単結晶シリコンの疲労とシャフルセット転位

Correlation between the fatigue of single-crystal silicon and shuffle-set dislocation

〇正 泉 聡志 (東大工)

Satoshi Izumi, 7-3-1 Hongo Bunkyo-ku Tokyo JAPAN

Single crystal silicon is known to be subject to fatigue fracture on MEMS applications. However, underlying mechanism is still to be discussed. We discuss the relationship between the fatigue and shuffle-set dislocation in silicon. Recently, we have for the first time found that a shuffle-set dislocation was nucleated in a semiconductor silicon device that was subject to severe thermal processing. Also, we have investigated the shear stress dependences of the activation energies of shuffle-set and glide-set dislocation nucleation from a sharp corner in silicon using theoretical reaction pathway analysis. Two curves have a cross point, which means that shuffle-set dislocation is likely nucleated at high stress and low temperature (experimental condition) and glide-set dislocation is likely nucleated at low stress and high temperature. Our result explains the mechanism of shuffle-set dislocation nucleation.

Key Words: dislocation; semiconductors; silicon; shuffle-glide

1. 緒言

単結晶シリコンで作られた MEMS は、ICP-RIE エッチングなどによる表面のダメージを起点として脆性破壊することが知られているのと同時に⁽¹⁾、疲労破壊が生じることが数多くの研究者により実験的に示されている⁽²⁾。しかしながら、単結晶の脆性材料の疲労のメカニズムについては、理論的には全く解明されていない。

一方、シリコンの転位は、Glide-set 転位が高温で発生し成長することが知られてきた。しかしながら、近年、低温・高応力下で Shuffle-set 転位が発生することが実験的に明らかになり、いわゆる Shuffle-Glide 論争が再燃している。

本講演では、イオンインプラントレーションダメージを受けた単結晶シリコンから Shuffle-set 転位が観察された事例と、Shuffle-set 転位と Glide-set 転位の転位核生成の活性化エネルギーの理論解析 (反応経路解析) の例を紹介する。低温・高応力下では、Shuffle-set 転位が生成することが理論的に明らかになり、実験結果を説明できた。単結晶シリコンの疲労の原因が Shuffle-set 転位の発生にあると提案する。

2. 半導体シリコンデバイスの Shuffle-set 転位⁽³⁾

図1のようなラインアンドスペースの SiN パターン (厚さ 250nm, 真性応力 1.6 GPa) に、P を加速電圧 30keV, ドーズ量 5.0×10^{14} atoms/cm² でインプラントレーションを室温で行い、950 °C で1秒アニールした。その後、サンプルを、TEM 観察したところ、図1のように転位の生成が観察された。Kikuchi マップによる解析により、本転位は、拡張しておらず、Shuffle-set 転位だと考えられる。

また、このサンプルを 500°C で 30 分アニールすると、Shuffle-set 転位は Glide-set 転位に遷移した。

発生した Shuffle-set 転位は、低温のインプラントレーション工程で発生し、950°C の1秒のアニールで進展、その後、500°C のアニールで Glide-set 転位に構造遷移したのと考えられる。

MEMS の ICP-etching は、イオンインプラントレーションと同様に、イオンによるダメージを単結晶シリコンにもたらすものであり、類似の現象が生じ、転位が導入されている可能性がある。導入された転位は、低温・高応力下でゆっくりと進展・組織化し、湿度による腐食を助長し、強度低下につながるというメカニズムをここでは提案する。

3. 半導体シリコンデバイスの Shuffle-set 転位⁽⁴⁾

図2のような90度のコーナーを有する単結晶シリコンの

転位の核生成の活性化エネルギーを原子シミュレーションによる反応経路解析により明らかにした。Shuffle-set 転位と Glide-set 転位の活性化エネルギーの応力依存性を図3に示す。低応力側では、Glide-set 転位の活性化エネルギーが低く、高応力側では Shuffle-set 転位の活性化エネルギーが低く、交差する点を持つことがわかる。従って、高温では、低応力で Glide-set 転位が発生し、低温では高応力で Shuffle-set 転位が発生すると考えられる。これは、近年の Shuffle-set 転位と Glide-set 転位の実験結果を説明することができる。

次に、すべり面に分解せん断応力と等しい、圧縮応力を負荷した条件での活性化エネルギーを図4に示す。Glide-set 転位は変化がないが、Shuffle-set 転位の活性化エネルギーは大きく低下することがわかり、圧縮応力下では、Shuffle-set 転位が出やすいことがわかった。これは、インプラントレーションやインデンテーション下で、Shuffle-set 転位が観察されている事実を説明できる。

通常、金属結晶などは、すべり面への圧縮応力は転位の生成を抑制する効果があることが知られており、この結果は、ダイヤモンド構造のシリコン特有の現象である。

4. 結論

イオンインプラントレーションによるダメージを受けた単結晶シリコンは低温・高応力下で Shuffle-set 転位を生成する。これは、転位の核生成の反応経路解析の結果と一致する。単結晶シリコンの疲労のメカニズムとして、エッチングダメージにより導入された転位が、低温・高応力下でゆっくりと進展・組織化し、湿度による腐食を助長し、強度低下を引き起こすモデルを提案する。

Fig. 1 SiN sample pattern and bright-field view of a nucleated dislocation⁽³⁾.

Fig. 2 Simulation model for reaction path sampling. Resolved shear stress is applied to a $(111)[11\bar{2}]$ slip system. Periodic boundary conditions are applied in all three directions. A view of the holes is illustrated on the right⁽⁴⁾.

Fig. 3 Dependences of activation energy on shear stress for the glide-set and shuffle-set dislocation nucleation from a sharp corner in silicon⁽⁴⁾.

Fig. 4 Dependence of the activation-energy curve on compressive stress on the slip plane. Cross point C moved to C'⁽⁴⁾.

引用文献

- (1) 泉聡志, 久保寺裕典, 酒井信介, 宮島博志, 村上賢治, 磯川俊彦, 材料 Vol.56 No.10 (2007) pp.920-925
- (2) 泉聡志, 門脇政幸, 酒井信介, 上田護, 鈴木敦, 材料 55-3 (2006) pp.290-294.
- (3) S. Izumi, H. Ohta, C. Takahashi, T. Suzuki, H. Saka, Philo. Mag. Lett., Vol. 90-10 (2010), pp. 707-714.
- (4) K. Shima, S. Izumi and S. Sakai, J. Appl. Phys. in press.