

卒業論文

半導体素子の二次元転位動力学解析

p.1 ~ 41 完

平成 14年 2月8日 提出

指導教官 酒井 信介 教授

00255 三宅 威生

目次

第1章	序論	4
1.1	背景	4
1.2	本研究の目的	5
第2章	基礎理論	6
2.1	転位概念	6
2.1.1	結晶欠陥	6
2.1.2	転位	6
2.2	転位に働く力	7
2.2.1	外部応力による影響	7
2.2.2	転位同士の相互作用	8
2.2.3	界面の影響	9
第3章	手法	10
3.1	解析対象	10
3.2	モデルの設定	11
3.3	シミュレータの作成	12
3.3.1	転位に働く力	12
3.3.2	転位の発生	14
3.3.3	転位の運動	17
3.4	解析条件	17
第4章	結果	18
4.1	シミュレーション	18
4.2	温度の変化	21
4.3	酸素濃度の変化	22
第5章	考察	23
5.1	実験との対比	23
5.2	線張力の影響	24
5.3	酸素濃度の影響	25
5.4	二次元モデルの限界	28
第6章	結言	29

付録 A 任意点の応力値の算出	30
A.1 アイソパラメトリック要素	30
A.2 任意点の応力	31
付録 B 三次元転位動力学	33
B.1 手法	33
B.1.1 転位に働く力	34
B.2 今後の課題	36
参考文献	38
あとがき	39
謝辞	39
著者近影	40

第1章 序論

1.1 背景

シリコン半導体素子の高集積化、高機能化に伴い半導体製造過程においてシリコン基板上には多様な形状の多数の薄膜が形成される。通常の金属中には、原子配列の局所的な乱れが線状に連なる転位と呼ばれる欠陥が $\rho = 10^9 \sim 10^{11} m^{-2}$ 程度含まれている。(ρ は転位密度を表し、単位体積の結晶中に含まれる転位の全長 $[m/m^3] = [m^{-2}]$ と定義される。) この転位が半導体素子内に存在すると、電流のリーク源となり素子の電気特性を低下させるため、半導体用のシリコン基板は初期状態では無転位で供給される。しかしながら実際の半導体製造過程における様々な薄膜の形成時に発生する真性応力や熱応力によりシリコン基板内の応力は上昇する傾向にある。応力がシリコンの降伏応力を超えると塑性変形が生じ、シリコン基板中に転位が導入されることになる。よって薄膜形成に起因するシリコン基板の応力の低減と素子内に発生する転位の抑制が半導体製造過程における課題となっている。

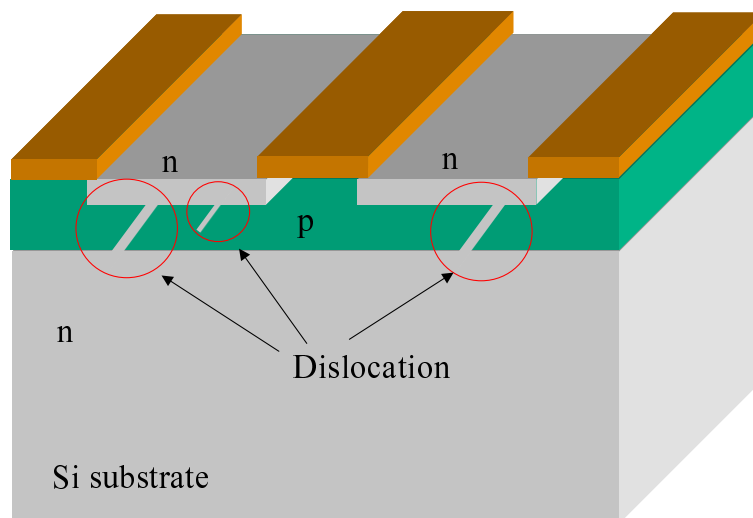


Fig. 1.1: Schematic of an electric current leak by the dislocation on the semiconductor device.

1.2 本研究の目的

不良素子内に発生した転位の位置や形状は製造過程において生じる真性応力や熱応力に大きく依存する。つまり半導体素子内部の転位はその発生の原因となった薄膜、あるいは素子の構造や製造過程などを特定する上で有用な情報を含んでいることになる。一方、素子の薄膜形成時の真性応力、熱応力によって発生する強い応力場を有限要素解析から予測することや、不良素子を TEM (透過型電子顕微鏡) などで観察し、内部に発生した転位の位置や形状を探ることは可能である。つまり「転位の発生源の候補」と「転位の平衡位置」の二つの情報は得られることになる。本研究ではこの二つの情報結びつける「転位の運動」を転位の動力的解析に基づいてシミュレーションを行うことで再現し、考察することが目的である。

第2章 基礎理論

2.1 転位の概念

2.1.1 結晶欠陥

物質は無数の原子が結びついてその形を構成している結晶である。結晶中には他の元素や原子配列の乱れによる欠陥というものが存在する。結晶生成段階や変形によって不可避免的に導入された欠陥を除去することは現実的には不可能であり、実際の結晶中には必ず様々な欠陥が含まれている。それらは大きさや形態によって0次元的な点欠陥から3次元的な体積欠陥まで各種の欠陥に分類されて存在するが、転位とは一次元的な線欠陥の代表である。

2.1.2 転位

結晶材料に外部応力を加えて変化させると最初に弾性変形が始まり、応力に比例して弾性ひずみが増加する。この弾性変形の過程においては応力をゼロにすると弾性ひずみもゼロとなり結晶は元の形に戻る。しかし、ひとたび応力が降伏応力を超えると結晶は塑性変形を起こし、応力を除荷しても組成ひずみが残り結晶は元の形に戻ることはない。Fig.2.1に示すように特定の結晶面上で特定の結晶方向に結晶がずれる、すべり変形が幾重にも重なって起こるのが塑性変形である。

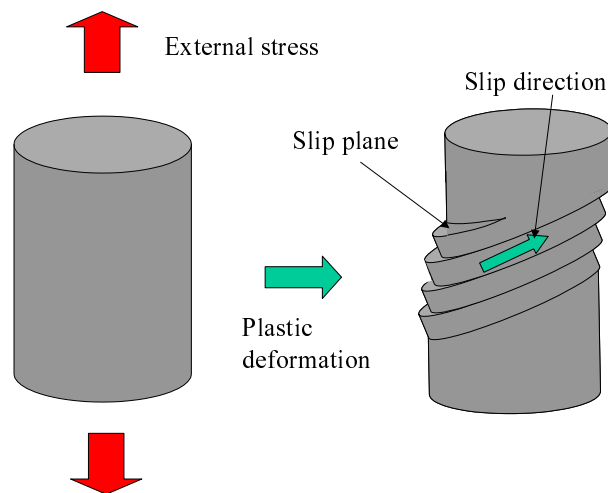


Fig. 2.1: External stress exceeds the yield stress, plastic deformation occurs.

すべり変形の結果、すべり面を挟んだ上下の結晶はすべり方向に相対的にある量だけずれることになる。このずれの量をバーガースベクトル b と定義する。もし上下の結晶がいっせいにすべり変形を起こすと、理論的に得られる降伏応力は実験で求まる単結晶の降伏応力よりはるかに大きいものとなってしまふ。この理論と実験の大きな相違を解決したのが転位という考え方である。つまりすべり変形は Fig.2.2 に示すように局所的な原子配列のずれが結晶のすべり面全体に伝播していくことによって起こる。変形後の結晶のずれは結果として同じだが、結晶のすべり面の原子が一斉にずれるよりもはるかに小さい応力で塑性変形が起こり、実験で求まる降伏応力と一致するようになる。この局所的な原子間結合のずれを転位とし、「すべり面上で、すでにすべった領域とまだすべっていない領域との境界線」とも定義できる。

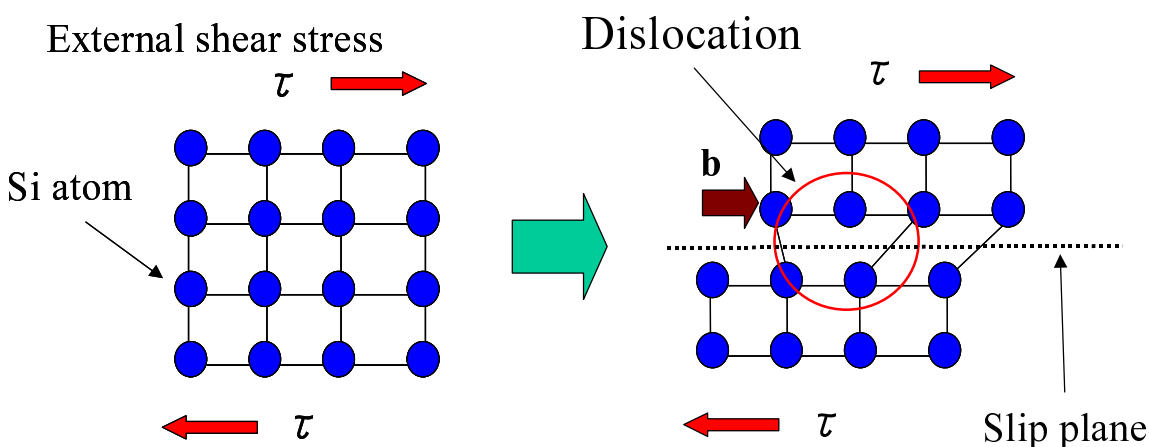


Fig. 2.2: Dislocation is a boundary line of between slipped and unslipped part of the crystal by the external shear stress.

2.2 転位に働く力

2.2.1 外部応力による影響

発生した転位は結晶に加えられた外部応力によってすべり面上を運動する。このとき転位ループ上のある点に働く力は式 (2.1)、Fig.2.3 に示されるの Peach-Koehler の式で説明される。

$$\begin{aligned} A_j &= \sigma_{ij} b_i \\ \mathbf{f} &= \mathbf{A} \times \mathbf{t} \end{aligned} \quad (2.1)$$

b は転位のバーガースベクトル、 σ_{ij} は注目する点 P の応力テンソル、 \mathbf{n} はすべり面に垂直な単位ベクトル、 \mathbf{t} は点 P における転位ループの単位接線ベクトルである。外積の定義から転位に働く力は必ず転位線に垂直な方向に作用することになる。ただし式中の σ_{ij} は必ずしも外部応力に由来するものである必要はない。結晶中の点欠陥の周囲に発生するような内部応力 σ_{ij} であれば、転位がその点欠陥から受ける力を表すことになる。

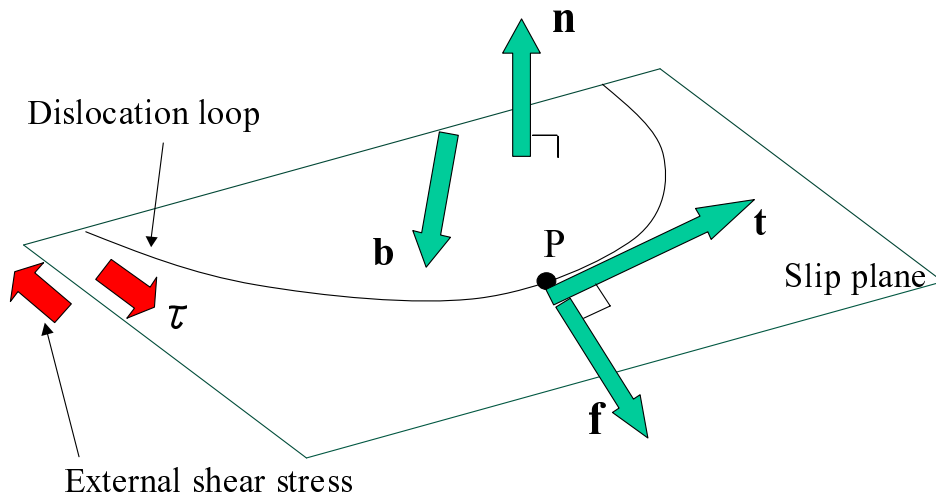


Fig. 2.3: Acting force to dislocation must be perpendicular to t .

