

修士論文

転位動力学シミュレータの開発と 半導体構造に対する適用

p.1 ~ 88 完

平成 16 年 2 月 13 日 提出

指導教官 酒井 信介 教授

26195 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	6
第2章	転位動力学の手法	7
2.1	離散化	7
2.2	Peach-Koehler の式	7
2.3	転位の相互作用	8
2.3.1	遠距離素片との相互作用	9
2.3.2	近距離素片との相互作用	10
2.3.3	隣接する素片との相互作用	10
2.3.4	他の転位との相互作用	12
2.3.5	自己相互作用	14
2.4	自由表面の影響	15
2.5	動的転位素片分割	17
2.6	一様応力場での転位の基本的な運動	18
2.6.1	外力のみによる転位の運動	18
2.6.2	同一転位内の影響	19
2.6.3	自由表面の影響	19
2.7	転位同士の近接反応	21
2.7.1	素片分割・時間増分制御	21
2.7.2	反応条件	22
2.7.3	annihilation	23
2.7.4	junction	26
第3章	STI に対する適用	28
3.1	緒言	28
3.2	解析手法	29
3.2.1	モデルの設定	29
3.2.2	応力解析	29
3.2.3	解析結果	32
3.3	転位力学シミュレーションの結果	36
3.3.1	発生起点 G	37
3.3.2	発生起点 H	44

3.4	すべり系せん断応力分布との比較	49
3.5	結言	51
第 4 章	SiN 薄膜に対する適用	52
4.1	緒言	52
4.2	解析手法	53
4.2.1	解析対象	53
4.2.2	応力解析	57
4.2.3	転位の発生	61
4.2.4	酸素濃度の影響	63
4.3	転位動力学シミュレーションの結果	64
4.3.1	Line & Space	64
4.3.2	Square pad	67
4.4	考察	71
4.4.1	転位発生条件	71
4.4.2	転位の反応	72
4.4.3	転位密度	72
4.4.4	転位の運動	74
4.5	結言	76
第 5 章	結論	77
付 録 A	任意点の応力値の算出	78
A.1	四辺形一次要素	78
A.2	六面体一次要素	80
あとがき		82
謝辞		82
著者近影		83
参考文献		84

第1章 序論

1.1 背景

ノートパソコンや携帯端末に代表されるような情報通信機器分野における小型・軽量・低消費電力化に対する社会的なニーズが高まる今日，その構成部品である種々の半導体デバイスにおいても高速・高集積・高機能化が求められている．Fig. 1.1 に示すグラフは，ITRS (International Technology Road map for Semiconductors¹⁾) に掲載されている年代毎の DRAM の最小配線ピッチとゲート長の微細化動向を示すものである．ゲート長は 1999 年の時点ですでに 100 nm 以下となり，2005 年には最小配線ピッチもそれに続くことが予想されている．これまでは 3 年で 30 %，言い換えると 6 年間で最小線幅はおおよそ半分に微細化されてきた．このような半導体デバイスの微細化に対する要求に答える

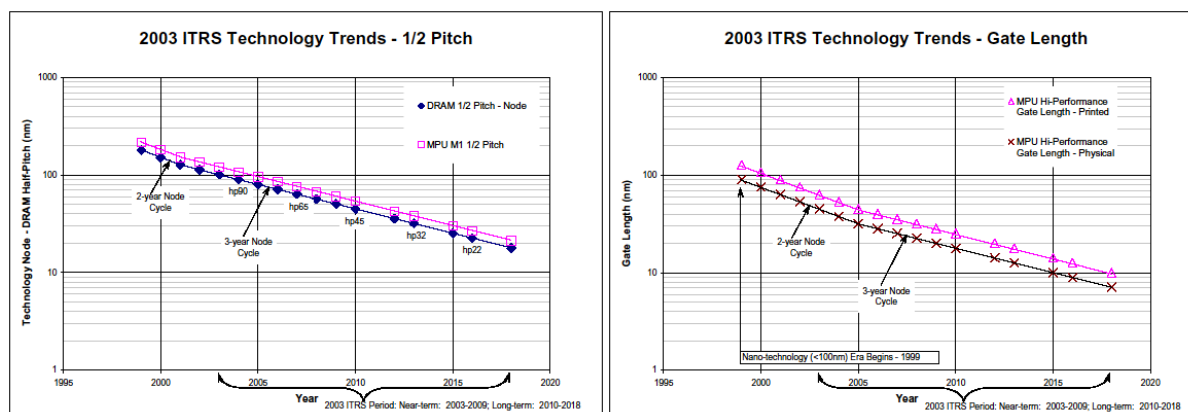


Fig. 1.1 2003 ITRS Half Pitch Trends and Gate Length Trends¹⁾.

ために，半導体製造過程においてはシリコン基板上に多様な形状の多数の薄膜が形成されると共に，膜幅の微小化や三次元構造化などによって高集積化を達成してきた²⁾．しかしながらこのような素子構造の高密度化に伴い半導体素子内部の応力は増大する傾向にあるため，応力起因による様々な不良がデバイスの電気特性の劣化，歩留まり低下の要因となり半導体製造分野における問題となっている．その中でも内部構造の高集積化に伴う応力の増大は，製造過程において 800 °C 以上の高温環境にさらされるシリコン基板の塑性変形を引き起こし「転位」と呼ばれる結晶欠陥を内部に発生させてしまう．転位とは原子配列の局所的な乱れが線状に連なっている結晶欠陥のことで，線欠陥と呼ばれているが，通常の金属中には $\rho = 10^9 \sim 10^{11} \text{m}^{-2}$ もの無数の転位が含まれている³⁾ (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 $[\text{m}/\text{m}^3] = [\text{m}^{-2}]$ と定義される．) 一方，結晶欠陥である転位は電流のリーク源となり，素子の電気特性を低下させ不良素子の原因とな

ることが知られている⁴⁾。Fig. 1.2の左に示すのはCPU内部に発生した転位のTEM画像，右はDRAMの設計図と内部に発生する転位の模式図である。このように本来半導体素子内部で絶縁されているはずの部位を結ぶように転位が存在すると，リーク電流が流れるため，デバイスの誤作動，不良を引き起こすこととなる。このため半導体製造に用いら

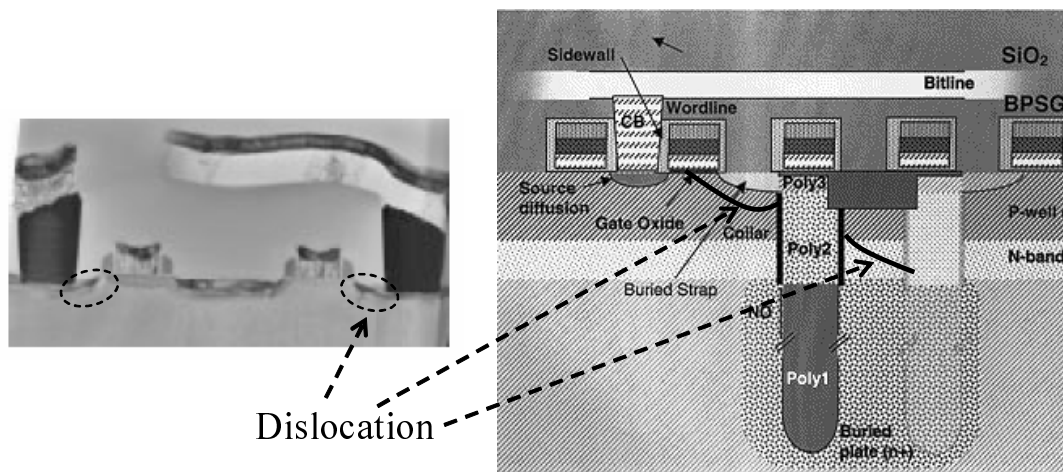


Fig. 1.2 Left figure is TEM micrograph of silicon dislocation. Right figure is DRAM cell diagram⁶⁾ and schematic of generated dislocation.

れるシリコンウエハは初期状態では完全な無転位の状態で供給されているが⁷⁾，デバイス製造過程における様々な要因，一例として薄膜の形成時に発生する真性応力や熱応力，あるいはイオンインプラネーションなどが原因となって転位が導入されることがある。発生した転位はデバイス内部の応力によって運動，進展することによって半導体素子の不良を引き起こすこととなるため半導体製造過程においてはシリコン基板内の応力の低減と素子内に発生する転位の抑制が大きな課題となっている。

一方，計算材料力学の分野では転位論に基づき転位の運動を解析的に取り扱う転位動力学を数値シミュレーションによって取り扱う研究がKubinやDeVincenzi⁸⁾，Ghoniem⁹⁾らによって始められ，近年，金属の塑性変形や照射脆化を模擬するシミュレーションが数多く行われ¹⁰⁻¹³⁾注目を集めている。これらの研究ではFig. 1.3に示すように結晶中に存在する大規模な数の転位の運動や増殖，反応を取り扱うことでマクロな物理現象を数値シミュレーションによって再現しようとするものである。しかしながらこれまで述べてきた半導体の分野では数本の転位ループが問題となるため，本論文で取り扱う素子内部の転位シミュレーションでは少数の転位ループの形状や位置を正確に再現することに主眼を置き主にSchwarz¹⁵⁻¹⁷⁾らの手法を用いてシミュレータの開発を行った。

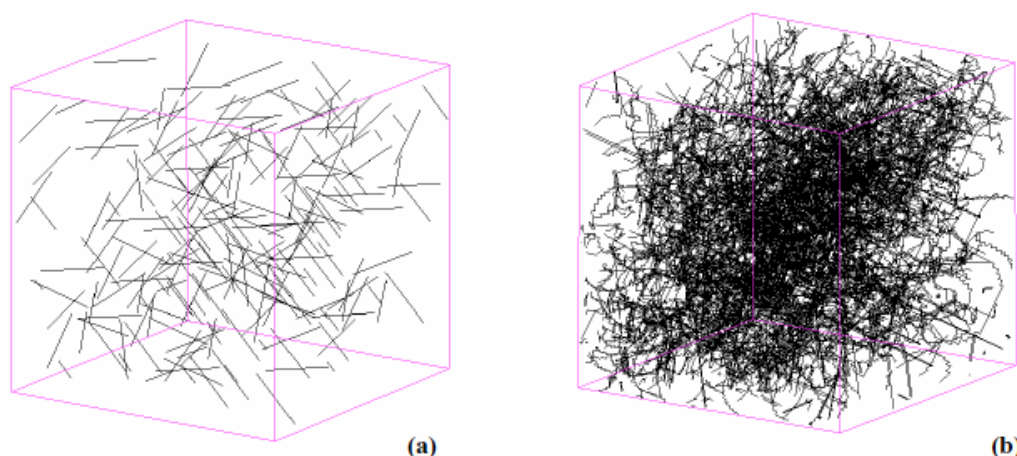


Fig. 1.3 (a) Example of an initial configuration of segments. (b) Frank Read multiplication mechanism ¹⁴⁾.

