610 化合物半導体単結晶のインゴットアニール過程における転位密度評価解析 Dislocation Density Analysis of Compound Semiconductor Single Crystal during Ingot Annealing Process

○学 松本 直樹 (京大院) 正 宮崎 則幸 (京大)

Naoki MATSUMOTO, Kyoto University, Yoshida-Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto, Japan
and Noriyuki MIYAZAKI, Kyoto University

1. 緒言

InP, GaAs 等の半導体ウェハ製造工程は、単結晶育成、アニール、ウェハ加工の3工程に大別される。その中でアニールは単結晶の電気特性の改善に不可欠な工程である。しかし、アニール過程において、加熱・冷却時に結晶内部の温度差により熱応力が発生し、転位が増加してデバイスの性能に悪影響を及ぼすことが予想される。

高温域の固体では、時間に依存した変形現象であるクリープ現象が顕著になる。半導体単結晶のクリープ構成式としては、Haasen-Alexander-Sumino モデル⁽¹⁾(以降、HAS モデルと略称する)が知られており、クリープひずみ速度と転位密度が相互に関連づけられている。

本研究では、結晶異方性や転位の消滅効果を考慮し、さらに刃状転位、らせん転位といった転位の種類も考慮に入れて、より現実に即した転位密度解析プログラムの開発を行った。さらに、開発した解析プログラムを用いて、InP 単結晶のインゴットアニール過程での転位密度評価解析を行った。

2. 解析方法

2.1 インゴットアニール解析の概略 まず、アニール炉内に置かれた単結晶内部の温度分布の時間変化を、適当な解析コードを用いて非定常熱伝導解析を行うことにより求める。このようにして求められた温度分布を入力データとして用いて、著者らの研究グループが開発した解析コードにより、インゴットアニール中の単結晶内部の転位密度分布とその時間履歴を求める。解析対象は、直径101.6mmのInP単結晶モデルである。熱伝導解析および転位密度解析に用いた有限要素モデルをFig.1に示す。両解析とも3次元の有限要素法によって行った。要素数は540、節点数は2443である。Fig.2に与えた表面温度条件を実線で、InP単結晶内部の最大温度差の時間履歴を破線で示す。

2.2 転位密度解析 インゴットアニール過程で結晶内部に生じる温度分布により熱応力が発生し、それにより既存転位が増殖する可能性がある。このようなアニール過程における転位密度変化のシミュレーション手法を述べる。まず、ひずみ速度が次のように分離できると仮定する。

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

上式中の $\dot{\epsilon}_{ij}^e, \dot{\epsilon}_{ij}^l, \dot{\epsilon}_{ij}^c$ 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、 $\dot{\epsilon}_{ij}$ は単軸のクリープ挙動を表すHAS⁽¹⁾を多軸状態に拡張したものである。

InP や GaAs といった fcc 単結晶においては、結晶格子中に4個のすべり面とそれぞれの面に対して3個のすべり方向、すなわち合計12個のすべり系が存在する。これらのすべり系での分解せん断応力をテンソル変換の手法を用いて求めることができる。こうして計算される12個の分解せん断応力がクリープひずみおよび転位増殖の推進力であると考える。すなわち、

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

Fig.1 Finite element mesh

Fig.2 Temperature on crystal surface and maximum temperature difference

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

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

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

式(2)から(5)において、添字 (n) はすべり系の番号を表し、 $\sigma_{RS}^{(n)}$ は分解せん断応力である。また、 $P_{ij}^{(n)}$ はSchmid テンソル、 $v_i^{(n)}, b_i^{(n)}$ はそれぞれすべり面の外向き法線方向およびすべり方向の単位ベクトルである。式(5)は有効せん断応力であり、値が正のときのみに定義され、クリープひずみや転位の増殖に寄与すると考える。 $D \sqrt{N_m}$ は転位同士の相互作用による転位増殖の抑制効果を表している。 τ_d はdrag stressと呼ばれ、不純物原子により転位の増殖が妨げられる効果を表す。 N_m は動転位密度であるが、大きなひずみは生じないので、 N_m を全転位密度とみなすことができる。Table 1に、HASモデルに基づく構成式に用いられるパラメータとInP単結晶の場合のそれらの値を示す。