2.2.2 転位同士の相互作用

転位同士に働く力も前節の Peach-Koehler の式を用いて求めることができる。 r 離れた位置にある、バーガースベクトルが b_1 、 b_2 の互いに平行な二本のらせん転位に働く力は以下に示す式で表される。

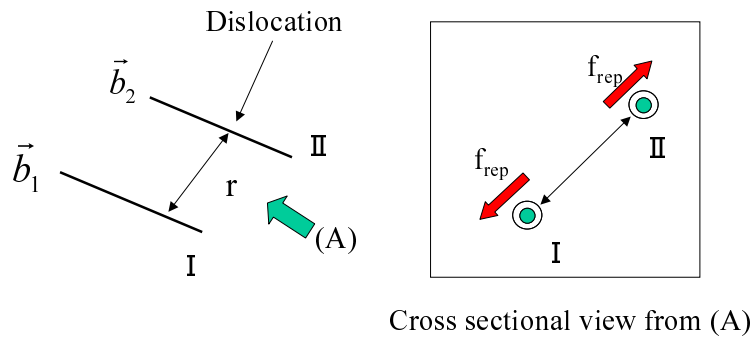


Fig. 2.4: Interactional force of two dislocation.

二本の転位がらせん転位の場合、転位 b_1 が単位長さ当たり転位 b_2 から受ける力は

$$f_{rep} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi r} \quad (2.2)$$

で表され、二本の転位が刃状転位の場合

$$f_{rep} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi(1-\nu)r} \quad (2.3)$$

となる。バーガースベクトルと転位線ベクトルが任意の角度を持つ一般の転位に対してはその成分をらせん転位と刃状転位に分解して転位同士の相互作用を求めることができる。

式 (2.4) は互いに平行な 60° 転位の内、 i 番目の転位が他の転位から受ける力を式 (2.2)、式 (2.3) から求めたものである。

$$f_{rep}^i = \frac{\mu b^2(1 - 0.25\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \sum_{j=0, j \neq i}^n \frac{1}{r_i - r_j} \quad (2.4)$$

2.2.3 界面の影響

今までは転位が無限結晶中にあると仮定してきた。しかし転位が自由表面の近くに存在すると引力型の相互作用が働くことになる。式 (2.5) は自由表面から l の距離にある転位が受ける力を表している。

$$f_{image} = -\frac{\mu b^2}{4\pi l} \quad (2.5)$$

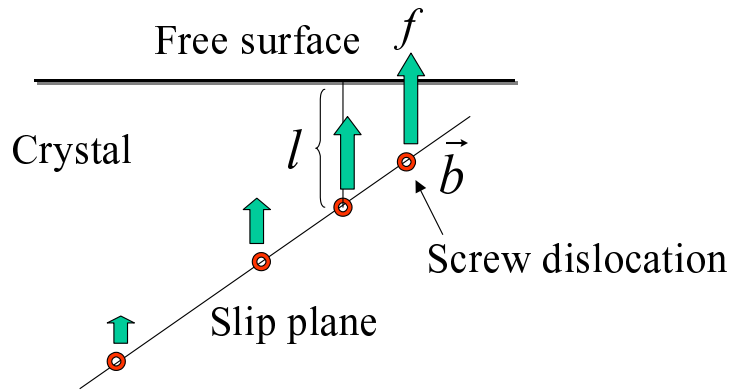


Fig. 2.5: Interactional force of between dislocation and free surface.

第3章 手法

3.1 解析対象

シリコン基板上に厚さ約 $0.2\mu\text{m}$ の窒化膜が帯状に形成され、窒化膜の初期応力として約 $1\sim 2\text{GPa}$ の引っ張りの真性応力が作用する状態 (Fig.3.1) を解析の対象とした。同様の条件において窒化膜の真性応力によりシリコン基板に強い応力場が発生し、転位が窒化膜とシリコン基板の接合面の端部から発生することが実験 [2] により確認されている。Fig.3.2 は発生した転位をとらえた写真 [2] であり、左側の写真は Fig.3.1 の (A) から見た画像で、横に走っている黒い線が窒化膜、黒い点が転位である。右側の写真は Fig.3.1 の (B) から見た転位の断面画像である。

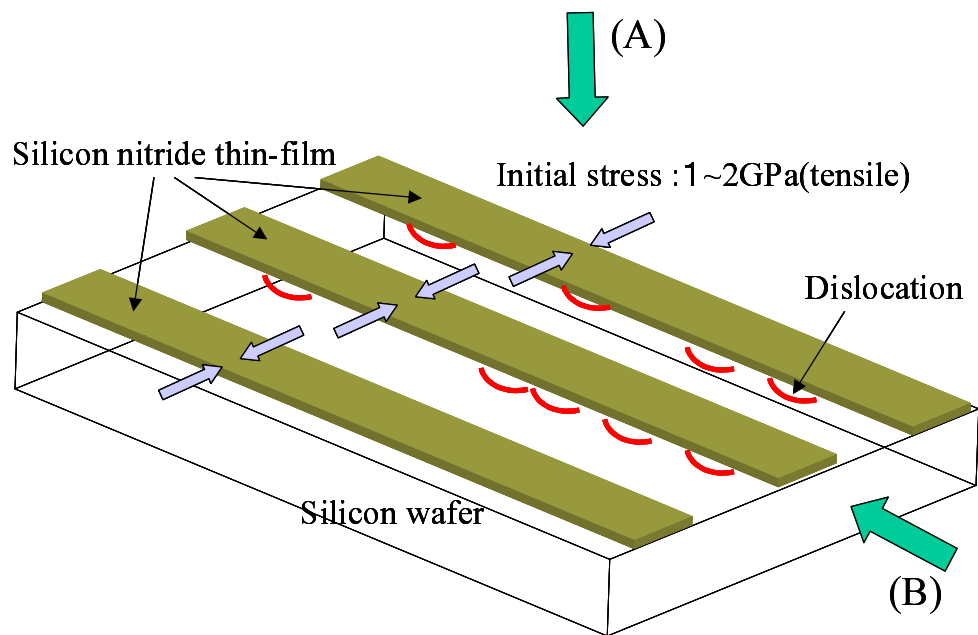


Fig. 3.1: Schematic of the analysis model, Si wafer and SiN thin-film. Making SiN thin-film, it generates initial stress : $1\sim 2\text{GPa}$, tensile.

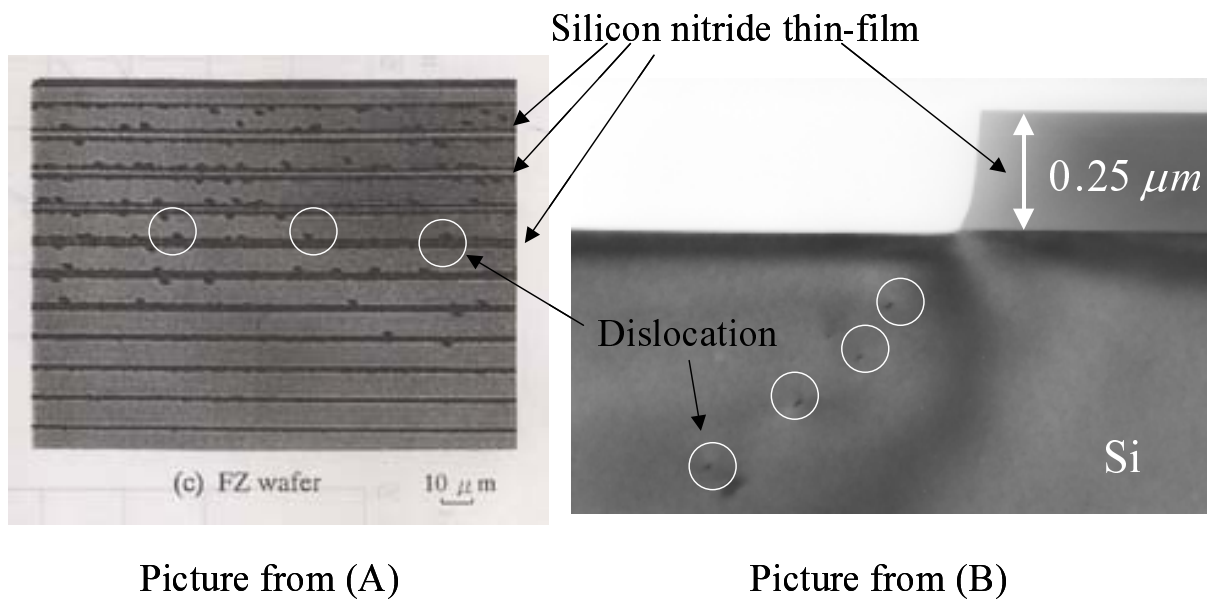


Fig. 3.2: The left picture is a Etch-pit image[2]. Black side lines are SiN thin-film and black points are dislocations. The Right picture is a TEM photograph from cross sectional view of dislocations[2].

3.2 モデルの設定

転位は進行方向に比べて Fig.3.1 の (B) 方向に大きく伸び、転位の端点以外は曲率が十分に小さく直線であるとみなせる [3]。よってモデルを二次元とし、転位線に対して垂直な断面内でのシミュレーションを行う。つまり Fig.3.3 で表されるように転位は点で表現されることになる。

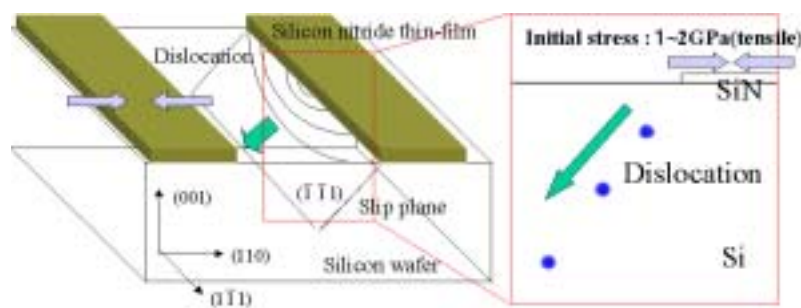


Fig. 3.3: Schematic of the analysis model, Si wafer, SiN thin-film and cross sectional image view of dislocations.

3.3 シミュレータの作成

前節で設定したモデルに対する二次元転位シミュレータを Fig.3.4 に示すアルゴリズムに基づいて作成した。以下ではその内容について詳しく説明する。

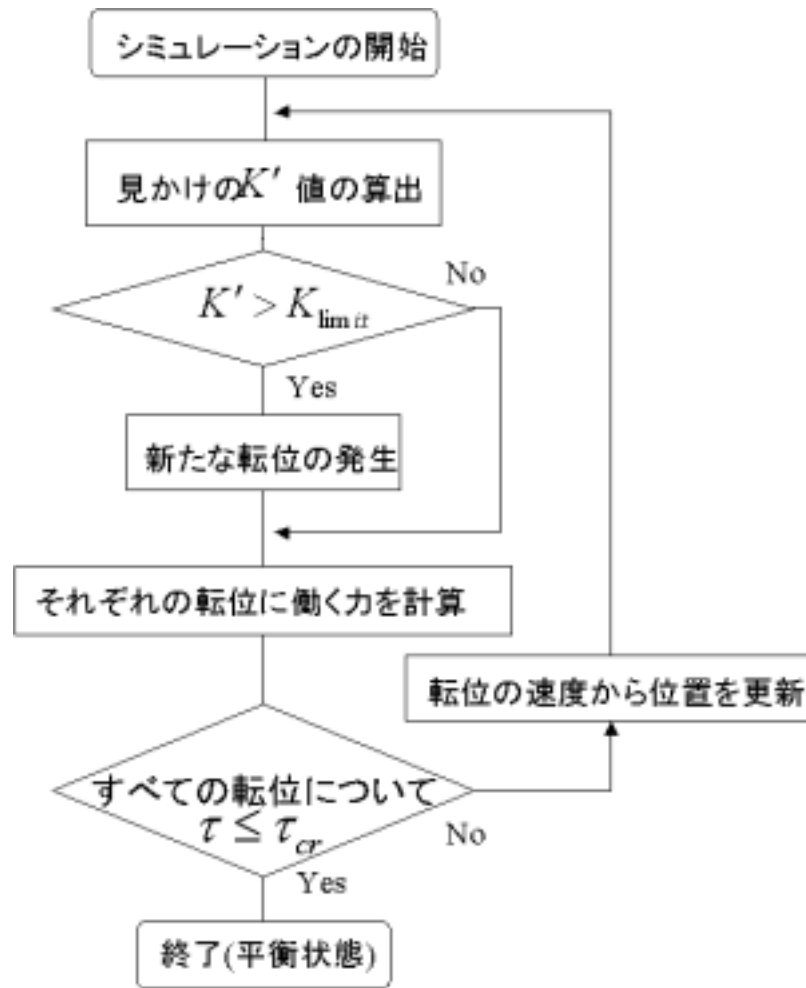


Fig. 3.4: Flow chart of simulation algorithm.