1.2 本研究の目的

半導体デバイス内部に発生・拡張した転位の位置や形状は製造過程において様々な要因によって生じたシリコン基板内の応力場に大きく依存する．よって半導体素子内部の転位はその発生原因となった薄膜，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になり得ると考えられる．一方，半導体デバイス製造過程における薄膜形成時の真性応力，熱応力等によって発生する応力場の有限要素法による解析や，実際に発生した不良素子を TEM (透過型電子顕微鏡) などを用いて観察し内部の転位の位置や形状を知ることが可能であるため，転位の発生原因を推測するのに用いられている．しかしながら TEM では二次元的な観察に限られるため，複雑さを増すデバイス構造内部での転位形状を把握するのは困難な状況にある．そこで本研究では転位論に基づいた三次元離散転位力学シミュレータの開発を行い，応力解析によって得られる「転位の発生源の候補」と TEM 観察によって得られる「転位の平衡位置」の二つの情報を結びつける「転位の運動」を数値計算によって再現することを第一の目的とした．最終的には半導体製造プロセスにおける転位の発生・運動を予測・制御，あるいは支援できるようなツールの開発を目指しているが，本論文では STI や SiN 薄膜といった半導体デバイスにおける代表的な構造について，実験で得られた転位の位置や形状，速度などのデータとシミュレーション結果の比較を行い，実験と対応させた転位力学の定量的評価を行うことで開発したシミュレータの妥当性について考察する．

第2章 転位動力学の手法

本章では作成した三次元離散転位力学シミュレータの具体的な手法，アルゴリズムについて説明する．その多くは Schwarz¹⁵⁾, Rhee¹⁸⁾ らの手法を参考としたが，転位のすべてのダイナミクス，近接反応をシミュレータに取り込むことは容易ではないため，解析対象を半導体素子に特化することで使用用途に向けてその機能を追加していく方針を採った．

2.1 離散化

本研究における三次元シミュレーションでは，任意形状の転位ループは小さな直線セグメント（転位素片）が連なって構成されていると考えた．つまり転位ループ上に節点を配置し，その節点間を直線で結ぶことで離散化し，転位の形状を近似していることになる．直線と節点からなるそれら各転位素片に加わる様々な力を求めることができれば，その力から速度を算出し，差分法により転位素片の位置を更新することで転位の運動を再現することができる．

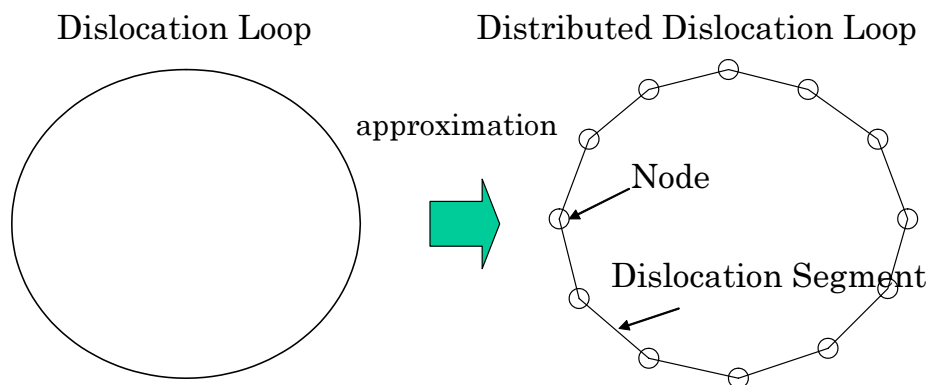


Fig. 2.1 Dislocation is divided into straight segments and calculated force individually .

2.2 Peach-Koehler の式

転位のすべり面に垂直な単位ベクトルを $\mathbf{n}$ とするとき，離散化された転位素片ベクトル $d\mathbf{l}$ に対して働く力は以下のピーチ・ケーラーの式から求めることができる．

$$\mathbf{f} = (b_i \sigma_{ij} n_j) \mathbf{n} \times d\mathbf{l} \quad (2.1)$$

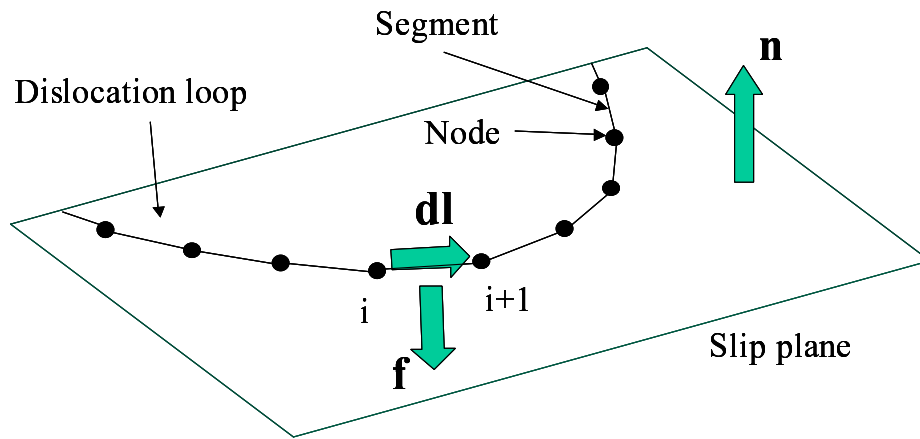


Fig. 2.2 Dislocations are represented as straight lines and nodes. Acting force to dislocation segments must be perpendicular to dl .

b はバーガースベクトルであり， σ_{ij} としては真性応力や初期応力などの外力，同一転位内の相互作用，他の転位との相互作用，界面の影響など種々の応力テンソルを代入することができる．以下ではこれらの応力テンソルをどのようにして算出するかを述べる．

2.3 転位の相互作用

最初に転位同士の相互作用の算出方法について説明する．本シミュレータでは転位を連続体中に存在する線状の欠陥として取り扱っているため，転位芯の取り扱いに際して何らかの近似手法を用いなければならない．また数値計算の安定性も考慮して，相互作用を転位素片同士の距離に応じて便宜的に三段階に分けて取り扱う手法を採用した．

1. 遠距離素片との相互作用
2. 近距離素片との相互作用
3. 隣接する素片との相互作用

転位素片同士の相互作用を求める際に基本となるのが 1 の手法である．対象となる転位素片が他の転位ループに存在する場合は他の転位からの相互作用を表すことになり，対象としている素片が同ループ内に存在する場合は自己相互作用を表すこととなる．2，3 は同一転位ループ内における転位素片同士の自己相互作用を算出する際の特別な場合であり，詳細については後述する．

2.3.1 遠距離素片との相互作用

原子の「ずれ」である転位の周囲のひずみから生じる弾性場によって，転位同士は相互に力が働く．本研究における三次元のシミュレーションでは転位は直線素片に離散化されているので，転位同士の相互作用はその離散化された素片同士の相互作用の総和をとることで求めることができる．ある点における直線転位素片からの応力場は以下の式で求められる¹⁵⁾．

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = -(1-\nu)[(\mathbf{b} \times \mathbf{F})_i s_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{F})_j s_i] + (\mathbf{b} \times \mathbf{s})_\gamma (\delta_{i\gamma} F_j + \delta_{j\gamma} F_i) + G \left[\delta_{ij} s^2 + s_{0i} s_{0j} \left(\frac{s^2}{R^2} + \frac{2s^2}{s_0^2} \right) - (s_i s_{0j} + s_j s_{0i}) \frac{s_0^2}{R^2} + s_i s_j \left(1 - \frac{s_0^2}{R^2} \right) \right] \quad (2.2)$$

ここで $\mathbf{b}$ は対象をしている転位素片のバーガースベクトル， $\sigma_0 = \mu/4\pi(1-\nu)$ ， $\mathbf{F} = (\mathbf{s}_0 s^2 - s_0^2 \mathbf{s})/s^2 s_0^2 R$ ， $G = (\mathbf{s} \times \mathbf{b})_\gamma s_{0\gamma}/s^2 s_0^2 R$ である．ベクトル $\mathbf{s}$ ， $\mathbf{s}_0$ ， $\mathbf{R}$ は Fig.2.3 に示すとおりである．つまり転位の節点 P における転位の素片 AB による応力は式 (2.2) を利用して以下のように算出される．

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}=P} = \sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}'=B} - \sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}'=A} \quad (2.3)$$

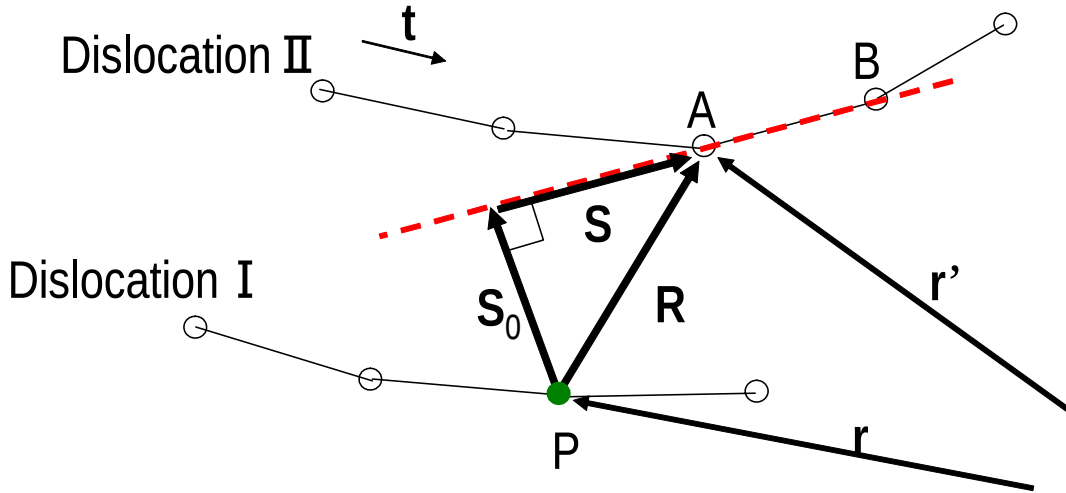


Fig. 2.3 Geometry for calculating the stress contribution from a segment of finite length.

転位のすべての素片について式 (2.3) の和をとることで P における転位の影響が求まる．したがって転位，の相互作用を算出するには全ての節点について他の転位ループの全ての転位素片の影響を算出し和をとる必要がある．

これまでの説明では異なる転位ループ同士の相互作用を求める手法であったが，同一転位内の素片同士の自己相互作用を求める際もまったく同一の手法であり，Fig.2.3 の Dislocation を と置き換えるだけである．つまり Fig. 2.4 に示すように，転位節点 P における同一転位ループ内の素片 AB からの影響も上述の手法とまったく同様にして求める．しかしながら素片 AB が節点 P に近づくにつれてベクトル $\mathbf{s}_0$ が微小となり，式 (2.2) から算出される値が発散しやすくなることで数値計算の安定性が損なわれる．また隣接する素片に対してはベクトル $\mathbf{R}$ ， $\mathbf{s}$ ， $\mathbf{s}_0$ が求められない等の問題がある．よってこの欠点を回避するための手法を次に述べる．

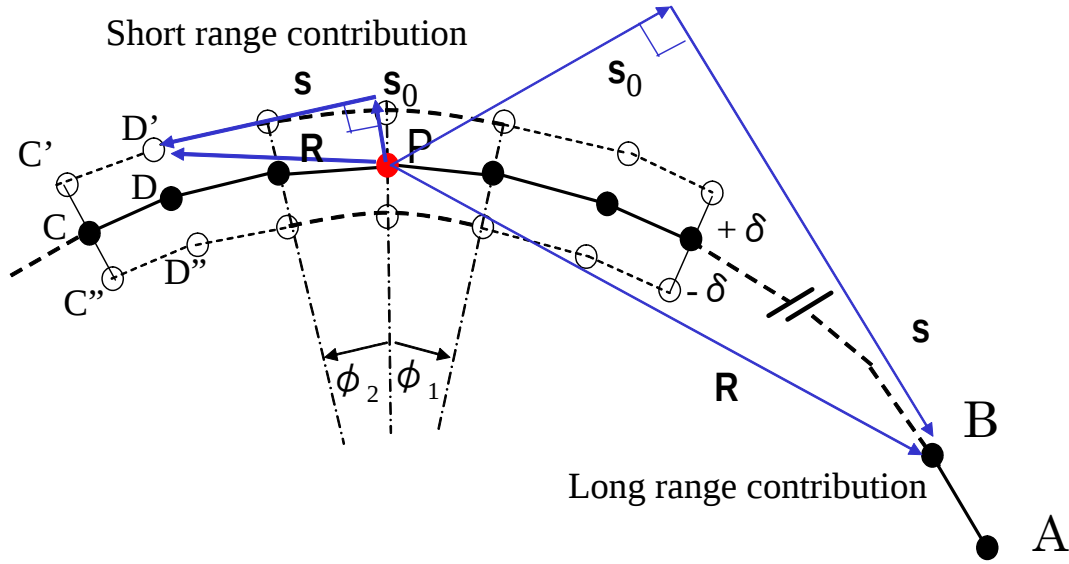


Fig. 2.4 Schematic of calculation method of contribution from local and none local segment.

