0101 有限要素法による半導体薄膜中の転位密度解析

Dislocation density analysis of semiconductor film by finite element method

○ 原田千都 (九大院) 正 宮崎則幸 (京大)

Chizu HARADA, Graduate Student, Kyushu University, 6-10-1 Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka
Noriyuki MIYAZAKI, Kyoto University

Key Words: Finite element method, GaAs/Si, Film, Crystal anisotropy, Dislocation density

1. 緒言

Si基板上にGaAs膜をヘテロエピタキシャル成長させた薄膜は、SiとGaAsの長所を組み合わせることにより光学/電子デバイスを構成することが可能となる。しかし、SiとGaAsの2物質間で線膨張係数が異なるため、GaAs析出温度からの冷却中に熱応力が発生する。その結果高い転位が蓄えられてしまい、この転位の蓄積により、GaAsからの発光は低く、放射寿命が短くなる。満足な信頼性をもってGaAs/Siデバイスを実現するためには、好ましい膜成長速度において、転位蓄積が制御可能な膜成長テクニックが必要である。

本研究では、膜育成後の冷却プロセスにおける転位密度増殖過程について、クリープ構成式としてHaasen-Suminoモデルを用いた有限要素法解析を行う。解析は結晶異方性を考慮した3次元解析である。

2. 解析方法

2.1 解析概要

解析対象はFig. 1に示すような3次元モデルで、GaAsの形状はOhashi⁽¹⁾らのものと同様とする。また、Si単結晶の(001)面内にGaAs膜を成長させるものとし、これを90度対称とすることで1/4モデルを適用している。有限要素メッシュは節点数6231、要素数1242のものを使用しており、これをFig. 2に示す。解析は、873K(析出温度)から273Kまでの冷却過程で生じる、線膨張係数の違いにより発生する応力・転位について行う。冷却過程については多数回のステップ状の過渡変化として近似しており、その概念図をFig. 3に示す。

(a) 解析対象の温度を下げる。このとき線膨張係数の違いにより応力が発生する。(b) 等温で一定時間クリープ解析をする。このとき応力が緩和される。(c) 823Kから773Kまで下げたときに発生する応力に、残留応力を加える。以上を273Kになるまで繰り返す。

このとき1ステップあたりのグリープ時間と冷却温度を変更することで、冷却速度を調節できる。そこで本研究では冷却速度を変更し、結果の比較検討を行う。

Fig.1 Analysis model

Fig.2 Finite element mesh

2.2 クリープ構成式 (Haasen-Sumino Model)

クリープ構成式として、Haasen-Suminoモデルを用いた。ひずみ速度が、次のように分離できると仮定する。

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^t + \dot{\epsilon}_{ij}^c \quad (1)$$

上式中の $\dot{\epsilon}_{ij}^e$, $\dot{\epsilon}_{ij}^t$, $\dot{\epsilon}_{ij}^c$ はそれぞれ全ひずみ速度、弾性ひずみ速度、熱ひずみ速度、クリープひずみ速度を表すテンソルである。なお、 $\dot{\epsilon}_{ij}^c$ は単軸のクリープ挙動を表わすHaasen-Suminoモデル⁽²⁾⁽³⁾を多軸状態に拡張したものであり、ここでは、結晶内での12個の分解せん断応力全てがクリープひずみに寄与するものと仮定している。このクリープ構成式を以下に示す。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \sum_n f^{(n)} P_{ij}^{(n)} \quad (2)$$

$$f^{(n)} = b k_0 N_m \left(\exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \left(\left| \sigma_{RS}^{(n)} \right| - D \sqrt{N_m} - \tau_d \right)^p \right) \quad (3)$$

$$P_{ij}^{(n)} = \frac{1}{2} \left(\sigma_{RS}^{(n)} / \left| \sigma_{RS}^{(n)} \right| \right) \left\{ v_i^{(n)} b_j^{(n)} + v_j^{(n)} b_i^{(n)} \right\} \quad (i, j = x, y, z) \quad (4)$$

ここで、 N_m は転位密度を表し、添字の(n)はすべり系の番号を、 v_i はすべり面法線の方向、 b_i はすべり方向の単位ベクトルをそれぞれ表す。また、 $\sigma_{RS}^{(n)}$ はすべり系nにおける分解せん断応力である。転位密度の時間変化 $\dot{N}_m$ は次式のように表される。

$$\dot{N}_m = \sum_{n=1}^{12} K k_0 N_m \left(\exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \left(\left| \sigma_{RS}^{(n)} \right| - D \sqrt{N_m} - \tau_d \right)^{(p+\lambda)} \right) \quad (5)$$