3.3.1 転位に働く力

説明の都合上 Fig.3.4 の「それぞれの転位に働く力を計算」する手法から述べる。転位に作用する力として以下の力を考える [1][4]。

- 駆動力 τ_{rss}
- 他の転位との相互作用 τ_{rep}
- 界面の影響 τ_{image}

駆動力

駆動力は窒化膜の初期応力により発生するシリコン基板の応力場から求まるので二次元の有限要素モデルを作成して応力解析を行なった。応力解析には有限要素解析プログラム

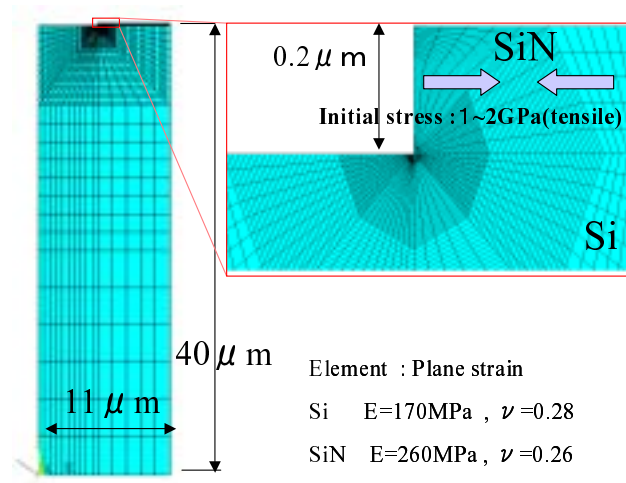


Fig. 3.5: FEM mesh of the analysis model. Considering to symmetric condition, side line is x direction fixed and bottom is y direction fixed.

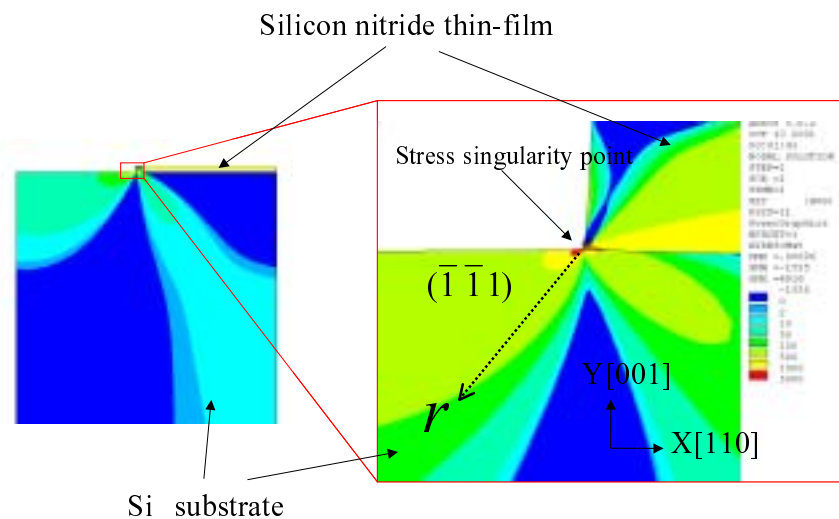


Fig. 3.6: Distribution of applied stress for $(\bar{1}\bar{1}1)[101]$ dislocation. The large force exists from stress singularity point toward the dislocation slip direction.

ANSYSを使用した。メッシュを作成するにあたってはFig.3.1に示すように解析対象を、(B)の方向にシリコン基板、窒化膜が無限に伸びていると仮定し、平面ひずみ問題とした。また対称性を考慮しFig.3.5に示す解析メッシュを作成した。左右両端はx軸方向固定、底面はy軸方向固定である。使用した物性値はシリコン基板にはヤング率 $260 \times 10^3 [\mu\text{N}/\mu\text{m}^2]$ 、 $\nu = 0.26$ 、窒化膜にはヤング率 $170 \times 10^3 [\mu\text{N}/\mu\text{m}^2]$ 、 $\nu = 0.28$ である。窒化膜が形成され

る際に発生する引っ張りの真性応力を初期応力として与え、有限要素解析から求めた駆動力の分布を示したのが Fig.3.6 である。SiN と Si の界面の端部に応力集中が生じ、転位のすべり面・すべり方向に沿って駆動力が分布しているのがわかり、実験で観察された [2] 転位の発生場所や移動方向とも一致している。

以上の解析により求めた応力テンソルを式 (2.1) の Peach-Koehler の式に代入して駆動力 $\tau_{r_{ss}}$ を求めることができる。ただし f と b には以下の関係式が成り立つ。

$$f = \tau | b | \quad (3.1)$$

他の転位との相互作用、界面の影響

他の転位との相互作用、界面の影響により転位に働く力は式 (2.4)、(2.5) から求めることができる。

以上より転位に働く力は式 (3.2) として求まる。

$$\tau = \tau_{r_{ss}} + \tau_{rep} + \tau_{image} \quad (3.2)$$

3.3.2 転位の発生

応力特異点近傍の転位の駆動力が式 (3.3) で表される場合、K 値がある値 (K_{limit} :転位の発生値) を越えると転位が発生することが実験的に確かめられている [2]。よってシミュレータにおいてはこの K 値を転位の発生条件として導入する。

$$\tau_{r_{ss}} = \frac{K}{r^\lambda} \quad (3.3)$$

r は応力特異点からの距離で、Fig.3.6 では応力集中が発生している窒化膜とシリコン基板の境界面の端部が応力特異点である。 λ は応力場の指数を表すパラメーターで今回のモデルでは 0.48 である。ただし式 (3.3) を利用し、K 値を転位の発生条件とするためには、作成した有限要素モデルから求まる駆動力 $\tau_{r_{ss}}$ (Fig3.6) が式 (3.3) に当てはまることが確認されなければならない。そこで式 (3.3) を式 (3.4) に変形し Fig3.6 に示した駆動力 $\tau_{r_{ss}}$ からこのモデルにおける K 値を求める。

$$K = \tau_{r_{ss}} \cdot r^\lambda \quad (3.4)$$

応力特異点近傍の K 値をプロットしたのが Fig.3.7 である。横軸は応力特異点からの距離である。K 値がほぼ直線となっている部分を外挿すると作成した有限要素モデルにおける応力特異場の K 値が求まる。

次にこの K 値を式 (3.3) に代入して求まる駆動力と、作成した有限要素解析からもとまる駆動力を比較したのが Fig.3.8 である。グラフから応力特異点近傍の駆動力は式 (3.3) によく当てはまることが確認されるので K 値を転位の発生条件として導入できることがわかる。

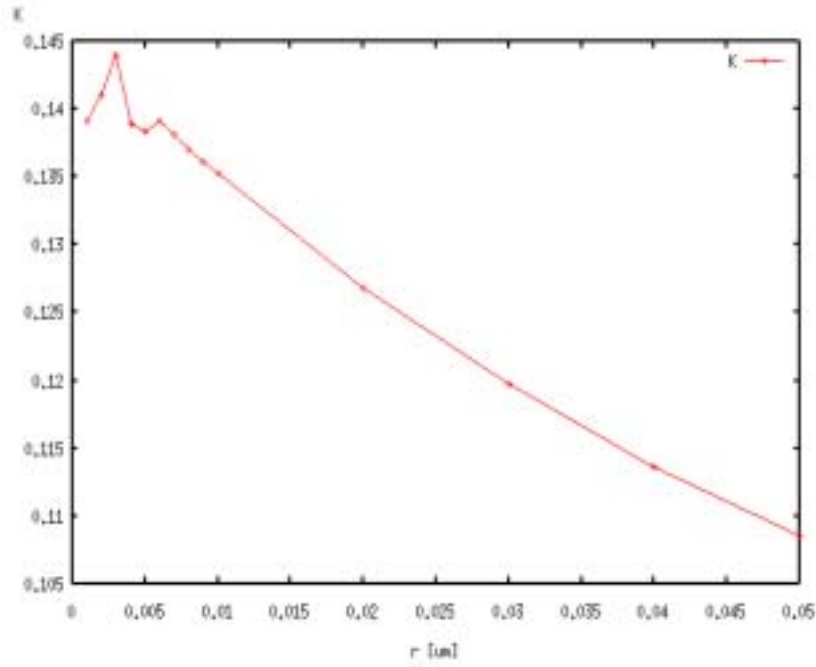


Fig. 3.7: Graph of K-value found from eq.(3.4). The horizontal axis is distance from stress singularity point and the vertical line is K-value [$MPam^{0.48}$].

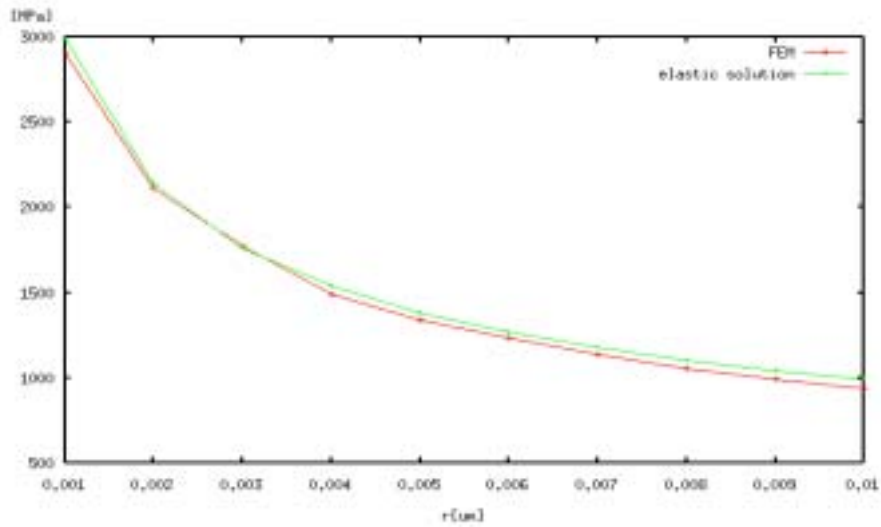


Fig. 3.8: Comparison of $\tau_{r_{ss}}$ from eq.(3.3) with FEM analysis. The horizontal axis is distance from stress singularity point and the vertical line is $\tau_{r_{ss}}$ [MPa].

実際には発生した転位により応力特異点近傍のひずみ場が緩和されるため、シミュレーションでは式 (3.5) のように応力場の強さを表す K 値を減少させることで転位による遮蔽効果を取り入れることにする [5]。

$$K' = K - K_{rep} \quad (3.5)$$

$$K_{rep} = \frac{\mu b(1 - 0.25\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \sum_i^n \frac{1}{r_i^{0.52}} \quad (3.6)$$

μ :せん断率、 ν :ポアソン比、 b :バーガースベクトルの大きさ = $0.384nm$ 、 K_{rep} :転位の応力特異点に対する影響である。ただし式 (3.6) の導出にあたっては式 (2.4)、式 (3.3) を利用して応力特異点に対する K 値の減少分を見積もった。

$$\begin{aligned} \tau_{rep} &= \frac{\mu b(1 - 0.25\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \frac{1}{r} \\ &= \frac{\mu b(1 - 0.25\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \frac{1}{r^{0.52}} \frac{1}{r^{0.48}} \\ &= \frac{K_{rep}}{r^\lambda} \end{aligned} \quad (3.7)$$

式 (3.5) は応力解析から式 (3.3) を利用して算出された K 値は転位の存在により減少し ($- K_{rep}$)、 K' はその減少分を考慮に入れた応力特異場の見かけ上の K 値であるということの意味する。よって転位の存在によって変化する K' が K_{limit} を超えた場合に、応力特異点近傍から転位が発生するものとする。ただし特異点では応力が無限大に発散するため、便宜的にバーガースベクトル五つ分だけ離れた位置から転位が発生するとした。

