウエハや粗い砥石を用いて加工されたウエハの場合は、単結晶Siのへき開面に沿ってウエハの脆性破壊が顕著に現れる。図5にウエハの脆性破壊の様子を示す。(100)面方位のウエハであるため、[110]方向に沿ってへき開破壊が多数発生している。

ウエハの脆性破壊を防ぐために、マスクによる照射面積の制限や照射エネルギー・パルス幅などの最適化が必要と考えられるが、今後の課題とする。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計1件)

(1) J. Yan, F. Kobayashi: Laser recovery of machining damage under curved silicon surface, CIRP Annals - Manufacturing Technology, Vol. 62, No. 1 (2013). In Press. 査読有

〔学会発表〕(計1件)

(1) J. Yan, F. Kobayashi, M. Kubo, T. Kuriyagawa: Atomic subsurface integrity improvement for curved and micro-structured silicon surface by laser irradiation, Proceedings of 12th International Conference of the European Society for Precision Engineering and Nanotechnology, June 4-8, 2012, Stockholm, Sweden, (2012) 147-151.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

閻 紀旺 (YAN JIWANG)

慶應義塾大学・理工学部・教授

研究者番号: 40323042

(2) 研究分担者 なし

(3) 連携研究者 なし