2.3.2 近距離素片との相互作用

対象となる素片が近い位置にあり，ベクトル s_0 が微小となって式 (2.2) から算出される値が発散しやすくなる近距離素片との相互作用を求める際には，図 2.4 に示すように，対象となる転位素片 CD が，存在する位置からある幅 δ だけすべり面上で分割され，その分割された素片 C'D', C''D'' からの相互作用の平均を取ることで素片 CD からの相互作用とみなす．注目する節点と素片との位置関係から決定されるベクトル R, s, s_0 を用いて相互作用を算出するという点では先に述べた遠距離の場合と同一だが，対象となる素片の位置を仮にずらすことで素片の接近や素片サイズの微小化に伴う計算上の発散を防ぐことになる．本シミュレータでは注目する節点から両側に素片五つ分の範囲まではこの算出法を適用している．

2.3.3 隣接する素片との相互作用

同一転位内の隣接する転位素片からの相互作用を求める際にはベクトル R, s, s_0 が求められないため，以下の算出式を使用することとした．この方法では点 P に作用する隣接素片からの相互作用を応力として求める場合，点 P とその両側の転位節点を結ぶ円弧を二つに分解し，そこから転位芯の影響を見積もるのである．隣接節点からの影響は以下の式で表される¹⁵⁾．

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} &= [D1(s_{3i}s_{1j} + s_{3j}s_{1i}) + D2(s_{3i}s_{2j} + s_{3j}s_{2i})] \\ D1 &= (1-v)b_1\delta I_0 - vb_2\rho I_1 + \frac{1}{2}b_1[(1+v)\rho - (1-v)\delta]I_2 \\ &\quad - \frac{3v}{2}b_2\rho I_3 - \frac{b_1}{24}[(1+7v)\rho - (1-v)\delta]I_4 \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned}
D2 = & b_2 \delta I_0 - \nu b_1 \delta I_1 + \frac{b_2}{2} [(1 - 2\nu)\rho - \delta] I_2 \\
& + \frac{\nu}{6} b_1 (3\rho + \delta) I_3 + \frac{b_2}{24} [(8\nu - 1)\rho + \delta] I_4
\end{aligned}$$

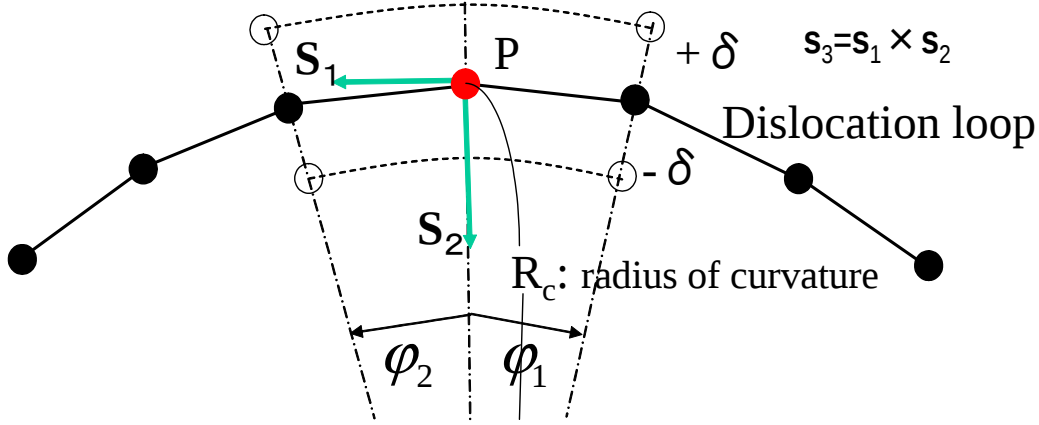


Fig. 2.5 The contributions from the two displaced arcs shown as solid lines are evaluated using Eqs. 2.4

ここで $\sigma_0 = \mu/4\pi(1-\nu)$, s_1 は節点における単位接線ベクトル, s_2 は曲率半径方向の単位ベクトル, $s_3 = s_1 \times s_2$ である. また $b_1 = b \cdot s_1$, $b_2 = b \cdot s_2$, $\rho = R_c + \delta$, $I_0 = f\phi/as$ であり, R_c は節点における曲率半径, δ は隣接素片をずらす幅, ϕ は隣接節点の曲率半径方向ベクトルとのなす角である. そのほかの係数は $I_1 = -f/s$, $I_2 = -f\phi/s + f \ln(s + \phi)$, $I_3 = f(2a + \phi^2)/s$, $I_4 = f\phi^3/2s - 3aI_2/2$, $f = R_c^{-3/2}(R_c + \delta)^{-1/2}$, $a = \delta^2/R_c(R_c + \delta)$, $s = (a + \phi^2)^{1/2}$ である. つまり $D1$, $D2$ は ϕ , δ の関数となっており, 点 P における応力は $\sigma_{ij}(\phi_2)$ から $\sigma_{ij}(\phi_1)$ の値を引いたものを $\pm\delta$ において平均をとることで求まる.

転位はその長さに比例する自己エネルギーを持っているため, 外的要因がなければその長さを短くしようとする. よってある区間内に曲線状の転位が存在すると, 転位をまっすぐにしようと, あたかも紐のようにその両端に線張力が働いていると考えることができる³⁾. しかしこの線張力という力はその自己エネルギーを小さくしようとする現象を擬似的に表現した力である. しかしながら本シミュレータでは線張力を何らかの計算から特別に付け加えることはせずに, すべての転位素片同士の相互作用をその距離に応じて算出し, 和をとることで転位ループ全体, あるいは他の転位ループとの相互作用と見なし, 結果として張力という形で自然発生的に付加される手法¹⁵⁾である.

2.3.4 他の転位との相互作用

前節で述べた転位同士の相互作用が再現できているかを確認するために，平行な直線状の転位に作用する力を弾性論とシミュレーションで比較を行った．

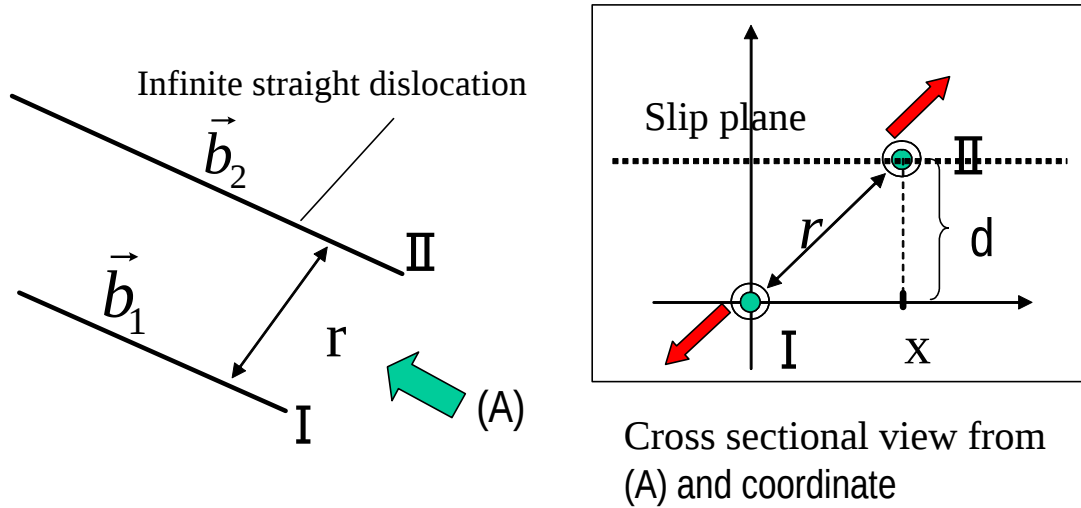


Fig. 2.6 Two infinite straight dislocation interact by repulsive or attractive force.

二本の平行な無限直線転位 $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ が存在する場合，その間に働く相互作用力は弾性論から求めることができる³⁾．転位 $\vec{b}_1$ が単位長さあたり受ける力は f_{rep} が共にらせん転位の場合

$$f_{rep} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi r} \quad (2.5)$$

と求まり， $\vec{b}_1$, $\vec{b}_2$ が共に刃状転位の場合

$$f_{rep} = \frac{\mu b_1 b_2}{2\pi(1-\nu)r} \quad (2.6)$$

として求まる．ここで μ はせん断率， r は転位間距離である．この値と前章の 2.3 で述べた手法によって求まる転位相互作用力の比較を行った．ただしシミュレーションでは無限長の転位は扱えないので，代わりとして長さ $20\mu\text{m}$ ，分割数 20 の二本の平行な直線状のらせん，刃状転位を用意し，転位 $\vec{b}_1$ が転位 $\vec{b}_2$ から受ける力を算出した．結果を Fig. 2.7 に示す．横軸 x/d は二本の転位間の位置関係を表し，縦軸は転位 $\vec{b}_1$ が転位 $\vec{b}_2$ から受ける力 f_{rep} のうち，すべり面に射影した成分の大きさである．二本の転位が刃状転位，らせん転位の場合共に， x/d がおよそ-2 から 2 の範囲ではシミュレーションと弾性論でほぼ一致し，転位間の相互作用力がシミュレーションで再現されているといえる．グラフの両端で弾性論とシミュレーションの値に若干の違いが見られるが，シミュレーションでは有限長の直線転位の相互作用を算出しているのに対し，弾性論では無限長の転位を想定しているため， x/d の値が大きくなるにつれて，つまり二本の転位間距離が大きくなるに従ってシミュレーションでは相対的に有限長であることが際立つので無限長を仮定している弾性論とは一致しなくなるのは当然の結果であるといえる．

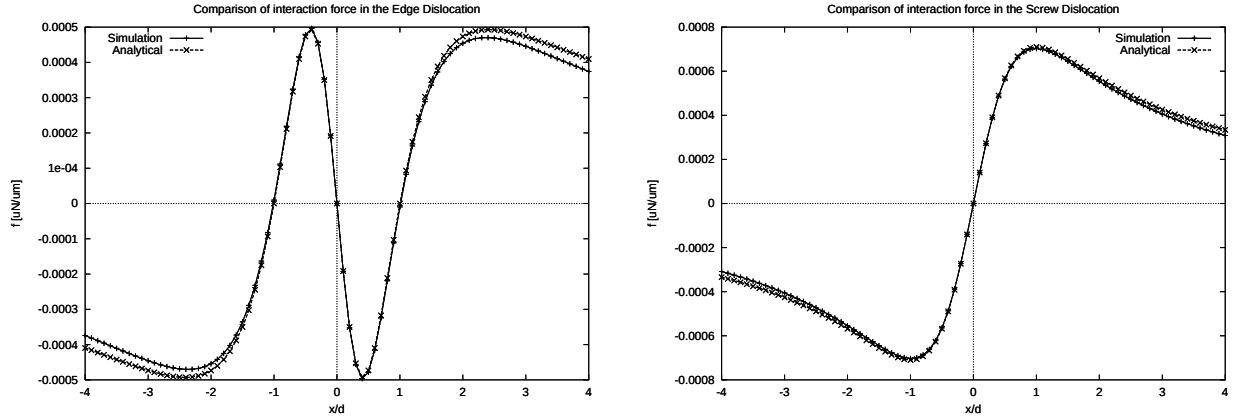


Fig. 2.7 Comparison of interaction force of two parallel straight dislocation between simulation and analysis. The left is two edge dislocation, and the right is two screw dislocation.

