0102 三次元有限要素法による単結晶育成過程における転位密度解析

Dislocation density analysis of single crystal growth process
by three-dimensional finite element method

○木村 優介 (九大院) , 正 宮崎 則幸 (京大)

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

Key Words: Finite element method, Single crystal growth, Dislocation density, Crystal anisotropy

1. 緒言

近年の電子/光学デバイスの発達にともない、これらのデバイス用半導体単結晶の高品質化が求められている。半導体単結晶は主にチョクラスキー(Czochralski, CZ)法により生産されるが、この単結晶育成過程に生じる転位はデバイスの性能に悪影響を及ぼすことが知られており、無転位あるいは低転位バルク単結晶の育成が望まれている。

そこで、我々は過去にHaasen-Sumino modelをクリープ構成式として用いて、単結晶育成過程における転位密度の時間変化を求める軸対称解析を行った。しかし、弾性係数、すべり方向といった結晶異方性を厳密に考慮しようとする、三次元解析が必要となる。本研究では三次元有限要素法を用いたCZ法バルク単結晶育成過程における転位密度解析コードを開発し、育成方向が転位密度に及ぼす影響を取り扱えることをGaAs単結晶の場合の数値解析例により示す。

2. 解析対象

解析対象は直径約6インチのGaAsバルク単結晶とする。結晶育成開始から開始後607分まで、解析対象の形状及び要素数を変化させ解析を行う。解析に使用した有限要素メッシュの一例を、引き上げ開始607分(最終形状)についてFig.1に示す。本解析では20節点アイソパラメトリック要素を用いてモデル化した。

Fig.1. FEM mesh for analysis (607min).

3. クリープ構成式

ひずみ速度が次のように分離できるとする。

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

ここで $\dot{\epsilon}_{ij}^e$, $\dot{\epsilon}_{ij}^s$, $\dot{\epsilon}_{ij}^c$ 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示す。単軸応力状態でのクリープひずみ構成式(Haasen-Sumino Model⁽¹⁾⁽²⁾)を結晶塑性論に基づいて多軸化すると、 $\dot{\epsilon}_{ij}^c$ は下式で与えられる。

$$\dot{\epsilon}_{ij}^c = \sum_{n=1}^{12} f^{(n)} P_{ij}^{(n)} \quad (2)$$

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

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

結晶異方性を厳密に考慮するために、12個のすべり系での分解せん断応力を求め、クリープひずみおよび転位の推進力としている。上式で、添え字の(n)はすべり系の番号を、 v_i はすべり面法線方向の単位ベクトルを、 b_i はすべり方向の単位ベクトルを示す。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。さらに N_m は転位密度で、下式のように表される。

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

上式中の τ_d は転位の増殖を抑えるパラメーターで、混入原子によって発生するdrag-stressを表す。drag-stressの値は混入する原子の種類、量により異なるが、本解析ではSiをドーピングした場合を考え次式を用いた。

$$\tau_d = 10^{(5.83 + 1382/T)} \quad [\text{dyn/cm}^2] \quad (6)$$

なお、 $\left| \sigma_{RS}^{(n)} \right| - D \sqrt{N_m} - \tau_d \leq 0$ の時は $N_m = \dot{\epsilon} = 0$ とする。また、式(5)より明らかなように、このモデルでは初期転位密度 $N_{m0}=0$ の時、常に $N_m=0$ となり転位は発生しない。今回、解析条件として初期転位密度は次のように与えた。

$$N_m = 10^{-3} \quad [\text{cm}^{-2}] \quad (7)$$

その他のHaasen-Sumino modelに基づく構成式中に現れるパラメータをTable1に、それらのGaAsにおける物性値をTable2に示す⁽³⁾。

4. 解析方法

本解析では、総合伝熱解析で与えられた36個の温度ステップの間を細かいサブステップに分割し、全部で179ステップ

Table 1 Parameters in Haasen-Sumino model

N_m	density of moving dislocation	cm^{-2}
Q	Peierls potential	eV
b	magnitude of Burgers vector	cm
k	Boltzman's constant	$8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$
T	absolute temperature	K
K	material constant	cm/dyn
D	strain hardening factor	dyn/cm
k_0	material constant	$\text{cm}^{2p+1}/\text{dyn}^p\text{s}$
τ_d	drag-stress	dyn/cm ²
p	material constant	-
λ	material constant	1.0

Table 2 Material Properties for GaAs

	T_m [K]	Q	p	D	b	K	k_0
GaAs	1511	1.5	1.7	3.1×10^3	4.0×10^{-8}	7.0×10^6	3.59×10^8

とした。各ステップでの形状は外形線を線形補完することによって求め、それぞれの形状、時間に対応する節点の温度も線形補間により与えた。このようにして得られた形状と温度のデータを用いて、各ステップにおいてHaasen-Sumino modelに基づいたクリープ解析を行った。ステップが進むにつれて解析に用いる要素を増やし、形状を大きくすることで結晶の成長を再現した。また、育成過程を連続的に取り扱うために、直前のステップでの解析結果を次のステップの初期状態と置いた。

5. 結果および考察

解析結果として、[001]および[111]方向育成の育成開始後550分での転位密度分布のr-z断面をFig.2に示す。主に外周部に転位の集中が見られ、最も高い値は結晶の肩の部分に表れた。

また、固-液界面から20cm上方でのx-y断面における転位密度分布をFig.3に示す。[001]方向育成では4回対称性、[111]方向育成で3回対称性が表れている。

それぞれの育成方向における $z=20\text{cm}$ での転位密度を半径方向に対してプロットした物をFig.4に示す。この結果より中心部にも集中があり、半径方向にW型の分布を示していることがわかる。実際の単結晶でも転位はW型になることが知られており、この解析結果は実際の分布をよく表していると言える。[001]方向育成と[111]方向育成を比較した場合、後者の方が全体的に転位密度が低い。これは、分解せん断応力という観点で見た時、[111]方向育成の方が低い値になることを示している。

6. 結言

弾性係数およびすべり方向といった結晶異方性を考慮するため、三次元有限要素法を用いたCZ法バルク単結晶育成過程における転位密度解析コードを開発した。

これにより結晶育成開始から形状を時間と共に変化させ解析を行い、転位密度の時間変化及びその分布と引き上げ方向の違いの関係を定量的に評価できることを示した。

Fig.2 Distributions of dislocation density

Fig.3 Distributions of dislocation density at 20cm above the solid-liquid interface

Fig.4 Distributions of dislocation density across radius

参考文献

- (1)Haasen,P.,Zur Plastischen Verformung von Germanium und InSb, *Zeit.Phys.*, Vol.167, 461-467,1962.
- (2)Yonenaga, I. and Sumino, K. , Dislocation Dynamics in GaAs Crystal Growth from Melt , *J. Appl. Phys.*,Vol.50,685-693,1978.
- (3)Maroudas,D. and Brown,R.A, On the Prediction of Dislocation Formation in Semiconductor Crystals Grown from the Melt,*J.Crystal Growth*,108,399-415,1991