すべり系 n の転位の増減速度 $\dot{N}_m^{(n)}$ は次式で表される。

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

式(6)に解析時間ステップ Δt をかけたものを1ステップ前の時刻のすべり系 n の転位密度 $(N_m^{(n)})_{t-\Delta t}$ に加えて、現時刻のすべり系 n の転位密度を示す。 $(N_m^{(n)})_t$ とする。すなわち、

$$(N_m^{(n)})_t = (N_m^{(n)})_{t-\Delta t} + \dot{N}_m^{(n)} \Delta t \quad (7)$$

また、全すべり系の転位密度がその時刻での N_m である。

$$N_m = \sum_{n=1}^{12} \left| (N_m^{(n)})_t \right| \quad (8)$$

2.3 クリープ構成式の改良 式(6)は転位の消滅効果は考慮されていない。そこで、転位の消滅効果を考慮した次の3通りの構成式を検討した。

1 つめは、式(9)のように、転位の増殖速度と転位密度に符号を持たせる改良である。

$$\dot{N}_m^{(n)} = \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{\sigma_{RS}^{(n)}} \right) K k_0 N_m \left(\exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \right) \tau_{eff}^{(n)p+\lambda} \quad (9)$$

Table 1 Parameters in Haasen-Sumino model and their values for InP single crystal

N_m	mobile dislocation density	m^{-2}
Q	Peierls potential	1.0 eV
b	magnitude of Burgers vector	4.2×10^{-10} m
k	Boltzmann's constant	8.617×10^{-5} eV/K
T	absolute temperature	K
K	material constant	1.2×10^{-2} m/N
D	strain hardening factor	3.0 N/m
k_0	material constant	1.36×10^{-8} m ^{2p+1} /N ^p s
τ_d	drag stress	Pa
p	material constant	1.4
λ	material constant	1.0

上式右辺の最初の()の項によって、分解せん断応力の向きに応じて転位密度の変化速度に符号を持たせる。変化速度が正ならば正の向きの転位が、負ならばその逆向きの負の転位が増殖すると考える。これをモデル A と呼称する。

2 つめは、転位の種類を考慮した改良である。式(9)は、転位密度の変化速度が N_m すなわち全すべり系の転位密度の大きさの和に依存しているの、モデル A は交差すべりが発生して 1 つの転位が他のすべり系に移動し得るらせん転位のみを想定したモデルであると考えられる。次に、式(10)のような構成式を考える。

$$\dot{N}_m^{(n)} = \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{\sigma_{RS}^{(n)}} \right) K k_0 \left| N_m^{(n)} \right| \exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \tau_{eff}^{(n)p+\lambda} \quad (10)$$

この式は、転位密度の変化速度が $|N_m^{(n)}|$ 、すなわちすべり系 n の転位密度の大きさのみに依存しているの、交差すべりが発生せず一つの転位が他のすべり系に移動しない刃状転位のみを想定したモデルであると考えられる。このモデルをモデル B と呼称する。さらに、実際の転位は、刃状転位あるいはらせん転位だけであるよりは両者が混在していると考えるべきである。そこで、式(9)と式(10)の中間的なモデルとして、式(11)を提案し、モデル C と呼称する。

$$\dot{N}_m^{(n)} = \left(\frac{\sigma_{RS}^{(n)}}{\sigma_{RS}^{(n)}} \right) K k_0 \frac{N_m + |N_m^{(n)}|}{2} \exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \tau_{eff}^{(n)p+\lambda} \quad (11)$$