次に二本の互いに垂直な直線転位の相互作用について弾性論とシミュレーションで比較を行った．結果を Fig. 2.8 に示す．シミュレーションの解析条件としては長さ $100\mu\text{m}$ の転位 から距離 d だけ離れたところに，転位 に対して垂直に長さ $20\mu\text{m}$ の転位 を配置した．グラフの横軸は転位 上の位置を表し，縦軸は転位 が転位 から受ける単位長さ当たりの力である．転位 のどの位置においても精度良く相互作用力が求まっており，自身の 5 倍程度の長さの転位との相互作用では十分に無限長であるとみなすことができ，先ほどの結果を裏付けることともなっている．以上の結果から直線状の転位の場合には，刃状，らせん転位ともに弾性論との比較でも精度良く転位同士の相互作用力が求まっているといえる．

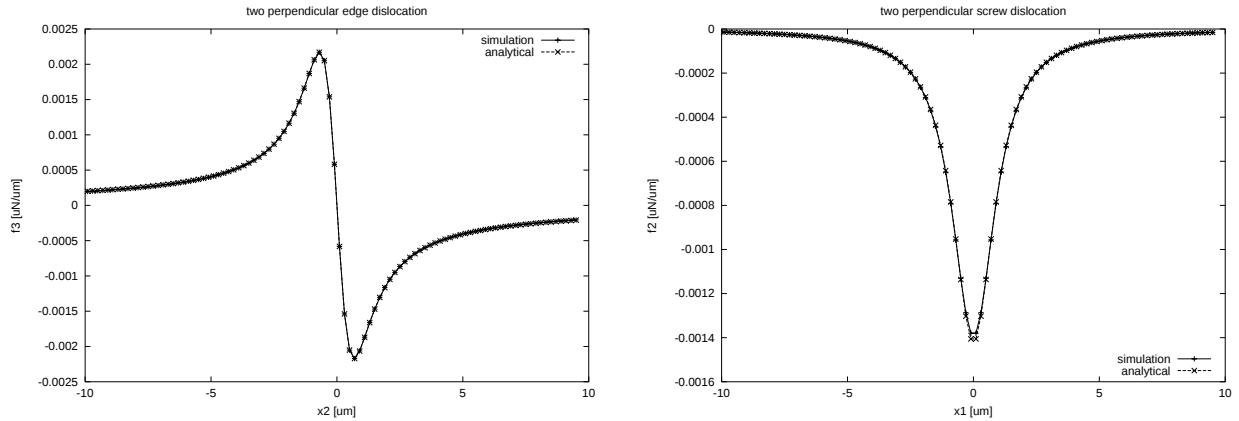


Fig. 2.8 Comparison of interaction force of two perpendicular straight dislocation between simulation and analysis. The left is two edge dislocation, and the right is two screw dislocation.

2.3.5 自己相互作用

転位はその長さに比例する自己エネルギーを持っているため、外的要因がなければその長さを短くしようとする。よってある区間内に曲線状の転位が存在すると、転位をまっすぐにしようとする力が働く。この力は転位を紐に見立てて線張力³⁾と呼ばれる。しかしこの線張力という力は転位がその自己エネルギーを小さくしようとする現象を擬似的に表現した力にすぎない。よって本シミュレータでは線張力を何らかの計算から特別に付け加えることはせずに、2.3節で述べたように転位素片同士の相互作用を計算することで自然発生的に付加される手法を採用している。そこで転位ループに加わる張力を例にとり、解析解とシミュレーションで求まる値で比較を行い、シミュレーションの精度を確認した。解析的に求まる線張力の近似式¹⁹⁾は以下の通りである。

$$\begin{aligned} F_l &\approx \frac{\mu b^2}{8\pi R(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} \{(2-\nu) + 3\nu \cos 2\theta\} \\ r_0 &\approx 5b \end{aligned} \quad (2.7)$$

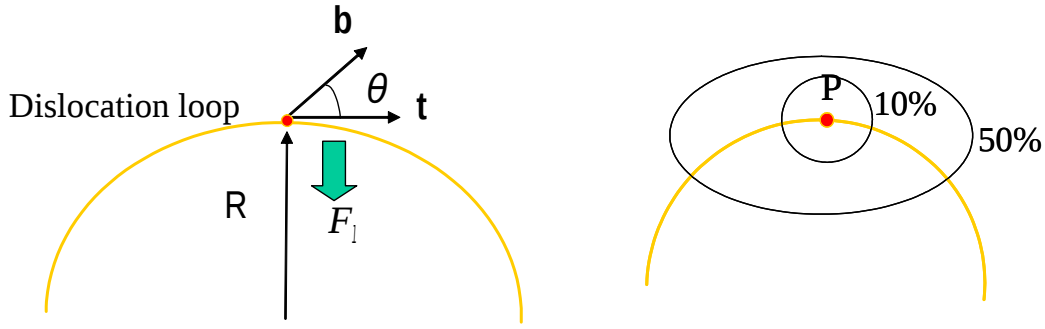


Fig. 2.9 Analytical model of line tension and the percentage of number of segments in the whole loop from P.

R は転位ループの曲率半径、 θ は転位のバーガスベクトルと転位線ベクトルのなす角である。ただし、銅中の転位形状の TEM 観察から算出された刃状転位とらせん転位の線張力の比が以下になるという仮定²¹⁾を採用した。

$$\frac{F_l^{screw}}{F_l^{edge}} \approx 2.5 \quad (2.8)$$

解析条件として 100 分割した半円状の転位ループの自己相互作用について、半径を $r = 0.1 \sim 10 \mu\text{m}$ 、また、Fig. 2.9 に示すように、相互作用を算出するのに必要な節点 P 周りの素片数を全転位素片の 2 ~ 100% と変化させ、近似的な解析解との比較を行った。結果を Fig. 2.10 に示す。左のグラフは刃状転位部、右はらせん転位部の線張力の比較結果である。横軸は転位ループの半径であり、今の場合曲率半径 R に等しい。縦軸は単位長さ当たりの自己相互作用力、一般に線張力と呼ばれるものである。どちらの場合もグラフの傾きが近似的な解析解とほぼ一致しており、実験の観察結果から推定された式 (2.8) を裏付けるものとなっている。また転位ループを構成する全素片の 8 ~ 10% に相当する節点 P 近傍素片の相互作用力が式 (2.8) で示される近似的な線張力に一致することもわかる。

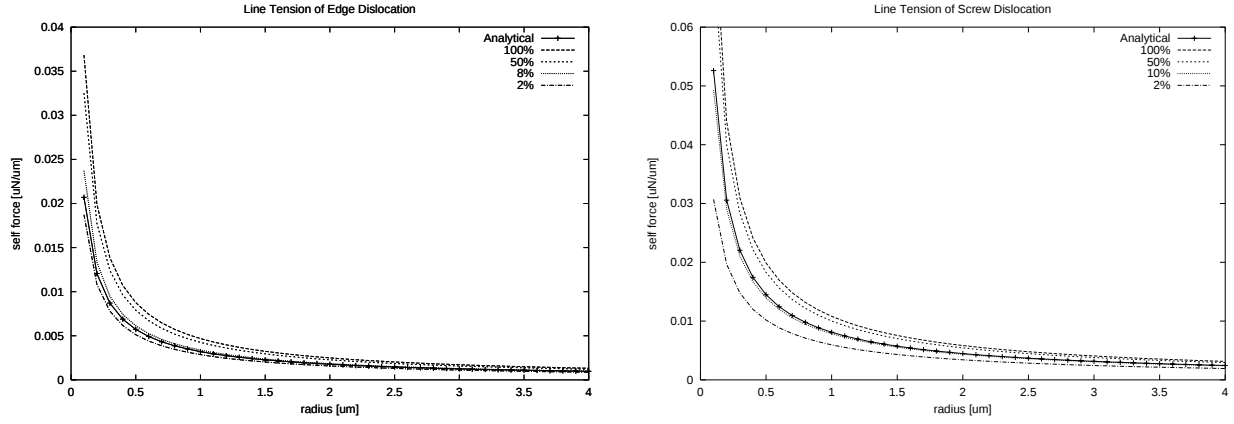


Fig. 2.10 Comparison the line tension of analytical solution with simulation, changing the radius of curvature of dislocation loop and the percentage of segments.

2.4 自由表面の影響

一般に転位は界面の影響を受ける. 現状では最も単純な場合として, 半無限の自由表面から受ける影響をシミュレータの中で再現できるようにした. 転位素片が自由表面から受ける力は以下の式で示される¹⁵⁾

$$\mathbf{f} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{ \mathbf{n}_1 |(1 - \nu \cos^2 \beta) \tan \theta| + \mathbf{n}_2 |2\nu \cos \beta \sin \beta| \} \quad (2.9)$$

μ はせん断率, ν はポアソン比で今回はシリコンの物性値として $60.5 \times 10^3 [\text{MPa}]$, 0.28 を

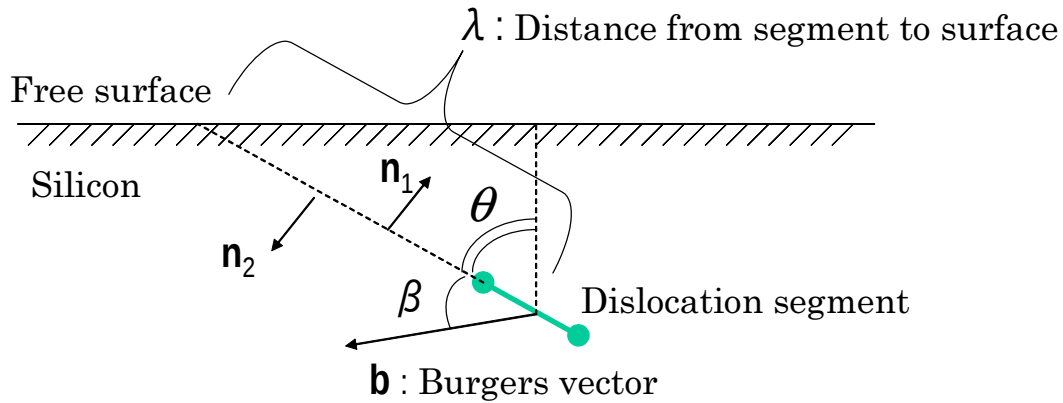


Fig. 2.11 The method of calculating the contribution of free surface to dislocation segment. The dislocation is treated as a straight line intersecting the surface.

使用した. λ は転位素片を延長したときに自由表面との交点までの距離であり, θ は転位素片と自由表面の垂直ベクトルがなす角, β は転位素片とバーガスベクトルがなす角である. また $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ はそれぞれ転位素片と自由表面垂直ベクトル, 転位素片とバーガスベクトルの二つのベクトルが作る平面上に存在する転位素片に対して垂直な単位ベクトルである. 内の第一項目は転位素片を自由表面に対して垂直に回転させようとする項であり, 第二項

目は転位素片をバーガースベクトル方向に回転させようとする項である²⁰⁾。ただし転位素片が自由表面に対して垂直な場合、式(2.9)は発散してしまうので内の第一項を取り除いた次の式を使用する¹⁵⁾。

$$f = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{n_2 |2\nu \cos \beta \sin \beta|\} \quad (2.10)$$

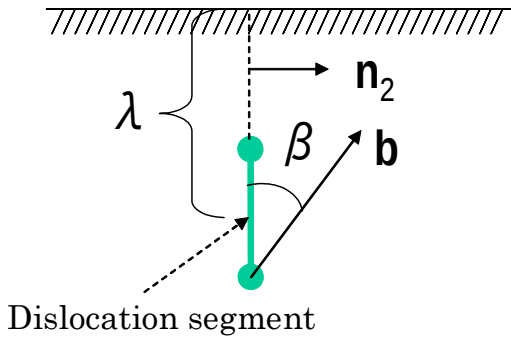
素片が自由表面に垂直か否かの判定には素片両端の節点座標値 (x_i, y_i, z_i) , $(x_{i+1}, y_{i+1}, z_{i+1})$ を使用し、例えば自由表面が z 軸に垂直な場合、 $|x_i - x_{i+1}| < 1.0 \times 10^{-10}$ かつ $|y_i - y_{i+1}| < 1.0 \times 10^{-10}$ という条件を満たす時、その素片は自由表面に対して垂直であるとした。

また、転位素片が自由表面に対して平行な場合、 λ を求めることができないので転位素片のバーガースベクトルをらせん転位成分と刃状転位成分に分解し、次の式から求めることになる。

$$f = \frac{\mu}{4\pi\lambda} \left(b_s^2 + \frac{b_e^2}{1-\nu} \right) \quad (2.11)$$

b_s はバーガースベクトルのらせん転位成分、 b_e は刃状転位成分である。求まる値はスカラー量であり、力の向きは自由表面に対して垂直である。素片が自由表面に平行か否かの判定には先程と同様に、素片両端の節点座標値 (x_i, y_i, z_i) , $(x_{i+1}, y_{i+1}, z_{i+1})$ を使用する。例えば自由表面が z 軸に垂直な場合、 $|z_i - z_{i+1}| < 1.0 \times 10^{-10}$ という条件を満たすならば、その素片は自由表面に対して垂直であると判断する。

(a) Segment is perpendicular to the surface



(b) Segment is parallel to the surface

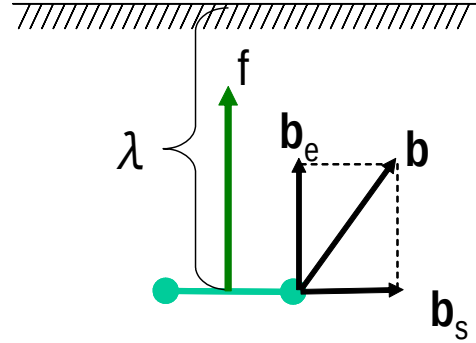


Fig. 2.12 The method of calculating the contribution of free surface to dislocation segment in the case that segment is perpendicular and parallel to the surface.