3.3.3 転位の運動

式(3.2)から求まる τ より式(3.8)から温度に依存する転位の移動速度(実験値)[6]を求め、適当なタイムステップを与えて差分法により転位の位置を更新する。ただし転位の停止応力には酸素濃度と温度に依存する式(3.9)の実験値を採用した[7]。 $B = 7.2 \times 10^{10}[\mu m/s]$ 、 $m = 1.1$ 、 $Q = 2.2[eV]$ 、 $\tau_0 = 10[MPa]$ 、 k_B :ボルツマン定数、 T :温度[K]、 C_0 :酸素濃度 $[cm^{-3}]$ である。

$$v^i = \begin{cases} B \left(\frac{\tau^i}{\tau_0} \right) \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right) & \tau^i > \tau_{cr} \\ 0 & \tau^i \leq \tau_{cr} \end{cases} \quad (3.8)$$

$$\tau_{cr} = 2.2 \times 10^{-19} C_0 \exp \frac{0.215 eV}{kT} \quad (3.9)$$

$$D(t + \Delta t) = D(t) + v^i \Delta t \quad (3.10)$$

Fig.3.4のフローチャートの示しように、転位に働く力から速度を求めて位置を更新し、転位の発生条件を確認する過程を繰り返して行き、すべての転位について各々の合力が停止応力以下となった時点で平衡状態に達したと考える。

3.4 解析条件

実験[2]と対応させ転位に対する酸素濃度と温度の影響を調べるために酸素濃度 $C_0 = 1.0 \times 10^{16}[cm^{-3}]$ のFZウエハと $C_0 = 8.0 \times 10^{17}[cm^{-3}]$ のCZウエハについて温度を850, 900, 1000 の3段階に変化させて解析を行った。

第4章 結果

4.1 シミュレーション

解析結果の一例を以下に示す。データの可視化には MicroAVS4.0 を使用した。解析条件は $T=900$ 、酸素濃度 $C_0 = 1.0 \times 10^{16} [cm^{-3}]$ の FZ ウエハで $K=0.10 [MPa \cdot m^{0.48}]$ 、1ステップを $1.0 \times 10^{-4} [s]$ とした。図中の窒化膜とシリコン基板の境界にある白い点が転位の発生個所である。シミュレーションの開始から $7.28 \times 10^{-1} [s]$ 後 (Fig.4.10) にはこの条件において発生する 7 個すべての転位が発生し、以降はそれらの転位がシリコン基板中に広がっていくことがわかった。酸素濃度の小さい FZ ウエハでは転位に対する停止応力が小さいため、初期応力の大きさを表す $K=0.10 [MPa \cdot m^{0.48}]$ という条件の基では多数発生する転位同士の相互作用による反発力や駆動力の大きさに影響され、転位に働く力がつりあって停止することはなく、 $t=4.07 \times 10^{-1} [s]$ 後にはデータを用意していた範囲を超えてしまった。ただし酸素濃度が大きな CZ ウエハや転位の発生数が少ない場合には各転位に働く力がつり合う平衡状態が確認できた。いずれの場合にも転位が発生してから基板中に拡散するまでの時間は数秒であった。

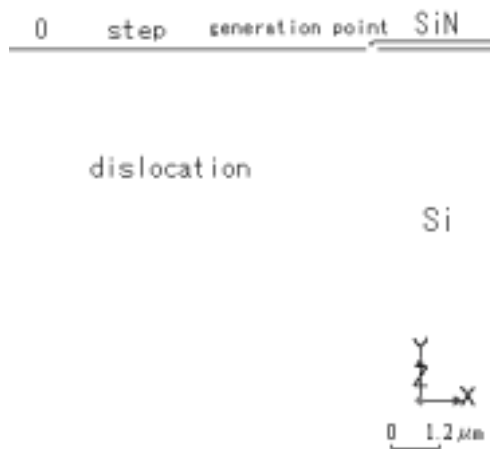


Fig. 4.1: $t = 0.00 [s]$

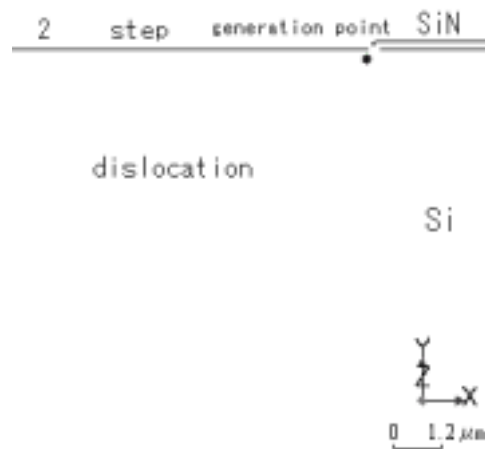


Fig. 4.2: $t = 2.00 \times 10^{-4} [s]$

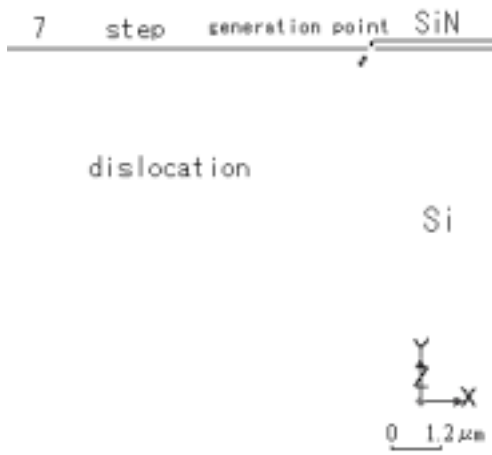


Fig. 4.3: $t = 7.00 \times 10^{-4}[\text{s}]$

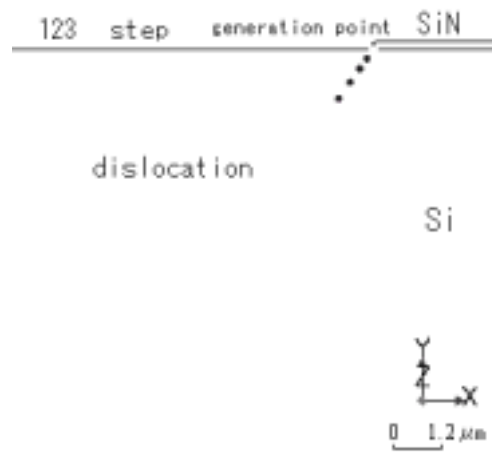


Fig. 4.4: $t = 1.23 \times 10^{-2}[\text{s}]$

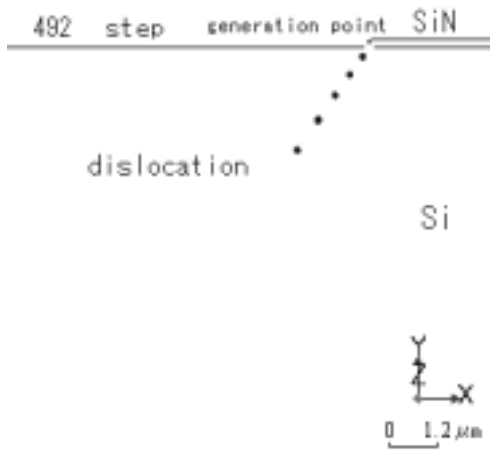


Fig. 4.5: $t = 4.92 \times 10^{-2}[\text{s}]$

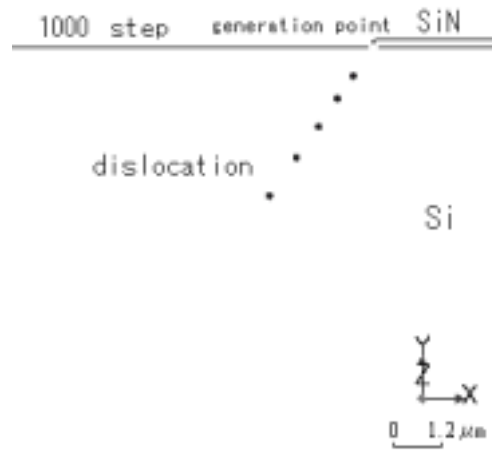


Fig. 4.6: $t = 1.00 \times 10^{-1}[\text{s}]$

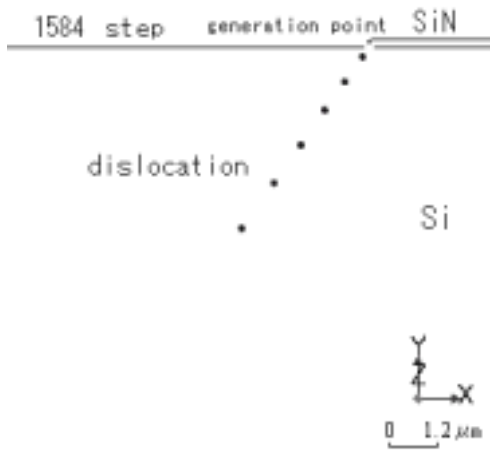


Fig. 4.7: $t = 1.58 \times 10^{-1}[\text{s}]$

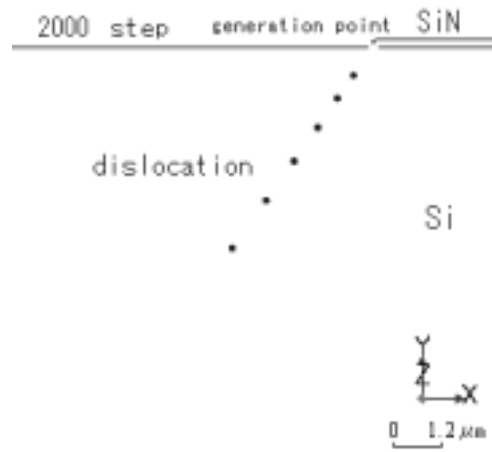


Fig. 4.8: $t = 2.00 \times 10^{-1}[\text{s}]$

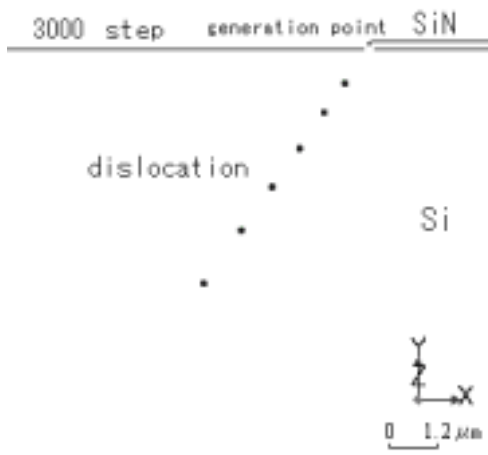


Fig. 4.9: $t = 3.00 \times 10^{-1}$ [s]

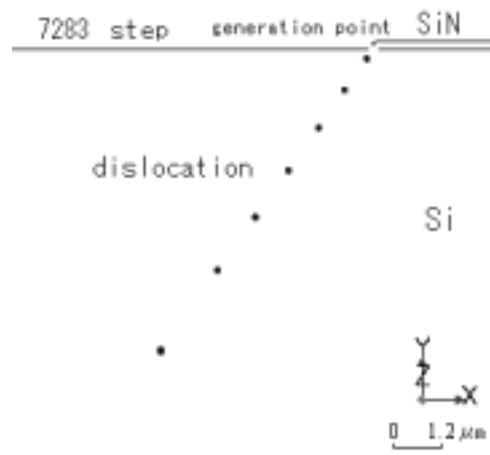


Fig. 4.10: $t = 7.28 \times 10^{-1}$ [s]

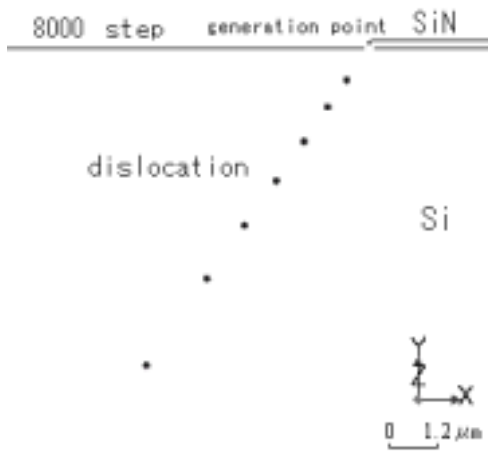


Fig. 4.11: $t = 8.00 \times 10^{-1}$ [s]

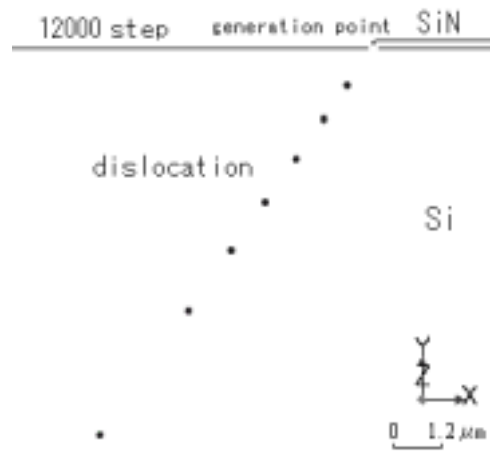


Fig. 4.12: $t = 1.20$ [s]