3 つめは、式(12)で表されるすべり系どうしの転位の相互作用を考慮した Gondet モデル⁽²⁾の導入である。

$$\left. \begin{aligned} \tau_{eff}^{(n)} &= \left| \sigma_{RS}^{(n)} \right| - D \sqrt{N_m^{(n)}} - D^* \sum_{k \neq n} \sqrt{N_m^{(k)}} \quad , D^* = 1.5D \\ \dot{N}_m^{(n)} &= \dot{N}_m^{(n)+} - \dot{N}_m^{(n)-} \\ \dot{N}_m^{(n)+} &= \left(K + K^* \sum_{k \neq n} N_m^{(k)} \right) k_0 N_m^{(n)} \exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \tau_{eff}^{(n)p+\lambda} \\ \dot{N}_m^{(n)-} &= A N_m^{(n)2} v^{(n)2} \quad , \quad v^{(n)} = k_0 \exp \left(\frac{-Q}{kT} \right) \tau_{eff}^{(n)p} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

定数 K^* , A は、いろいろな値を入れて解析してみて、解析結果が実験値と比べて上でふさわしいと思われる値を採用している。また、有効応力 $\tau_{eff}^{(n)}$ にも相互作用を考慮している。Gondet モデルに用いられるパラメータは、InP 単結晶において次のとおりである。

$$K^* = 1 \times 10^{-12} \text{ m}^3/\text{N} \quad , \quad A = 5 \times 10^{-7} \text{ s} \quad (13)$$

3. 解析結果および考察

モデル A, B, C および Gondet モデルの場合について、最大転位密度の時間変化の比較を Fig.3 に示す。モデル A, B, C では、加熱過程終了直後の分解せん断応力の向きがそれ

Fig.3 Time variations of the maximum dislocation density (Comparison among model A, model B, model C and Gondet model)

Fig.4 Distributions of dislocation density at cross sections obtained from model C

までの向きと逆方向に生じるために、転位密度の減少が認められる。らせん転位のみを考慮したモデル A は、刃状転位のみを考慮したモデル B よりも大きな転位密度を与える。刃状転位では交差すべりは生じないの、らせん転位では交差すべりによって転位がすべり系間を移動し得るため、より多くの転位増殖源が存在しうると考えられる。モデル A, B の中間的なモデルであるモデル C はモデル A, B のほぼ中間の転位密度を与えていて、アニール過程終了後の転位密度に関して Gondet モデルに近い結果を与える。Gondet モデルでは、転位の消滅速度の式におけるパラメータの値は実験結果に合うように決められているので、このモデルは現実に即した結果を与えていると考えられる。Gondet モデルは InP 単結晶の場合にしかパラメータの最適化は行われていない。一方、HAS モデルは、代表的な半導体単結晶についてそのパラメータが同定されている。HAS モデルを基本としたモデル C が、InP 単結晶について Gondet モデルに近い結果を与えることは、HAS モデルのパラメータが同定されている他の単結晶についてもモデル C を用いることができることを示唆している。

モデル C を用いた解析結果として、アニール終了時における、結晶底面から 2.9mm(底面付近)と 43.4mm(中央付近)の 2 つの断面における転位密度分布を Fig.4 に示す。底面付近では断面中心部で、中央付近では断面周辺部で転位密度が大きい。本研究では[001]育成の場合の解析を行ったため、いずれの断面においても 4 回対称性が確認できる。

4. 結言

転位の消滅効果を考慮して HAS のクリープ構成式を改良した。混合転位を想定したモデル C によって、より現実に即した転位密度解析が行えた。このモデルは InP 単結晶以外にも、HAS モデルのパラメータが同定されている他の単結晶についても適用できることが期待される。

参考文献

- (1)K.Sumino, I Yonenaga, *Defect Interaction and Clustering in Semiconductors Solid State Phenomena*, 85-86 (2002) 145-176
- (2)S.Gondet et al, *J. Crystal Growth*, 252 (2003) 92-101