式(2.9)～式(2.11)を使用して自由表面の影響を算出する場合、転位素片の自由表面に対する距離 λ が 0 に近づくにつれ求まる値が発散してしまう。よってカットオフ距離 λ_c を設け (今の場合 $\lambda_c = 0.4 \times 10^{-3} [\mu\text{m}]$ とした)、その値より自由表面に近い転位素片に働く力は 0 とした。また転位ループの端点は常に自由表面上に存在するように step 毎にその節点の位置を補完している。

2.5 動的転位素片分割

本シミュレーションでは転位ループを複数の直線要素に分割しているが、その離散化された転位素片が大きくなりすぎると適切な線張力を付加できなくなる一方、転位素片が小さくなりすぎると節点の入れ違いがおきてしまう。特に応力場、応力勾配の大きい箇所では一つの転位素片の大きさが全体の転位形状に与える影響を及ぼしてしまう。よって転位素片のサイズに基準値を設定し、シミュレーションステップごとに分割数を変化させなければいけない。つまりある素片の長さが基準値 Δl_{max} より大きければ新たな中間節点を作成し、基準値 Δl_{min} より小さければ節点を削除する。

ただし転位素片の分割をその大きさのみによって制御すると、転位の形状が直線に近く、かつ素片分割が細かい場合、第 2.3 節で述べた相互作用を求める際の ϕ やベクトル R, s, s_0 の大きさによるカットオフとの関係で、得られる値が節点ごとにばらつき、転位形状が振動してしまうといった問題が生じる。また、転位の分割数が不必要に増大することは計算時間の増加にもつながる。そこで転位節点近傍の局所的な曲率半径による転位素片サイズの制御基準¹⁵⁾を導入し、上記の問題を解決することを目指した。具体的には、転位素片サイズを Δl 、曲率半径を R_c とする時、以下の関係が満たされるように転位分割数を制御する。ただし、転位の形状を著しく損なわないような Δl の上限、下限を設定する。

$$\frac{\Delta l}{R_c} \approx 0.1 \sim 0.2 \quad (2.12)$$

次に述べるような転位同士の相互反応が起こりうる近傍や、応力勾配が急峻で転位素片の運動が大きな部分を除いてシミュレーションステップごとにすべての転位素片に対して式 (2.12) の関係が満たされるかを調べ、不適合な場合には転位節点の移動や生成、消滅を行う。

2.6 一様応力場での転位の基本的な運動

前節までの手法に基づき三次元の転位シミュレータを作成した．以下では転位の基本的な運動が再現されているかを確認するために行った簡単なシミュレーションの結果を示す．なお解析条件として， $T=1000$ ，時間刻みは1 step あたり 1.0×10^{-4} [s] で全て共通である．

2.6.1 外力のみによる転位の運動

シリコン結晶中のあるすべり面に存在する円形の転位ループを仮定し，そのすべり面に対してせん断応力を作用させた場合の解析を行った．総シミュレーション時間は1000 step= 1.0×10^{-1} [s] である．せん断応力 $\tau_{xy} = -10.0$ [MPa] の時は転位ループの半径が 1.00 [μm] から 15.0 [μm] へと拡大し，せん断応力 $\tau_{xy} = 10.0$ [MPa] の時は半径が 15.0 [μm] から 0.95 [μm] へと収縮し，外力による転位の運動が再現されていることを確認した．

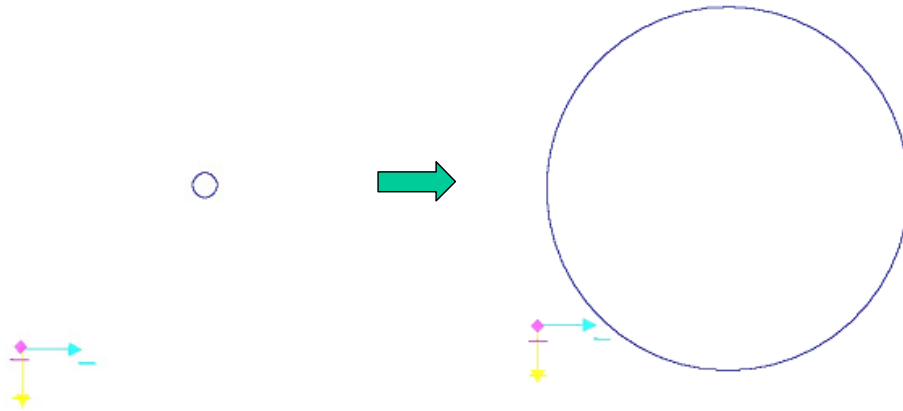


Fig. 2.13 Dislocation expands by the external glide force.

2.6.2 同一転位内の影響

同様にシリコン結晶中に存在する円形の転位ループを仮定し、同一転位内における素片同士の相互作用力のみを作用させた場合の解析を行った。総シミュレーション時間は1500 step = 1.5×10^{-1} [s] である。Fig. 2.14 に示すように転位ループが収縮し、素片同士の相互作用の和が一般に言われる「線張力として再現されていることが確認された。

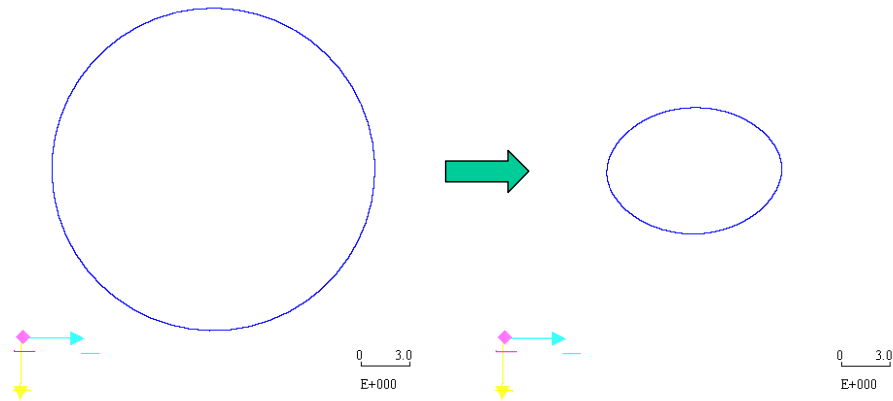


Fig. 2.14 Dislocation shrinks by the self force.

2.6.3 自由表面の影響

シリコン結晶中に円形の転位ループを自由表面に対して斜めに配置し、自由表面からの影響のみを作用させた場合の解析を行った。総シミュレーション時間は2100 step = 2.1×10^{-1} [s] である。Fig. 2.15 に示すように転位が自由表面に引きつけられていく様子が再現できた。

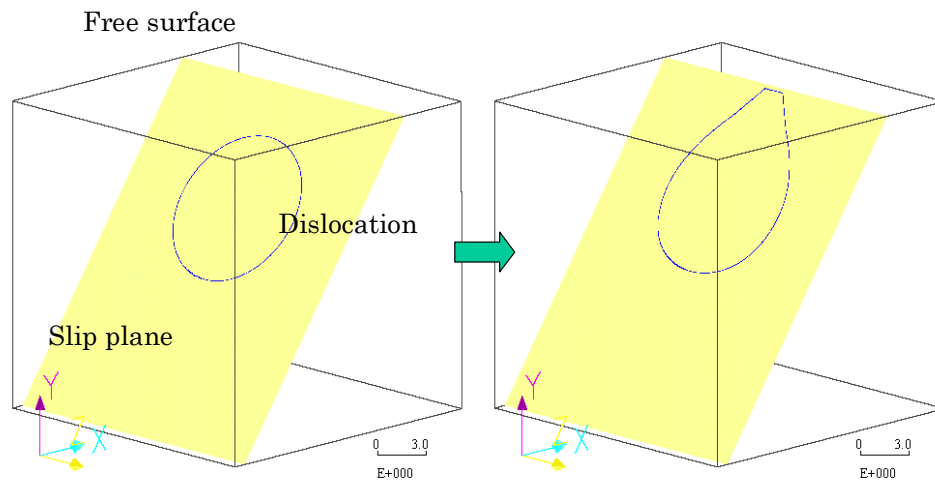


Fig. 2.15 Dislocation is attracted by the free surface.

最後にこれまでの三つの影響 (外力, 自己相互作用, 自由表面の影響) を同時に作用させたシミュレーションを行った. 総シミュレーション時間は $970 \text{ step} = 0.97 \times 10^{-1} \text{ [s]}$ である. すべり面は $(-1-11)$, 転位のバーガースベクトルは $[101]$ とし, 8.0 [MPa] のせん断応力を転位ループが拡大するように作用させて解析を行った. 転位素片に複数の作用が影響を及ぼす場合でもその運動が再現されることを確認した.

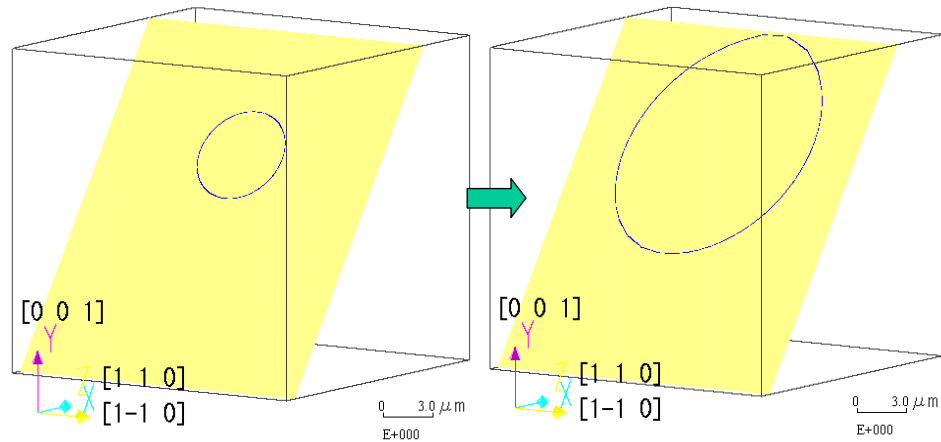


Fig. 2.16 Dislocation is driven by the external glide force, the self force and the effect of free surface.