4.2 温度の変化

850、900、1000 の各温度における FZ ウエハの転位の分布図の解析結果を Fig.4.13 に、FZ、CZ の両ウエハの転位の発生個数を解析と実験 [2] で比較した表を Table.4.1 示す。両ウエハとも温度の上昇に伴って転位の発生数が増加していることがわかる。実験 [2] の結果ではシリコン基板の断面ではなく真上 (Fig.3.1 の視点 (A)) から観察し、シリコン窒化膜の帯の辺 $1mm$ 当たりに発生した転位数を調べているため、一断面における転位を数えた本解析における結果とは単純に比較することはできないが、温度の上昇とともに発生する転位が増加している点では一致している。このことから定性的ながらも温度依存性が本研究において作成した転位シミュレーターに取り込むことができたと言える。これは窒化膜の真性応力の強さを表す K 値が一定であっても、温度の上昇に伴って転位発生 K 値 (K_{limit}) が 0.095 から $0.062 [MPam^{0.48}]$ へと減少するので式 (3.3) から転位が発生しやすくなるためである。

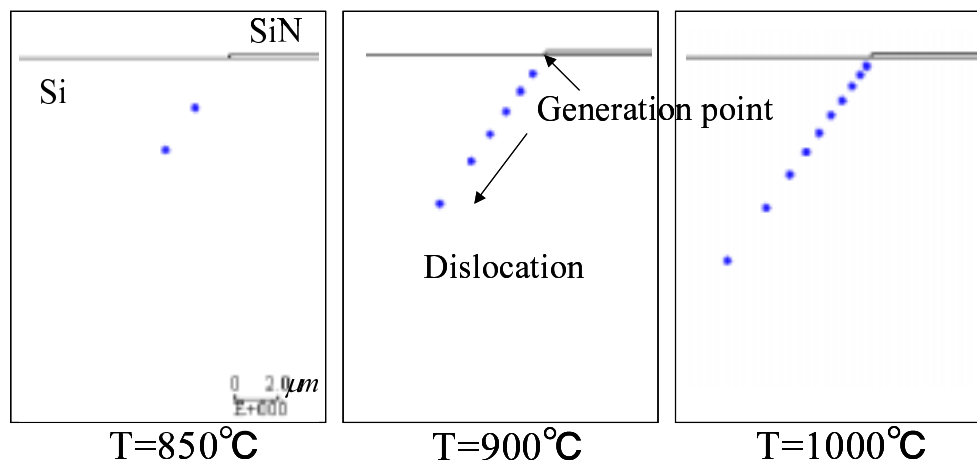


Fig. 4.13: Schematic of dislocation distribution of FZ wafer in different temperature.

	T=850	900	1000
FZ wafer ($K=0.10$)	2(3)	7(18)	13(48)
CZ wafer ($K=0.10$)	1(9)	6(63)	12(150)

Table. 4.1: Number of generated dislocation of different temperature. The value of () is experimental data[2], dislocation density (mm^{-1}), counted from over view of wafer.

4.3 酸素濃度の変化

実験 [2] では酸素濃度の異なる二種類のウエハにおいて転位の分布に大きな違いが見られた。具体的には酸素濃度の小さいFZ ウエハでは一断面上に複数の転位が横切っているのに対し酸素濃度の大きいCZ ウエハではほとんどの断面で一本の転位のみが観察されたということである。Fig.4.14 は日立製作所機械研究所の太田氏 [2] から提供を受けたFZ ウエハとCZ ウエハに発生した転位の断面のTEM画像と解析の結果を比較したものである。範囲が狭くて写真からはわかりにくいFZ ウエハでは複数本の転位が断面を横切っているのに対し、CZ ウエハでは一本の転位しか存在しないのがわかる。一方解析の結果はTable.4.1 や Fig.4.14 からわかるように酸素濃度の異なるFZ、CZ 両ウエハにおいて転位の発生個数や分布にほとんど差がなかった。

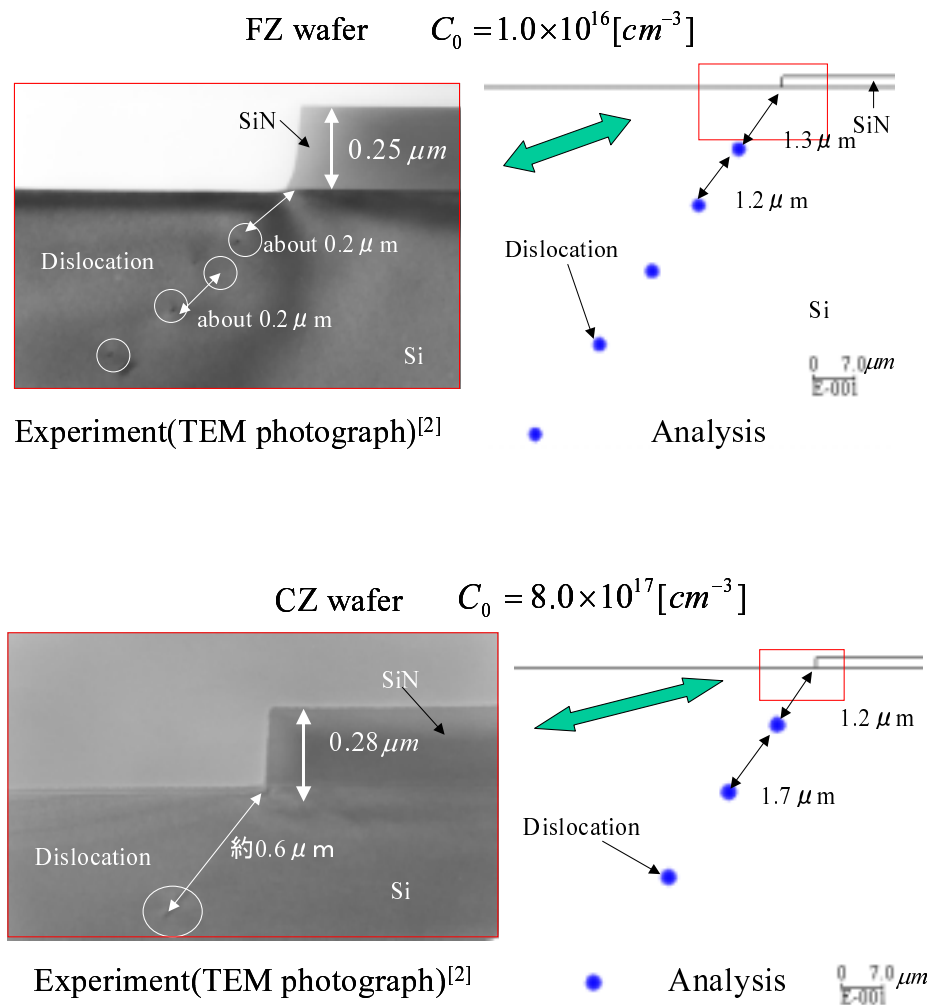


Fig. 4.14: Cross sectional view of the dislocation in the FZ and CZ wafer in the case of TEM photograph[2] and analysis.

第5章 考察

5.1 実験との対比

Table.5.1 は前章 Fig.4.14 で述べた二種類の酸素濃度のウエハにおける転位の分布の実験結果 (TEM 断面写真) と解析結果を、間隔、窒化膜端部から最も近い転位までの距離、転位の発生数で比較した表である。FZ ウエハでは複数の転位が断面を横切るという分布を解析においても再現できている。しかし転位の位置について詳細に調べると、TEM 写真では膜端部から転位までの最小距離は約 $0.2\mu\text{m}$ 、膜端部に近い二つの転位の間隔も約 $0.2\mu\text{m}$ であったのに対し解析の結果はそれぞれ 1.3 、 $1.2\mu\text{m}$ であり、大きく異なっている。

一方 CZ ウエハでは前章でも述べたように実験ではほとんどの断面で一本の転位のみが存在する [2] のに対して解析では FZ ウエハ同様に複数個の転位が断面を横切り、転位分布に対する酸素濃度の違いによる影響が反映されていない。

	FZ wafer (K=0.10,900)		CZ wafer (K=0.075,1000)	
	Experiment	Analysis	Experiment	Analysis
Number of generated dislocation	>4	7	1	4
Distance from stress singularity point (μm)	0.2	1.3	0.6	12
Interval of 1st and 2nd dislocation (μm)	0.2	1.2	-	1.7

Table. 5.1: Number of generated dislocation and its geometrical feature. Comparison of analysis with experiment (TEM photograph).

このように実験と解析の結果に違いが生じたのは次に示す要因が考えられる。

- 解析ではすべての転位を直線であると仮定したのが、実際の転位は三次元の形状を持つので、存在するはずの線張力 (同一転位内における相互作用) が加味されていない
- 酸素濃度の転位に対する影響が十分にシミュレーションに取り込めていない
- シミュレーションを二次元で行ったことによる影響

以下ではこれらの要因について考察を進めたい。

5.2 線張力の影響

解析対象をモデル化する段階では、発生した転位の形状を知るために Fig.3.2 から転位のおおよそのアスペクト比（横幅= b /断面方向の深さ= a ）を見積もった。その値が 10～20 となったので転位の端部位外は形状をほぼ直線と仮定できると判断した。ただし転位を真上から見下ろした（Fig.3.1 の (A) から見た）写真は TEM 画像ではなくエッチピットによる写真（Fig.3.2 の左）であり、転位の端部の位置が示されているだけなのでおおよその横幅を見積もったにすぎず、転位の正確な形状を把握することは困難であった。

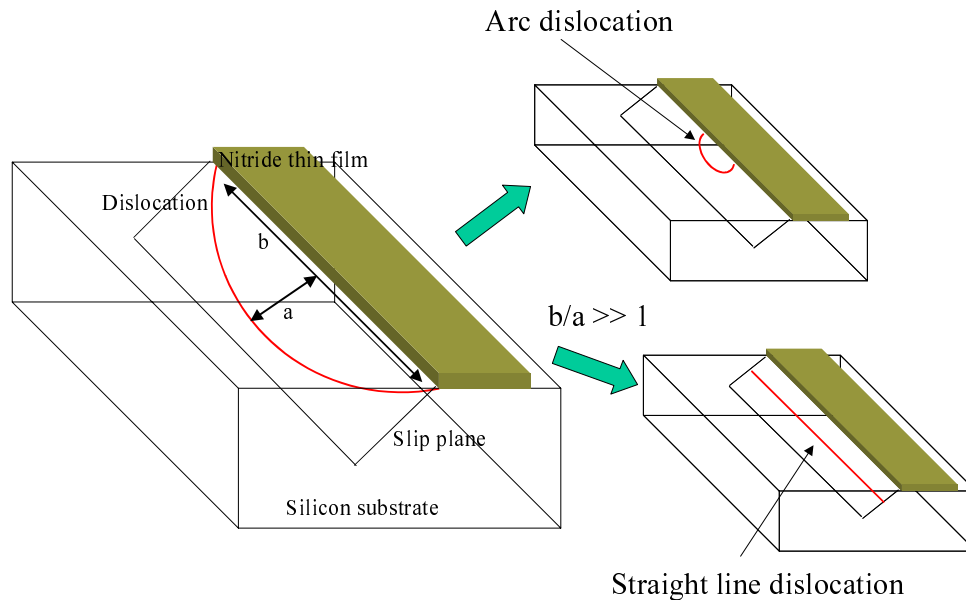


Fig. 5.1: Schematic of dislocation figure. If b/a is very large, dislocation can be assumed straight line. But if b/a isn't so large, it can't.