Table 1にHaasen-Suminoモデルのパラメータを示す。また、

Fig.3 Cooling process

Table1 Parameters of Haasen-Sumino model

N_m	Mobile dislocation density	m^{-2}
Q	Peierls potential	eV
B	Magnitude of Burgers vector	m
K	Boltzmann's constant	$8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$
T	Absolute temperature	K
K	Material constant	m/N
D	Strain hardening factor	N/m
k_0	Material constant	$m^{2p+1}/N^p s$
τ_d	Drag stress	Pa
P	Material constant	-
λ	Material constant	1.0

Table 2 Properties of GaAs and Si

	T_m	Q	p	b	D	K	k_0
Si	1685	2.2	1.1	3.8×10^{-10}	4.3×10^3	4.1×10^{-4}	8.58×10^{-4}
GaAs	1511	1.5	1.7	4.0×10^{-10}	3.1×10^3	7.0×10^{-3}	1.80×10^{-8}

初期転位密度 N_{m0} の値は、SiとGaAsの格子定数のミスマッチにより生じる転位密度を設定する必要があり、これを $1.2 \times 10^8 m^{-2}$ とした。また、SiとGaAsの線膨張係数 $\alpha [K^{-1}]$ 、Dragg-stress $\tau_d [Pa]$ について以下に示す⁽⁴⁾。

$$\alpha = 3.725 \times 10^{-6} \{1.0 - \exp[-5.88 \times 10^{-3}(T - 124.0)]\} + 5.546 \times 10^{-10} T$$

$$\text{Si: } \log \tau_d = 9.55 + \frac{10170}{T}$$

$$\alpha = 4.68 \times 10^{-6} + 3.82 \times 10^{-9} T$$

$$\text{GaAs: } \log \tau_d = 4.83 + \frac{1382}{T}$$

その他の物性値については、Table2に示す。

3. 解析結果および考察

Fig. 4に、0.5K/secで冷却を行った場合の解析結果を示す。結果は冷却過程終了後のGaAs膜中の分布で、左は残留応力分布、右は転位密度分布を表している。ここで、残留応力は12個の分解せん断応力を合計したもの(σ_{tot})を用いている。また、SiとGaAsの接触界面 $z=0$ とし、膜の厚さを H としたとき、 z 軸方向無次元距離 z/H が0.0071、0.21、0.96である xy 断面での分布を示している。各図原点は膜の中心部分となる。これより、界面付近では高い応力が加わっており、それに対応して転位が蓄積していることが分かる。また界面付近では、側面に応力・転位が集中しているが、表面付近では比較的低転位に保たれている。これは、表面付近で応力が解放されていることによるものであると考えられる。Fig. 5は、膜内の転位密度が最大となる点の冷却過程中的の変化を、各冷却速度で比較したものを示した。これらより、冷却速度が速いほど、転位密度の最大値が大きくなっていることが分かる。なお、やがてグラフが水平になるのは、ある程度転位が増殖すると、転位同士の絡み合いや低温領域に入ることによる硬化の影響が大きくなり、転位が増殖しなくなることを示している。

4. 結言

クリープ構成式としてHaasen-Suminoモデルを用いた半導体薄膜中の転位密度解析として、結晶異方性を考慮した3次元有限要素法解析を行った。このとき、冷却過程終了後のGaAs膜内における残留応力、転位密度の評価、様々な冷却速度による転位密度の増殖過程の変化を評価した。その結果は何れも、Ohashiらが別のクリープ構成式で導いた結果とも類似している。よって、本技法を用いた解析の有効性はこのモデルによって実証された。

Fig.4 Distribution of stress and dislocation density after cooling process

Fig.5 Histories of maximum dislocation density

参考文献

- (1) Ohashi, T., Suppression of Dislocation Accumulation in GaAs Film on Si Substrate by Combination of Impurity Doping and Selective Area Growth, *J.Mater.Res.*, 17(1992), 3032-3038
- (2) Haasen, P., Zur Plastischen Verformung von Germanium und InSb, *Zeit.Phys.*, Vol.167(1962),461-467
- (3) Yonenaga, I. and Sumino, K., Dislocation Dynamics in GaAs Crystal Growth from Melt, *J.Appl.Phys.*, Vol.50(1978),685-693
- (4) Jordan, A.S., An Evaluation of the Thermal and Elastic Constants Affecting GaAs Crystal Growth, *J. Crystal Growth*, Vol.49(1980)631-642