2.7 転位同士の近接反応

本研究で扱っている転位動力学シミュレーションは原子のずれである転位を連続体中に存在する一様な線状の欠陥として近似している．そのため annihilation や junction といった転位芯がからむ転位同士の反応は前節までに述べてきた手法では，シミュレーションで自然に発生させることができない．そこで何らかの基準を設けてこれらの反応が起こるか否かを判定し，再現する必要がある．以下ではその手法について説明する．

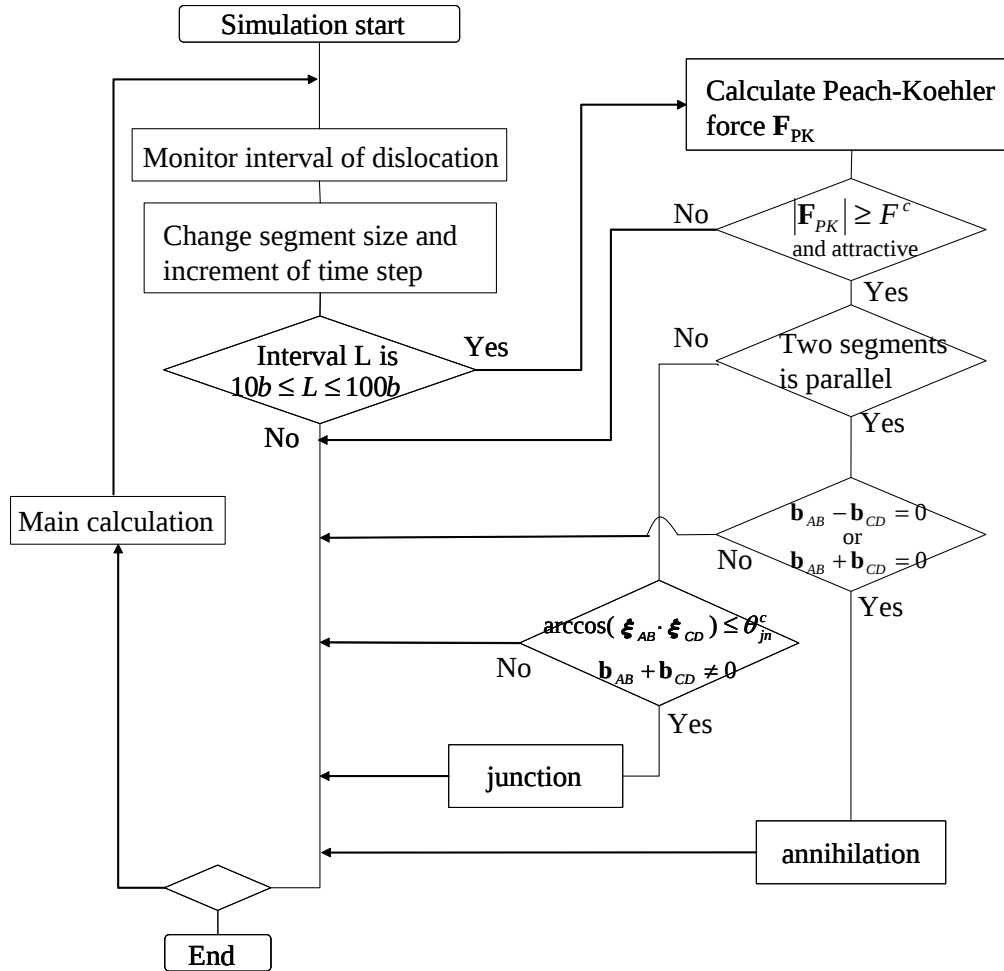


Fig. 2.17 Flow chart of the numerical algorithm for short-range reactions.

2.7.1 素片分割・時間増分制御

転位同士の近距離反応をシミュレートする上で必要になってくる機能が隣接する転位素片同士の細分化とシミュレーションステップである時間刻み幅の調整である．転位素片の細分化については前節で素片サイズと曲率半径 R_c による制御を行うと述べたが，二つの転位が接近しつつある場合は別の基準によって転位素片サイズの制御を行わなければならない．これは近距離作用によって反応する転位の，反応箇所近辺の形状をできるだけ正確

に再現する必要があるためである．一つの転位素片の大きさを Δl ，その素片と他の転位ループに属する最近接の転位素片との距離を L とする時，次式の関係¹⁵⁾ が成り立つように素片サイズ制御を行った．

$$\Delta l \cong aL \quad (2.13)$$

本シミュレーションでは $a = 0.5$ とした．二つの転位ループが接近していくにつれ素片が微小化していくが，対象としている近距離反応を十分に再現できる素片サイズの下限値を設け，無限に小さくなることはない．

上記の制御と同時に必要なもう一つの制御が時間刻み幅の調整である．近接しつつある素片同士には大きな引力，あるいは斥力が働く場合が多く，1 step のシミュレーションで素片同士が互いに交錯したり大きく変位してしまうとシミュレーションとして成り立たなくなる．そこで全ての素片に対して，1 step の移動量がその素片長さに比べて十分小さくなるように時間刻み幅を調整した．具体的には 1 step での移動量が最小素片サイズの 10 分の 1 以下となるようにしている．さらに，素片が接近している場合には 1 step で素片同士が近距離反応を起こすこと無く相手の素片と交錯あるいは追い越してしまわないように時間刻み幅の調整を行うこととした．

2.7.2 反応条件

次に転位同士が反応を起こす条件について述べる．上記の手法で接近してきた転位が近距離反応を起こすかどうかを判定する基準として二つの条件を設けた．一つ目は転位素片間の距離によって判定する距離基準，二つ目はその転位素片に作用している応力によって判定する応力基準である．距離基準としては転位素片間距離 L が次式¹⁸⁾ を満たす必要があるとした．

$$10b \leq L \leq 100b \quad (2.14)$$

また応力基準は素片に加わるピーチケーラー力 $F_{PK} [\mu\text{N}/\mu\text{m}]$ がある値 F^c ¹⁸⁾ を超えた時に近距離反応が起こり得ると判定する基準である．

$$\begin{aligned} |\mathbf{F}_{PK}| &\geq F^c \\ \frac{F^c}{|b|} &= C + \bar{\tau} \end{aligned} \quad (2.15)$$

$\bar{\tau}$ は転位が存在する結晶の「場」の応力，つまり転位同士の相互作用以外による外力であり， C は今の場合 200 [MPa] である．よって式 (2.15) は外力の影響を除いて純粋に転位素片に加わる転位同士の相互作用による応力が C 以上ならば転位同士の相互反応が起こると判定しているのである．

以上の距離基準と応力基準の二つの基準を満たすことを必要条件として，何らかの転位同士の近距離反応が起こり得るものとした．

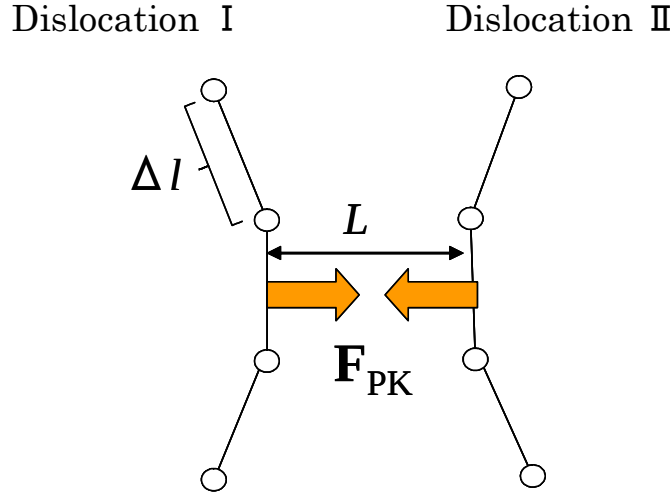


Fig. 2.18 When two dislocation come close, the reaction possibility is judged interval L and contribution force F_{PK} condition.

2.7.3 annihilation

異なる転位ループに属する二つの転位素片 AB, CD がともに引力作用を受け, 前述の距離応力条件 (式 (2.14), 式 (2.15)) を満たし, かつ転位線ベクトル ξ とバーガースベクトル $\mathbf{b}$ が以下の条件¹⁸⁾ を満たす場合, 消滅が起こるものとする.

$$\begin{aligned} \xi_{AB} \cdot \xi_{CD} \approx -1 \quad \text{and} \quad \mathbf{b}_{AB} - \mathbf{b}_{CD} = 0 \\ \text{or } (\xi_{AB} \cdot \xi_{CD} \approx -1 \quad \text{and} \quad \mathbf{b}_{AB} + \mathbf{b}_{CD} = 0) \end{aligned} \quad (2.16)$$

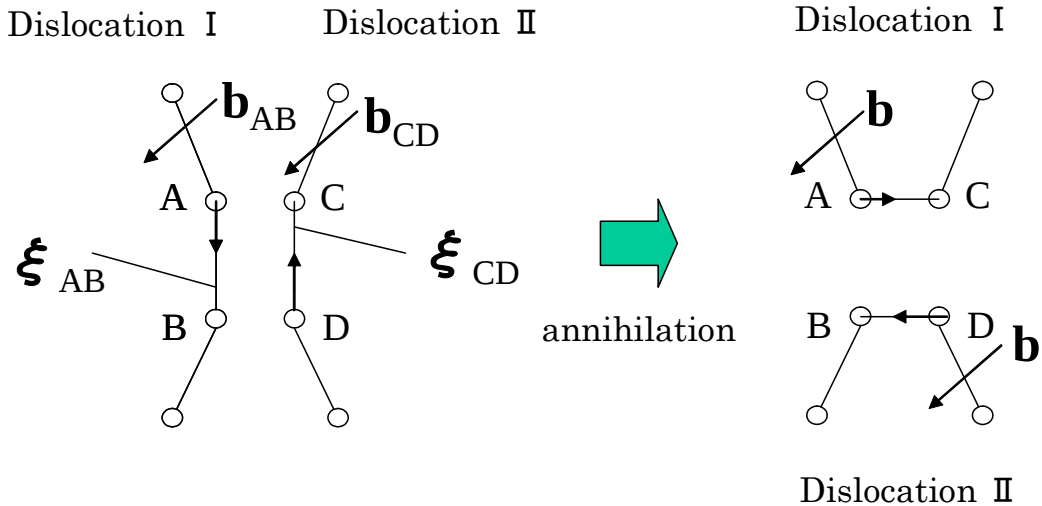


Fig. 2.19 Annihilation mechanism for two attractive dislocation segments.

式 (2.16) の意味は, 二つの転位素片がほぼ平行で, 転位線方向が逆向きかつバーガースベクトルが同一である場合, あるいは転位線方向が同じ向きかつバーガースベクトルが逆向きの場合が消滅の起こる必要条件であることを表している.

前章の 2.7 節で述べた転位同士の近接反応の手法をシミュレータに実装し，その機能の確認を行った．annihilation については，最初に最も単純な場合を想定して同一すべり面上に二つの円ループを用意し，一様なせん断応力を付加することで二つのループを拡張させ，反応させるシミュレーションを行った．junction については自由表面に接した同一すべり面上に半ループを二つ用意し，一様なせん断応力を付加して転位ループを拡張させ，反応が起きることを確認した．

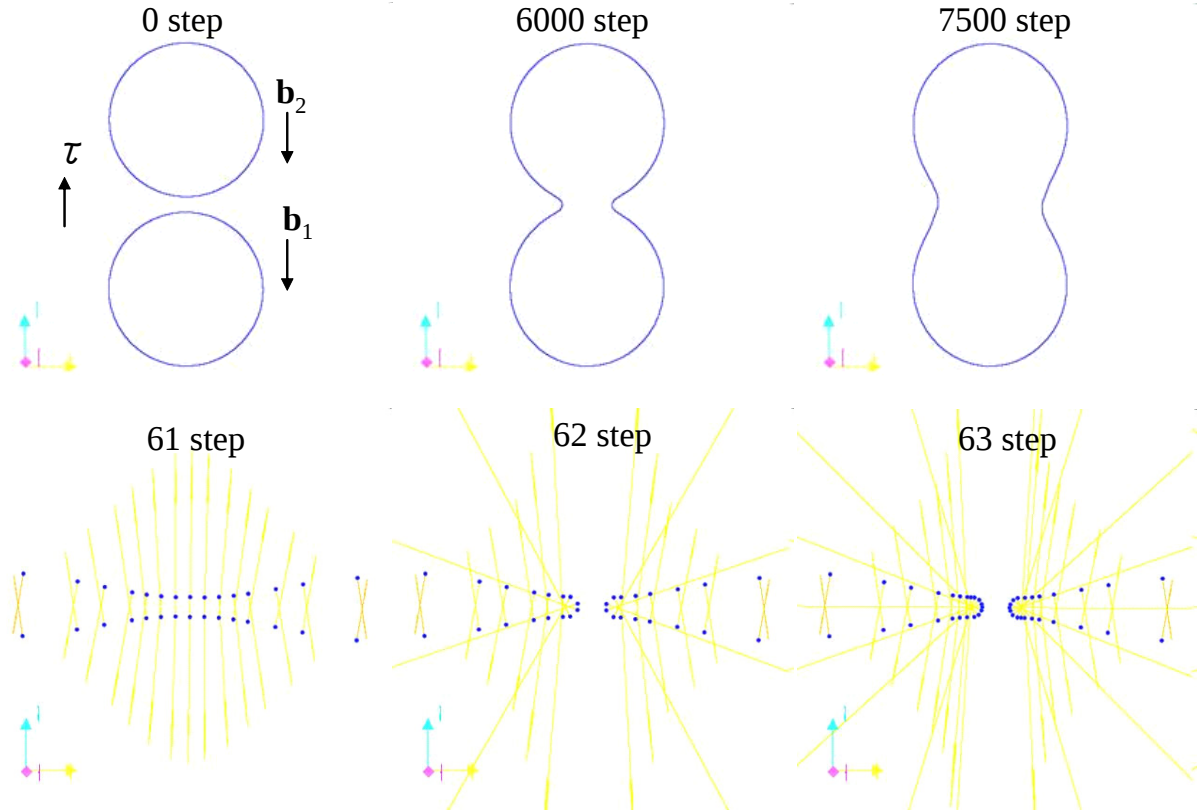


Fig. 2.20 Results of annihilation simulation in the case of two dislocation circle.