転位の間隔や位置が一致しない要因として転位を一様に直線状と仮定したことが影響しているとも考えられる。実際の転位は完全に直線状ではないので曲率による線張力が働くが、一様に直線であると仮定してしまうと線張力が 0 になってしまう。そこで線張力が働くことによって転位同士の間隔にどの程度影響を及ぼすか確かめるために転位を一様に半円形 (Fig.5.1 の右上の状態) であると仮定して、式 (5.1) に基づいて線張力 [8] を付加し、それ以外はまったく同様の条件で解析を行った。 R は曲率半径で、今の場合特異点からの距離、 $\theta=60^\circ$ である。結果を Table.5.2 に示す。

$$\tau = \frac{\mu b}{8\pi R(1-\nu)} \ln \frac{R}{5b} \{(2-\nu) + 3\nu \cos 2\theta\} \quad (5.1)$$

FZ、CZ の両ウエハとも線張力が転位の張り出しを妨げる抵抗となるため特異点からの距離、転位同士の間隔が共に小さくなっている。つまり線張力は転位の間隔や形状に影響を及ぼすことがわかり、転位の形状を反映させた線張力を加味することができればより正確な転位の分布を再現できる可能性がある。そうなる時々刻々と変化する転位の形状にそった線張力を再現するには二次元のシミュレーションで実現することは難しく、三次元のシミュレーションがより有効であると言える。

	FZ wafer (K=0.10,900)			CZ wafer (K=0.075,1000)		
	Experiment	Analysis		Experiment	Analysis	
Line tension	-	×		-	×	
Number of generated dislocation	>4	7	5	1	4	3
Distance from stress singularity point (μm)	0.2	1.3	0.62	0.6	1.2	0.40
Interval of 1st and 2nd dislocation (μm)	0.2	1.2	0.88	-	1.7	1.0

Table. 5.2: Number of generated dislocation and its geometrical feature. Comparison of line tension analysis with experiment (TEM photograph[2]).

5.3 酸素濃度の影響

これまでの解析においてシリコン基板の酸素濃度の違いによる転位への影響は再現できていなかった。シリコン基板中に酸素原子などの不純物原子が存在すると転位と異種原子との間の相互作用力により、酸素原子は転位が運動をする上で障害物となる。Fig.5.2はその様子をイメージしたものである。

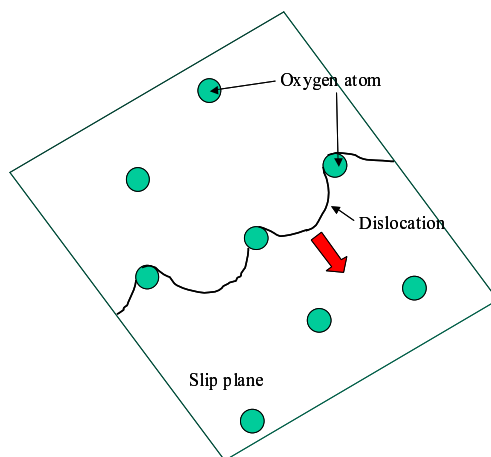


Fig. 5.2: Schematic of dislocation-oxygen interaction.

本研究ではこの酸素原子による固着効果を式 (3.8)、(3.9) によって取り入れてきた。これらの転位の速度、停止応力の式は実験結果を基に合わせ込みを行い [6][7] 算出されたものである。

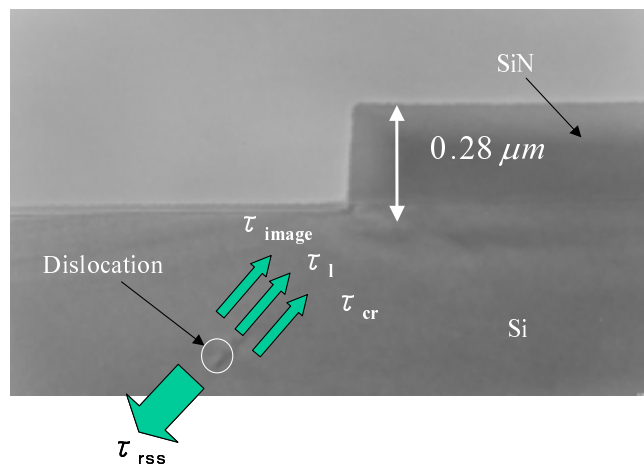
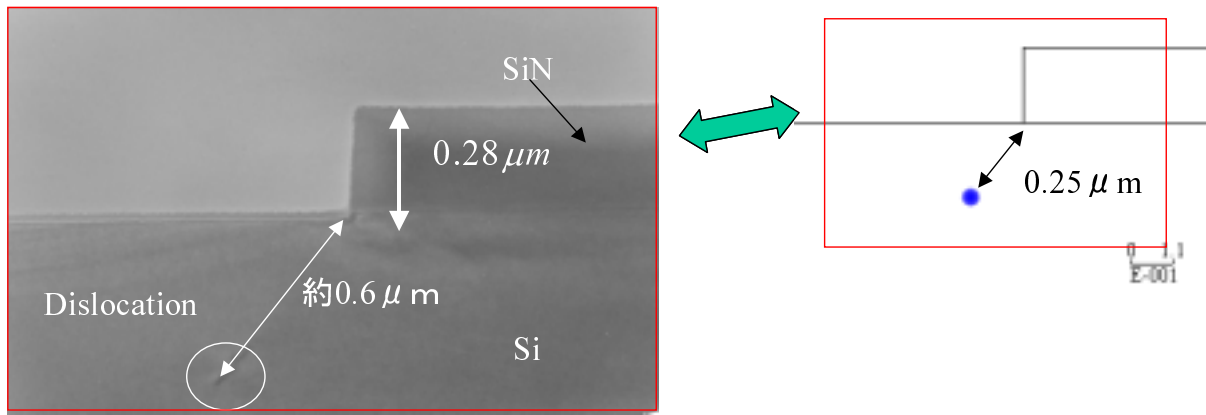


Fig. 5.3: Cross sectional view of dislocation in CZ wafer[2] and schematic of force working to dislocation.

酸素濃度の大きいCZ ウエハの解析では、式 (3.9) から求まる停止応力が実際の値と大きく異なっていたために実験で観察された転位の分布が再現できていなかった可能性がある。よって実際の転位にはどの程度の停止応力 τ_{cr} が作用しているのかを見積もるために、Fig.5.3 の CZ ウエハの断面写真から読み取ることにした。写真の中の転位が一本だけで平衡状態に達していると仮定すると、転位は窒化膜端部から約 $0.4\mu m$ の位置にあるので駆動力 τ_{rss} は $29.6[MPa]$ 、転位を単純に半円であるとして働く線張力 τ_l は $8.3[MPa]$ 、自由表面の影響 τ_{image} は $2.3[MPa]$ となり、平衡状態を保つのに必要な停止応力 τ_{cr} は $19.0[MPa]$ と見積もられることになる。これに対して今回のシミュレーションで使用した式 (3.9) から求まる停止応力は $1.25[MPa]$ であり大きな違いがある。そこで停止応力として実験結果から推測されたこの $19.0[MPa]$ という値を使用して再び CZ ウエハについて解析を行った。結果を Table.5.3、Fig.5.4 に示す。

	CZ wafer (K=0.075,1000)			
	Experiment	Analysis		
Line tension	-	×		
Critical stress [MPa]	-	1.25	1.25	19.0
Number of generated dislocation	1	4	3	1
Distance from stress singularity point [μm]	0.6	1.2	0.40	0.25

Table. 5.3: Number of generated dislocation and its geometrical feature. Comparison of analysis with experiment (TEM photograph[2]) in CZ wafer.



Experiment(TEM photograph)^[2]

Analysis

Fig. 5.4: Cross sectional view of the dislocation in the CZ wafer in the case of TEM photograph^[2] and analysis ($\tau_{cr} = 19[MPa]$).

これまでの解析ではCZ ウエハにおいてもFZ ウエハと同様に複数の転位が発生していたが、新たな停止応力を適用することで複数発生していた転位が一つのみとなり実験とよく一致する結果が得られた。このことから以下の二点が考えられる。

- 転位の停止応力の式の適用の仕方に問題があった
- シリコン基板の界面付近の酸素濃度が平均値と異なる

一点目は、式 (3.8)、(3.9) で表される速度、停止応力が mm スケールの長さの転位に対しての実験値から導出されたものであるため、今回のような発生直後の μm スケールの長さの転位に対してそのままあてはめることができるかは議論の余地があるということの意味する。

二点目は今回解析の対象とした実験モデル^[2]では、転位が発生し、運動する領域がシリコン基板の自由表面に近接している部分であったため酸素濃度の分布が一様ではなかった可能性がある。停止応力 τ_{cr} の値 $19.0[MPa]$ から、式 (3.9) を利用するとシリコン基板の酸素濃度は $C_0 = 1.2 \times 10^{19}[cm^{-3}]$ と逆算され、基板の平均濃度 $C_0 = 8.0 \times 10^{17}[cm^{-3}]$ からは大きく異なった値となる。つまりシリコン基板の自由表面の近傍や窒化膜との接合部分の酸素濃度が基板の平均的な酸素濃度とは大きく異なったため、式 (3.9) を使用しても適切な停止応力が求められていなかったことになる。

今回の解析だけではどちらが実験とシミュレーションの結果に違いが生じた原因であるか、またはほかの要因が存在するかは特定することはできない。しかしシリコン基板中の酸素濃度は転位の停止応力に対して大きく影響するため、転位の分布に対しても重要な要素となることは明らかになった。

5.4 二次元モデルの限界

本研究では解析対象を二次元に落としてシミュレーションを行った。しかし実際の転位は三次元の形状を持ち、また転位が発生し運動するシリコン基板も奥行きを持つ物体である。これらの要因は今回の二次元のシミュレーションに対して以下に述べる限界を生み出すと考えられる。一点目は第 5.2 節で述べたように時々刻々と変化する転位の形状にそった線張力を再現するには二次元のシミュレーションで実現することは難しいということである。また転位の形状に対称性があると仮定しなければならないのも二次元シミュレーションの制約の一つとなる。二点目は転位の発生個所を限定せざる負えないということである。Fig.5.5 に示したように酸素固着効果の大きいCZ ウエハでは1本の転位で膜端部のひずみを解放することはできず、窒化膜の奥行き方向に多くの転位の発生が必要となる一方で、固着効果の小さいFZ ウエハでは転位が断面内において広がりやすく、奥行き方向には少ない転位数でも膜端部のひずみを解放することができるということが実験の結果から推測されている [2]。つまり実際には窒化膜の真性応力（初期応力）によって生じたシリコン基板のひずみを開放する際に、酸素の固着効果や転位の移動速度の違いによって膜端部に沿った転位の発生源の位置や数に違いが生じているのである。しかし現在のモデルでは二次元という制約上、転位の発生個所を1つに限定しているため、基板の酸素濃度に影響される転位の同時かつ多発的な発生を再現できない。これらの要素も本研究における解析と実際の転位分布との間に違いが生じた原因の一つであると考えられる。

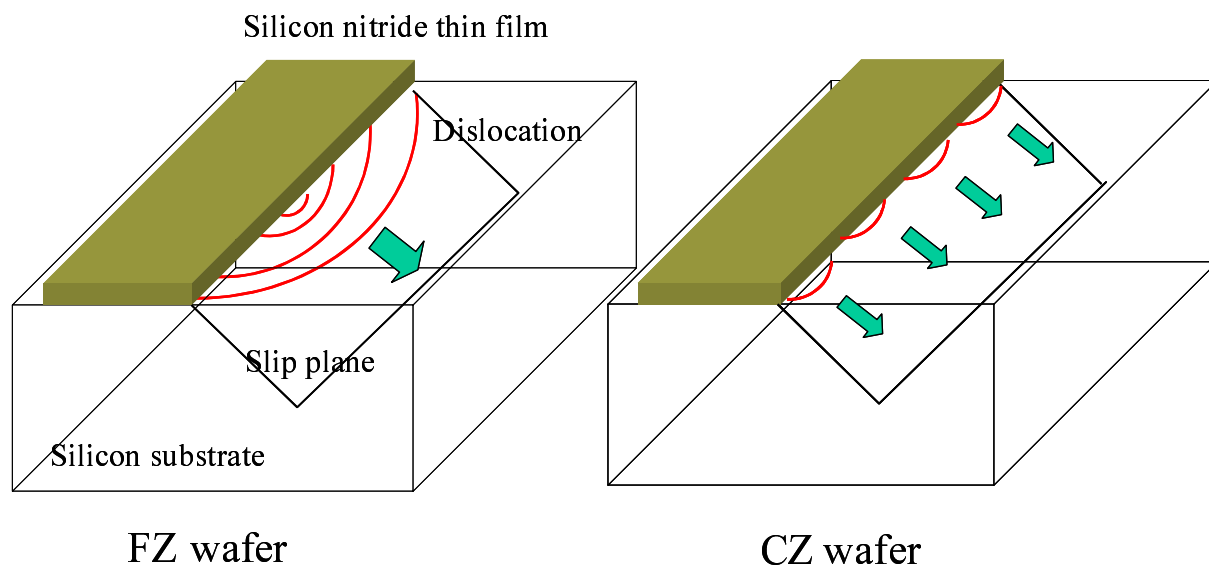


Fig. 5.5: Image of dislocation generation difference in FZ and CZ wafer.