二つの円ループの場合のシミュレーション結果を Fig. 2.20 に示す．上段の三枚の絵は二つの転位ループが外力によって拡張し，annihilation を起こした後も一つのループとなって運動している様子を表している．下段の三枚の絵は annihilation を起こす瞬間の二つの転位ループの反応部分の節点の拡大図である．61 step 目で式 (2.14), (2.15), (2.16) を満たし，62 step 目で annihilation の反応を人為的に起こした後，63 step 目以降では反応を起こして再結合した部位には自動的に節点が補完されると共に，その曲率の大きさによって大きな張力が働き，大きくたわんだ部分を張り戻す運動が再現されていることがわかる．

次に窒化膜応力特異場中での転位の annihilation のシミュレーションの結果を Fig.2.21 に示す．同様に上段三枚の絵は反応全体を表しており，下段の三枚の絵は反応を起こした瞬間の転位節点の拡大図である．annihilation によって再結合した部位には大きな張力が働いて張り戻され，その後一つの転位ループとなって窒化膜端に広がっていく運動が再現されている．

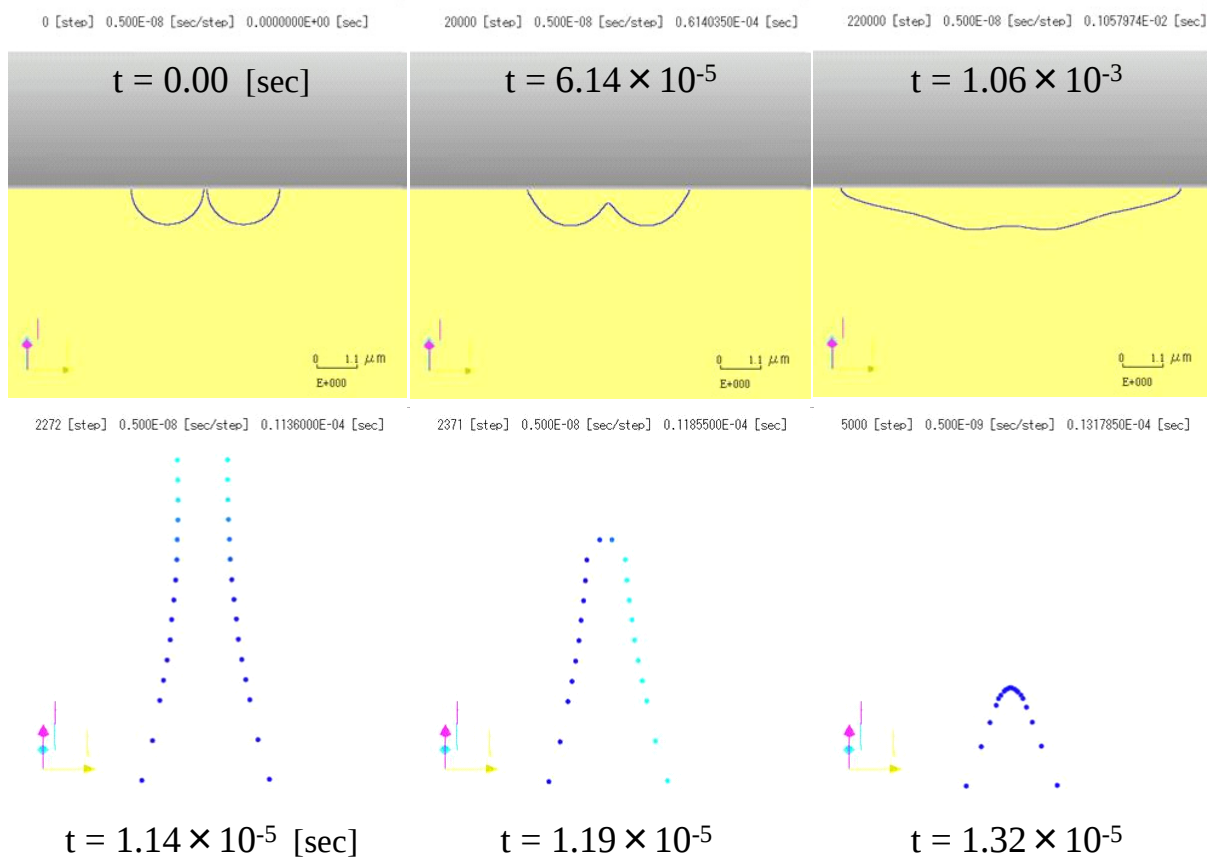


Fig. 2.21 Results of annihilation simulation in the case of two dislocation half loop in the stress field of a nitride thin film.

2.7.4 junction

同様に二つの転位素片がともに引力作用を受け，距離応力条件 (式 (2.14)，式 (2.15)) を満たし，かつ転位線ベクトルとバーガースベクトルが以下の条件¹⁸⁾を満たす時，junction が起こるものとする．

$$\theta_{AB-CD} = \arccos(\xi_{AB} \cdot \xi_{CD}) \leq \theta_{jn}^c \quad \text{and} \quad \mathbf{b}_{AB} + \mathbf{b}_{CD} \neq 0 \quad (2.17)$$

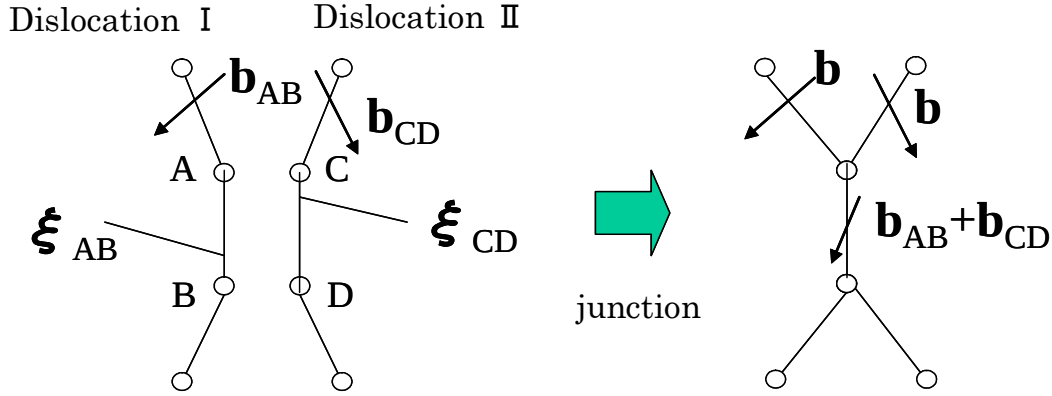


Fig. 2.22 Schematics of junction formation mechanism.

式 (2.17) では θ_{AB-CD} は近接する転位素片 AB, CD がなす角を意味し， θ_{AB-CD} が臨界面角 θ_{jn}^c (今回は 20°) 未満，かつ二つの転位素片のバーガースベクトルが和をとっても消滅しない時に反応が起こることを表している．junction 後の転位素片のバーガースベクトルがすべり面のすべり方向に一致しなければこの転位素片は不動化することになる．

Fig. 2.23 に junction のシミュレーション結果を示す．上段の絵は反応全体の様子，下段の絵は反応部分の節点の拡大図である．これまでの annihilation のシミュレーションと同様に転位ループには互いにひきつけあう力が働いているが，バーガースベクトルの向きが一致しないため annihilation を起こさず，junction を起こすことになる．また転位ループのうち junction を起こした部位はバーガースベクトルがこのすべり面のすべり方向に一致しないため，不動転位となっている．

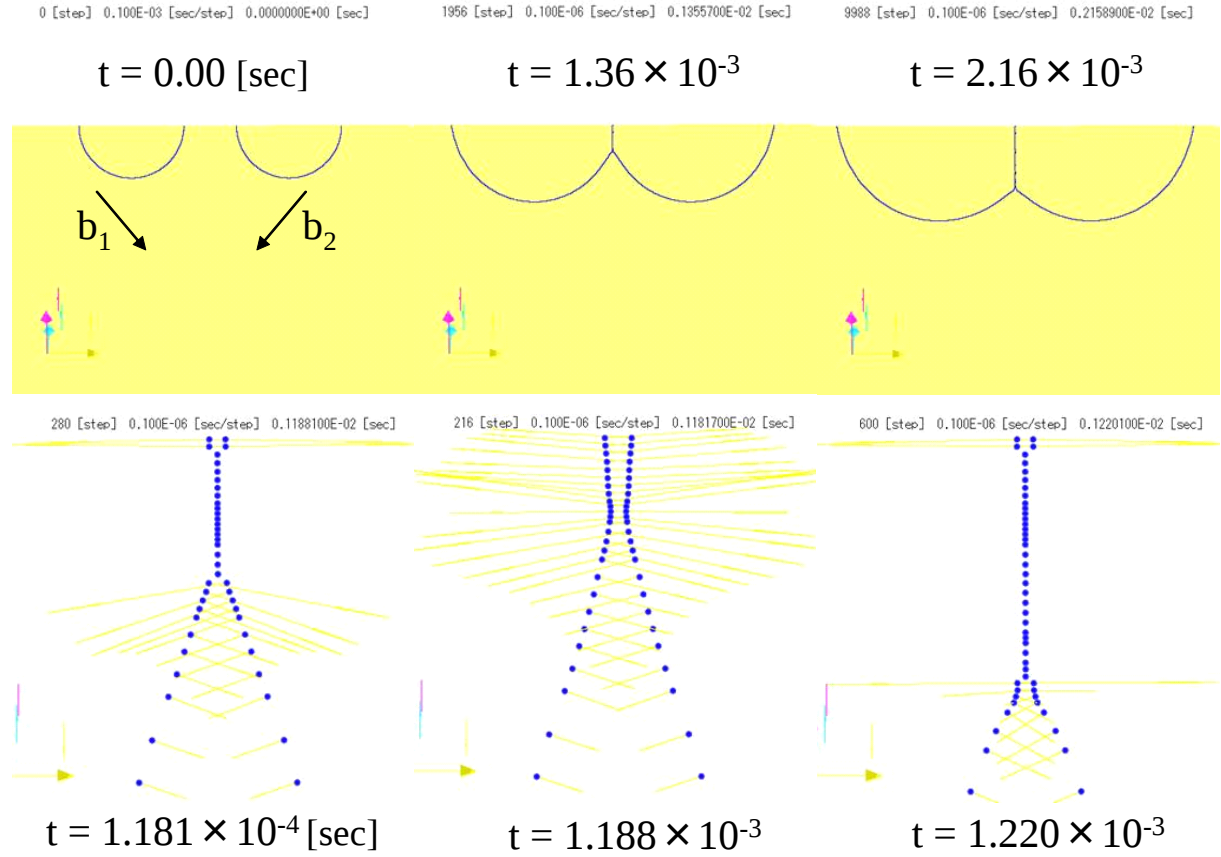


Fig. 2.23 Results of junction simulation in the case of two dislocation half loop.