第6章 結言

半導体素子の二次元転位動力学シミュレータを作成し、窒化膜の真性応力に起因するシリコン基板の応力場における転位の発生、運動を解析することで以下の結論を得た。

- 酸素濃度の小さいシリコン基板では転位分布の温度依存性について定性的に二次元シミュレーションで再現することができた。
- 酸素原子は転位の固着に大きな影響を及ぼすため、シリコン基板上の転位の分布を再現するには停止応力、基板中の酸素濃度の分布についてさらに考察する必要がある。

付録A 任意点の応力値の算出

3.3.1 節において転位の駆動力分布を求めるには有限要素解析を行い、求めた応力値を使用すると述べた。しかし転位の運動を解析する上では解析範囲のあらゆる場所における応力値が必要なのに、ANSYSのような有限要素解析プログラムではメッシュを切って作成した要素における節点あるいは積分点での応力値しかデータとして手に入らない。よって以下では得られた節点値のデータから必要な場所の応力値を求める方法を説明する。

A.1 アイソパラメトリック要素

有限要素法では対象となるモデルを細かなメッシュ（有限要素）に分割し、解析を行っているが、その有限要素にはアイソパラメトリック要素と呼ばれる要素が使用されている [10]。以下では本解析において使用したアイソパラメトリック四辺形一次要素を例に話を進める。アイソパラメトリック要素では正方形の要素を基準に考えている。しかし実際の解析において作成した要素（メッシュ）は正方形とは限らない。そこでアイソパラメトリック要素では実際の要素における変異、座標を式 (A.1)、(A.2)、(A.3) に示すように形状関数によって要素内局所座標系と結び付けている。

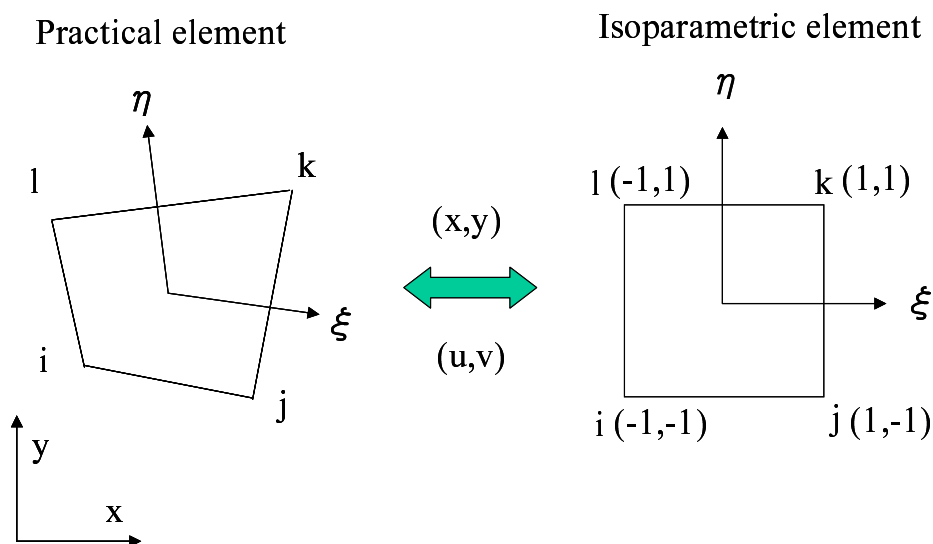


Fig. A.1: The isoparametric element and a quadrilateral linear element. The displacement and coordinate are translated by the shape function.

$$\begin{aligned} N_i &= \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta), N_j = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ N_k &= \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta), N_l = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{cases} u &= N_i u_i + N_j u_j + N_k u_k + N_l u_l \\ v &= N_i v_i + N_j v_j + N_k v_k + N_l v_l \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{cases} x &= N_i x_i + N_j x_j + N_k x_k + N_l x_l \\ y &= N_i y_i + N_j y_j + N_k y_k + N_l y_l \end{cases} \quad (\text{A.3})$$

$N_{i \sim l}$ は形状関数、 (ξ, η) は要素内局所座標 ($-1 \leq \xi \leq 1, -1 \leq \eta \leq 1$)、 $(x_{i \sim l}, y_{i \sim l})$ 、 $(u_{i \sim l}, v_{i \sim l})$ は節点の座標、変位、 (x, y) 、 (u, v) は要素内の任意の点の座標、変位である。

A.2 任意点の応力

任意の点 A の応力値を求めたい場合、まず点 A がどの要素内に存在するかを判定する。次にその要素の節点の座標 $(x_{i \sim l}, y_{i \sim l})$ と応力を求めたい点 A の座標 (x_a, y_a) が与えられれば式 (A.3) は式 (A.1) より ξ, η の関数となる。

$$\begin{cases} x_a &= \frac{1}{4}(x_i + x_j + x_k + x_l) + \frac{1}{4}(-x_i + x_j + x_k - x_l)\xi \\ &+ \frac{1}{4}(-x_i - x_j + x_k + x_l)\eta + \frac{1}{4}(x_i - x_j + x_k - x_l)\xi\eta \\ y_a &= \frac{1}{4}(y_i + y_j + y_k + y_l) + \frac{1}{4}(-y_i + y_j + y_k - y_l)\xi \\ &+ \frac{1}{4}(-y_i - y_j + y_k + y_l)\eta + \frac{1}{4}(y_i - y_j + y_k - y_l)\xi\eta \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

よって式 (A.4) から点 A の要素内局所座標 $A'(\xi_a, \eta_a)$ が求まることになる。またひずみの定義 $\varepsilon_x = \partial u / \partial x$ 、 $\varepsilon_y = \partial v / \partial y$ 、 $\gamma_{xy} = \partial u / \partial y + \partial v / \partial x$ より、式 (A.2) と同様に要素内のひずみも節点ひずみと形状関数で表すことができる。

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= N_i \varepsilon_{xi} + N_j \varepsilon_{xj} + N_k \varepsilon_{xk} + N_l \varepsilon_{xl} \\ \varepsilon_y &= N_i \varepsilon_{yi} + N_j \varepsilon_{yj} + N_k \varepsilon_{yk} + N_l \varepsilon_{yl} \\ \gamma_{xy} &= N_i \gamma_{xyi} + N_j \gamma_{xyj} + N_k \gamma_{xyk} + N_l \gamma_{xyl} \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

式 (A.5) に点 A の要素内局所座標 $A'(\xi_a, \eta_a)$ と ANSYS の解析結果から得られる要素の節点ひずみ $(\varepsilon_{xi \sim l}, \varepsilon_{yi \sim l}, \gamma_{xyi \sim l})$ を代入することで点 A のひずみ $(\varepsilon_{xa}, \varepsilon_{ya}, \gamma_{xya})$ が求まる。

よって平面ひずみの場合以下の式から任意点 A の応力値が求まることになる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{pmatrix} = \frac{E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \begin{pmatrix} 1-\nu & \nu & 0 \\ \nu & 1-\nu & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-2\nu}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

付 録 B 三次元転位動力学

本論文の結果として、転位の形状が対称的であったり、直線などの単純な形状で近似できる場合は二次元のシミュレーションを行うことでも転位の運動について定性的に再現できることがわかった。しかしこのような条件が成り立つことは少なく、一般に転位の形状はより複雑である。また解析の対象もある方向について均一で二次元化できるものに限定されてしまい、半導体素子における転位の運動を再現するには適用事例が限られてしまう。そこでより現実に近い形で転位の発生、運動を再現するには三次元のシミュレーションがより有効であると考えられる。以下では三次元転位動力学の導入となる手法について述べたい。

B.1 手法

シミュレーションを行う上で大きく異なる点は、二次元では転位の形状を直線や曲線に置き換えて同一転位内に作用する力はすべて等しいと仮定していたのに対し、三次元では一本の転位を複数個の要素に分解し、転位に働く力や転位同士の相互作用、界面の影響などを個々の要素ごとに求めるという点である。

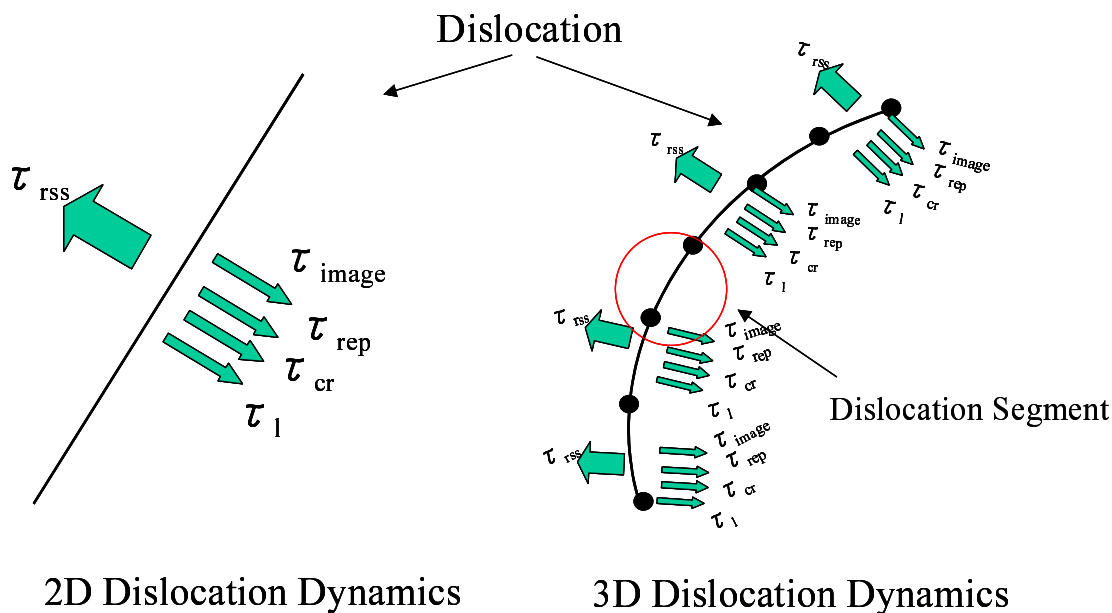


Fig. B.1: Difference of between 2D and 3D Dislocation Dynamics. In 3D, a dislocation is divided into little segments and calculated stress individually.

このような手法をとることで応力場がある方向に均一であると仮定する必要がなくなり、三次元の有限要素解析から求まる応力場を適用することができる。また二次元シミュレーションでは式 (5.1) を使用して近似的に与えていた線張力も三次元では個々の要素同士の相互作用としてより自然な形で与えることができる。

B.1.1 転位に働く力

Peach-Koehler の式

以下の説明は 2.2.1 節の説明と重なる部分もあるが、Peach-Koehler の式について詳しく説明した。本研究における三次元転位動力学では図 B.1、B.2 のように転位を節点とその節点を結ぶ直線から構成されているものと近似する。その直線の各転位素片に働く力は以下の Peach-Koehler の式から求まる。

$$\begin{aligned} A &= b_i \sigma_{ij} n_j \\ \mathbf{f} &= A(\mathbf{n} \times d\mathbf{l}) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

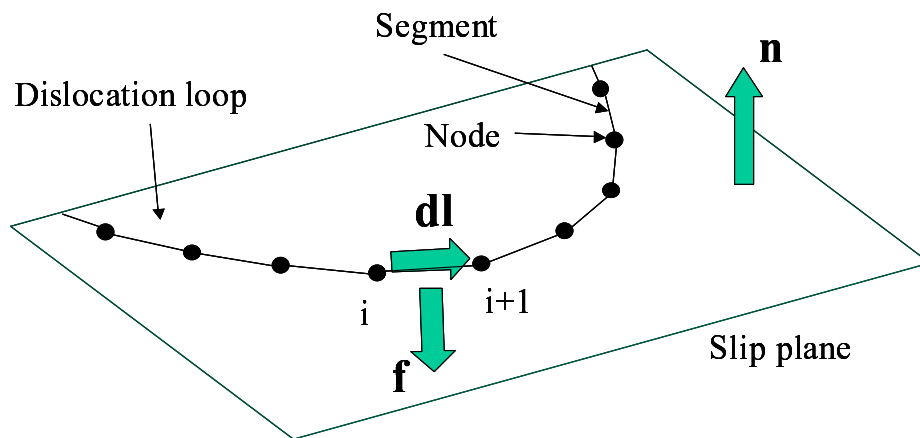


Fig. B.2: The dislocations are represented as lines and points. Acting force to dislocation segments must be perpendicular to $d\mathbf{l}$.

b は転位のバーガスベクトル、 σ_{ij} は節点の応力テンソル、 \mathbf{n} はすべり面に垂直な単位ベクトル、 $d\mathbf{l}$ は転位素辺の転位線ベクトルである。 σ_{ij} に含まれるのは

- 薄膜の真性応力に起因するような転位を発生させ、運動させようとする駆動力
- 他の転位素片との相互作用
- 界面の影響

などが挙げられる。これらの応力テンソルを重ね合わせ節点 i と $i+1$ との平均を取り、式 (B.1) に代入することで注目する素片に働く力 \mathbf{f} が求まることになる。

$$\mathbf{f} = \tau |b| \quad (\text{B.2})$$

式 (B.2) から τ が求まるので、二次元の場合と同様に式 (3.8)、(3.9)、(3.10) から転位切片の速度を求め適切なタイムステップを与えて位置を更新することにより転位の運動をシミュレートすることになる。よって式 (B.1) を使用して転位に働く力を求める場合、各節点における σ_{ij} を求めることが必要となる。

転位の相互作用 (nonlcal)

駆動力は二次元の場合と同様に有限要素解析から求まるが、転位素片同士の相互作用の導出には複雑な式変形が必要となる。以下の式の導入には Schwarz[9] の論文を参考とした。 $\sigma_0 = \mu/4\pi(1-\nu)$ 、 \mathbf{b} は転位ループのバーガースベクトル、 \mathbf{r} は点 P の位置ベクトル、 \mathbf{r}' は任意の転位素片上の位置ベクトル、 $R = |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|$ とするとき、点 P における任意の転位素片からの相互作用は以下の式で表される。

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = & -(1-\nu)[(\mathbf{b} \times \mathbf{F})_i s_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{F})_j s_i] + (\mathbf{b} \times \mathbf{s})_\gamma (\delta_{i\gamma} F_j + \delta_{j\gamma} F_i) \\ & + G \left[\delta_{ij} s^2 + s_{0i} s_{0j} \left(\frac{s^2}{R^2} + \frac{2s^2}{s_0^2} \right) - (s_i s_{0j} + s_j s_{0i}) \frac{s_0^2}{R^2} + \right. \\ & \left. s_i s_j \left(1 - \frac{s_0^2}{R^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

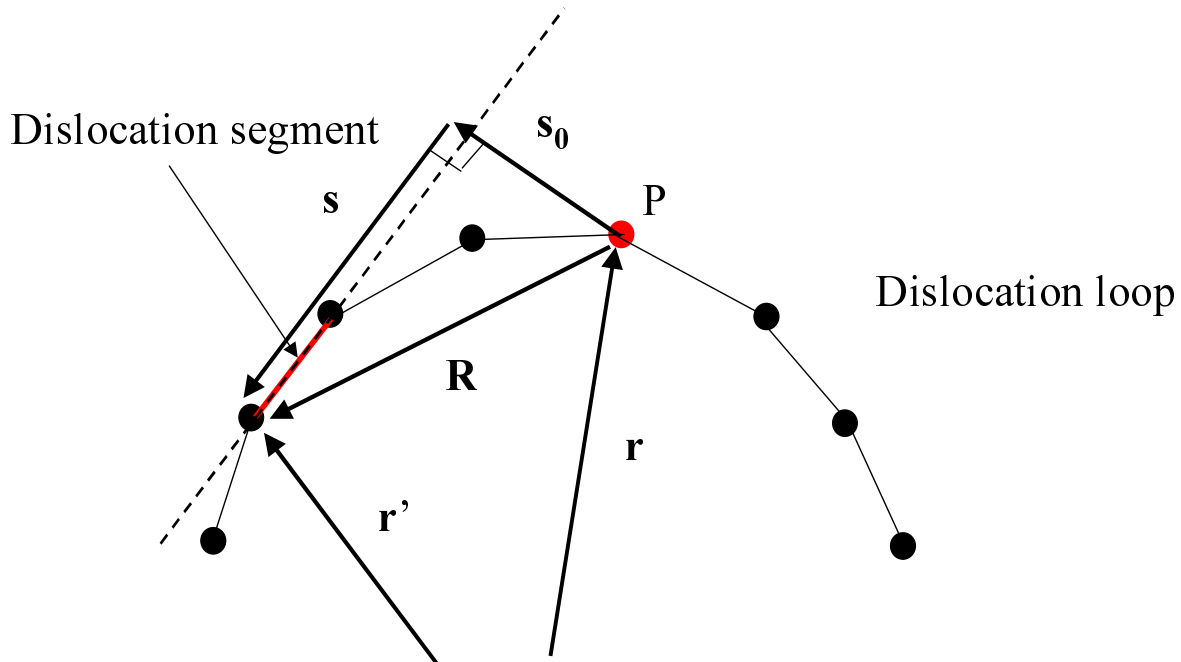


Fig. B.3: Geometry for finding the stress contribution from a segment of finite length.

ここで $\mathbf{F} = (\mathbf{s}_0 s^2 - s_0^2 \mathbf{s}) / s^2 s_0^2 \mathbf{R}$ 、 $G = (\mathbf{s} \times \mathbf{b}')_\gamma s_{0\gamma} / s^2 s_0^2 \mathbf{R}$ である。また \mathbf{s}_0 は点 P から転位素片に対して垂直なベクトル、 \mathbf{s}' はその垂線を下ろした点から転位素片上の点を結ぶベクトルである。ある転位素片から点 P の応力場に及ぼす影響は式 (B.3) を利用して転位素片の両端における値を求め、その差をとることで求まる。

転位の相互作用 (local)

式 (B.3) を使用して他の転位素片からの影響を考える場合、点 P を含む両隣の素片からの値は発散してしまい求めることができない。そこで点 P を含む三点を通る弧を図 B.4 に示すように $+\delta$ の距離に分割し、二つの弧から点 P の応力場及ぼす影響として見積もることにする。よって以下の式から近似的に転位芯が応力場に及ぼす影響が求まる。

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = [D1(\hat{s}_{3i}\hat{s}_{1j} + \hat{s}_{3j}\hat{s}_{1i}) + D2(\hat{s}_{3i}\hat{s}_{2j} + \hat{s}_{3j}\hat{s}_{2i})] \quad (\text{B.4})$$

$$D1 = (1-v)b_1\delta I_0 - vb_2\rho I_1 + \frac{1}{2}b_1[(1+v)\rho - (1-v)\delta]I_2$$

$$\frac{3v}{2}b_2\rho I_3 - \frac{b_1}{24}[(1+7v)\rho - (1-v)\delta]I_4 \quad (\text{B.5})$$

$$D2 = b_2\delta I_0 - vb_1\delta I_1 + \frac{b_2}{2}[(1-2v)\rho - \delta]I_2$$

$$+ \frac{v}{6}b_1(3\rho + \delta)I_3 + \frac{b_2}{24}[(8v-1)\rho + \delta]I_4 \quad (\text{B.6})$$

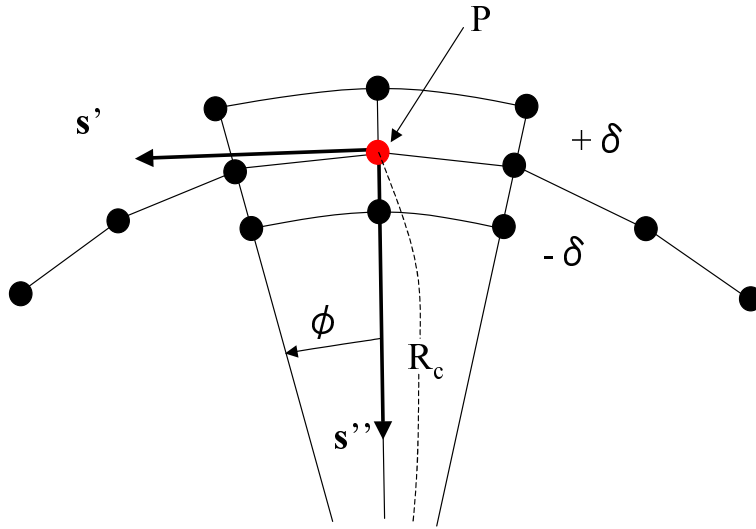


Fig. B.4:

s' は点 P を通る接線ベクトル、 s'' は点 P から曲率中心へ向かうベクトルであり、 $\hat{s}_1 = s'/|s'|$ 、 $\hat{s}_2 = s''/|s''|$ 、 $\hat{s}_3 = \hat{s}_1 \times \hat{s}_2$ と定義される。また $b_1 = \mathbf{b} \cdot \hat{s}_1$ 、 $b_2 = \mathbf{b} \cdot \hat{s}_2$ 、 $\rho = R_c + \delta$ 、 $I_0 = f\phi/as$ で、 $I_1 = -f/s$ 、 $I_2 = -f\phi/s + f \ln(s + \phi)$ 、 $I_3 = f(2a + \phi^2)/s$ 、 $I_4 = f\phi^3/2s - 3aI_2/2$ 、 $f = R_c^{-3/2}(R_c + \delta)^{-1/2}$ 、 $a = \delta^2/R_c(R_c + \delta)$ 、 $s = (a + \phi^2)^{1/2}$ である。

B.2 今後の課題

転位に対する界面の影響、転位同士の相互作用を考える時の local と nonlocal の境界、転位素片の大きさ、転位ループが成長していく際にどのような条件で新たな転位素片に

分割するかなど未確定な要素が多くある。これらの問題を解決して三次元転位シミュレーターを開発していきたい。

参考文献

- [1] 加藤 雅治 :“ 入門 転位論 ”, 裳華房 (1999).
- [2] 太田 裕之, 北野 誠 :“ シリコン基板内応力特異場における転位発生強度の酸素濃度依存性 ”, 『材料』, 46, 1101-1106 (1997).
- [3] J. Vanhellemont, C. Claeys, J. Van Landuyt :“ In-Situ HVEM Study of Dislocation Generation in Patterned Stress Fields at Silicon Surfaces ”, *phys. stat. sol. (a)*150, 497-506 (1995).
- [4] J. Vanhellemont and S. Amelinckx :“ Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. ”, *J. Appl. Phys.* 61(6), 2176-2188 (1987).
- [5] Yun-Biao Xin and K. Jimmy. Hsia :“ SIMULATION OF THE BRITTLE-DUCTILE TRANSITION IN SILICON SINGLE CRYSTALS USING DISLOCATION ECHANICS ”, *Acta mater.* 45, 4, 1747-1759 (1997).
- [6] Koji SUMINO :“ Mechanical Behavior of Semiconductors ”, Elsevier Science B. V., p94(1994).
- [7] D. Maroudas and Robert A. Brown :“ Constitutive modeling of the effects of oxygen on the deformation behavior of silicon ”, *J. Mater. Res.* , 6, 11, 2337-2352 (1991).
- [8] J. Vanhellemont and S. Amelinckx :“ Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. ”, *J. Appl. Phys.* 61(6), 2170-2175 (1987).
- [9] K. W. Schwarz :“ Simulation of dislocation on the mesoscopic scale. ”. *Methods and examples* ”, *J. Apple. Phys.* 85(1), 108-119 (1999).
- [10] 酒井 信介, 泉 聡志 : “ 有限要素法入門 東京大学工学部機械系三学科講義用テキスト ”, (2001).

あとがき

謝辞

研究を進めるにあたっていろいろとご指導頂いた酒井信介教授、泉聡志さんには深く感謝したいと思います。

またシミュレーションのモデルとして、その論文を参考にさせていただいた日立製作所機会研究所の太田さんからは転位の TEM 写真まで提供していただくことができました。どうもありがとうございました。研究室の皆さんには様々な面でお世話になりました。特に不慣れな計算機環境についていろいろとアドバイスをさせていただいた山際謙太さん、原祥太郎さん、どうもありがとうございました。来年以降もよろしく申し上げます。



第四十八回 京都大学・東京大学弓道定期戦にて
参之立 落
平成十三年 十一月 十八日 於 育徳堂

以上

p.1 ~ 41 完

卒業論文

平成14年 2月8日 提出

00255 三宅 威生