第3章 STIに対する適用

3.1 緒言

STI (Shallow Trench Isolation) とは ULSI 等の半導体デバイス内部において素子間に絶縁体である SiO_2 の溝を形成することで素子同士を電氣的に分離する構造のことである。代表的な構造を Fig. 3.1* に示す。シリコン基板上の AA (Active Area) が幅 $0.3 \mu\text{m}$ の STI によって分離されているのがわかる。STI によって基板全体に占める素子分離領域の面積を小さくすることが可能であるため²³⁾，LSI の高集積化には欠かせない技術となっているが，シリコンから成る Active Area において転位が発生した場合，電気特性が劣化することが問題となっている。これまで応力解析と結晶の塑性変形を解析するソフトウェアによって STI に発生する転位の密度分布を議論する研究が行われている²⁴⁾。しかしながら数本の転位ループが電流のリーク源と成り得る実際のデバイスにおいては無転位の状態であることが前提であるため，本章では STI の応力解析を行う共に開発した転位動力学シミュレータを一本の転位ループに適用し，実際のデバイスに発生した転位の TEM 写真とシミュレーション結果を比較することで検証を行う。

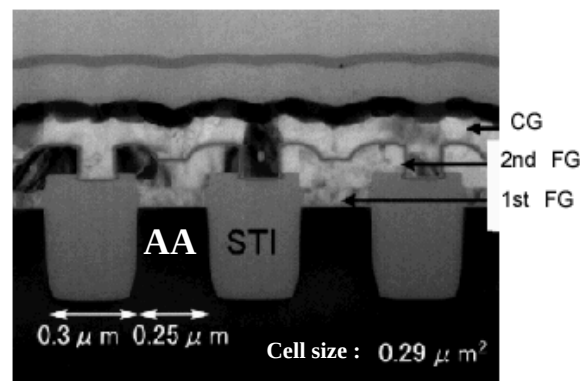


Fig. 3.1 Example of STI structure.

*黒田忠弘，“LSI 設計に必要なデバイス基礎知識”，<http://www.kuroda.elec.keio.ac.jp/classes/EE-LSI-1/pdf/class2.pdf>

3.2 解析手法

3.2.1 モデルの設定

日立製作所から提供された STI の TEM 写真をもとにフィレット部の構造等を簡略化することで解析対象のモデル化を行った．寸法とあわせて Fig. 3.2 に示す．基本的な構造は Si が SiO_2 によってサンドイッチされ，その上部に Poly-Si から成るゲートが乗せられているものとなっており，周期的に対称性を持って並んでいる構造となっている．単位セルのサイズはおよそ $5\text{ }\mu\text{m} \times 2\text{ }\mu\text{m}$ ，Active Area 幅は $0.32\text{ }\mu\text{m}$ ，STI 深さ $0.46\text{ }\mu\text{m}$ ，ゲートの高さ，幅を $0.6\text{ }\mu\text{m}$ とした．

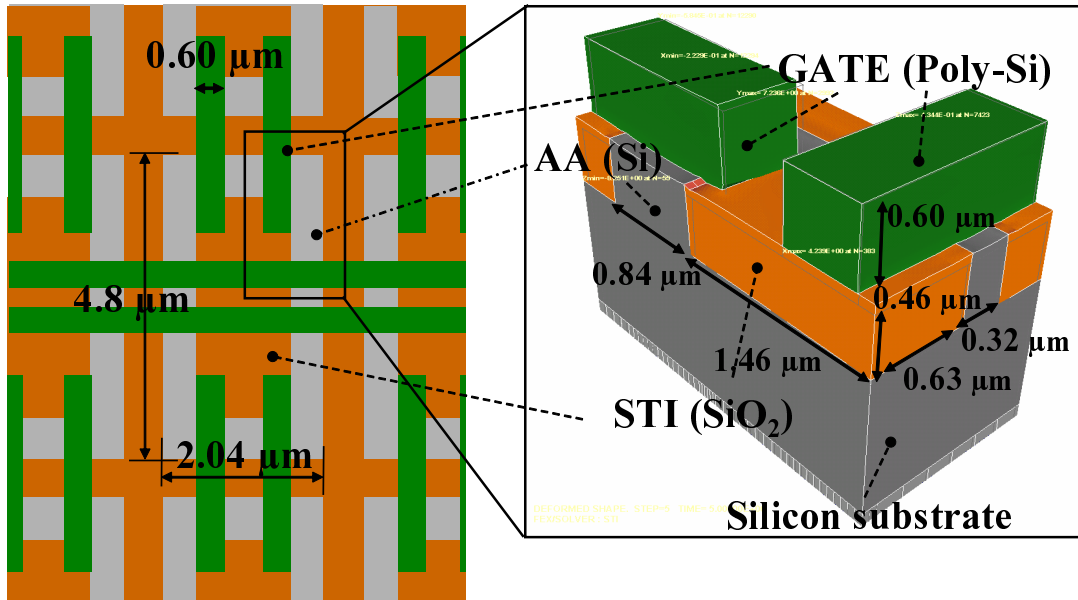


Fig. 3.2 Schematics of STI plane view in the substrate and the 1/4 analysis model of the unit cell.

3.2.2 応力解析

Active Area に発生する転位は主に STI 製造プロセス中に生じる応力に起因すると考えられるため，有限要素法による応力解析を行った．作成した FEM モデルを Fig. 3.3 に示す．解析モデルの対称性から単位構造の 1/4 の有限要素モデルを作成した．使用した要素は六面体一次要素で総要素数は 16928，総節点数は 19034 である．境界条件として x ， y ， z 方向の各一面を面方向並進固定とし， x ， z の反対側の面をそれぞれ面方向カップリングとして面内における面方向変位を同一にする拘束条件を与えた．これは実際の素子構造では STI 深さが $0.46\text{ }\mu\text{m}$ であるのに対しシリコン基板全体の厚さがおよそ $5\text{ }\mu\text{m}$ 程度と上部の構造に比べて十分に厚いため，シリコン基板が均一に変形する状態を模擬させるためである．また応力が発生し，転位動力学シミュレーションに必要な領域は STI 近傍であり，応力がほとんど発生しないシリコン基板の厚さはこの領域に比べて 10 倍程度大きいため，等価剛性要素を使用して基板部分の要素数を大幅に削減した．等価剛性要素とは基板の

大部分を等価な剛性を持つ薄い構造に置き換えるための要素であり，今の場合 STI 深さを t_0 ，実際の基板厚さを t_1 ，縮小した場合の厚さを t'_1 とするとき，元のシリコン基板ヤング率 E_1 に等価なヤング率 E_0 は以下の式によって与えられる²⁵⁾．材料物性値は Active Area が Si，STI が SiO_2 ，ゲートは Poly-Si（多結晶シリコン）で形成されているものとし，等方性を仮定した．使用した値を Table 3.1 に示す．

$$E_0 = \frac{t_1 - 4t'_1}{4t_0} E_1 \quad (3.1)$$

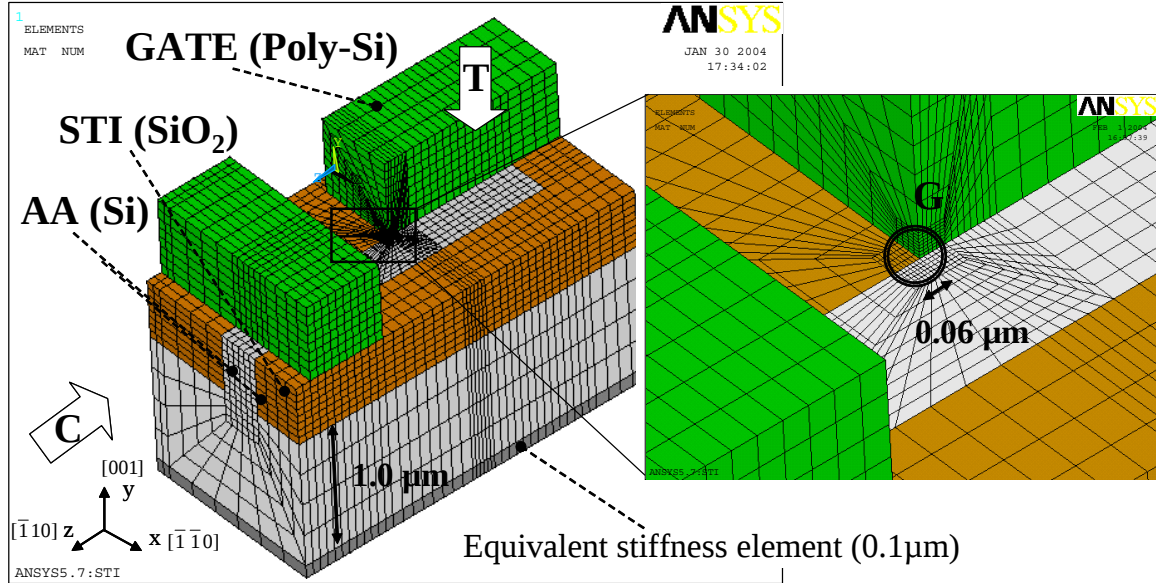


Fig. 3.3 3D FEM mesh of the 1/4 analysis model of the unit cell.

Table 3.1 Material constants used in the FEM.

material	young ratio [GPa]	poisson ratio	linear thermal expansion coefficient [1/]	Initial stress [GPa]
Si	170	0.20	3.0×10^{-6}	-
SiO_2	70	0.17	0.87×10^{-6}	-0.80
Poly-Si	170	0.20	3.0×10^{-6}	1.0
Equivalent stiffness Si	1.9×10^5	0.20	3.0×10^{-6}	-

STI 製造プロセスの概略を Fig. 3.4 に示す．(a) シリコン基板上に STI を形成する溝を掘り，(b)1000℃まで温度を上昇させて熱酸化を行いシリコン表面に酸化膜を形成する．(c) 温度 500～600℃において CVD(Chemical Vapor Deposition) によって SiO_2 を形成し，(d)1000℃まで温度を上昇させアニールによる応力緩和を行う．(e)570℃まで冷却を行い Poly-Si を成膜し，(f) その後のプロセスでイオンインプランテーションやアニールを経るという流れになる．これらの一連の工程で応力が発生する主な原因としては Si と SiO_2 の

熱膨張率の違いから生じる熱応力， SiO_2 や Poly-Si の成膜時に発生する真性応力の二点が考えられる．そこで応力解析では温度を変化させると共に，生成される順番に材料物性の異なる要素を付加していく複数ステップの解析を行った．また SiO_2 には 800 MPa の圧縮の初期応力，Poly-Si には 1.0 GPa の引っ張りの初期応力を与えた．Fig. 3.5 に解析における各 step の温度変化を示す．初期状態で存在する要素は Si と等価剛性 Si のみであり，step 0-1 で温度を室温から CVD によって SiO_2 を形成する 500 まで上昇させ，step 1-2 で初期応力-800 MPa を有する SiO_2 の要素を付加させる．step 2 までの段階では Fig. 3.4 の (a) ~ (c) に相当し，(b) の酸化膜，(c) の SiO_2 に生じる応力をまとめて SiO_2 に対する 800 MPa の圧縮の初期応力として与えている．続く step 2-3 では Poly-Si を形成する 570 まで温度を上昇させ，step 3-4 において初期応力 1.0 GPa を有する Poly-Si の要素が付加され，(e) の状態に対応する．step 4-5 では (f) と同様に製造プロセスで行われるアニールを模擬するため 1000 まで温度を上昇させる．温度を一度上昇させてから冷却する過程 ((a)→(c)，(c)→(e)) は FEM 内では全物質が一様に膨張した後に収縮するだけで応力が発生しないので省略している．

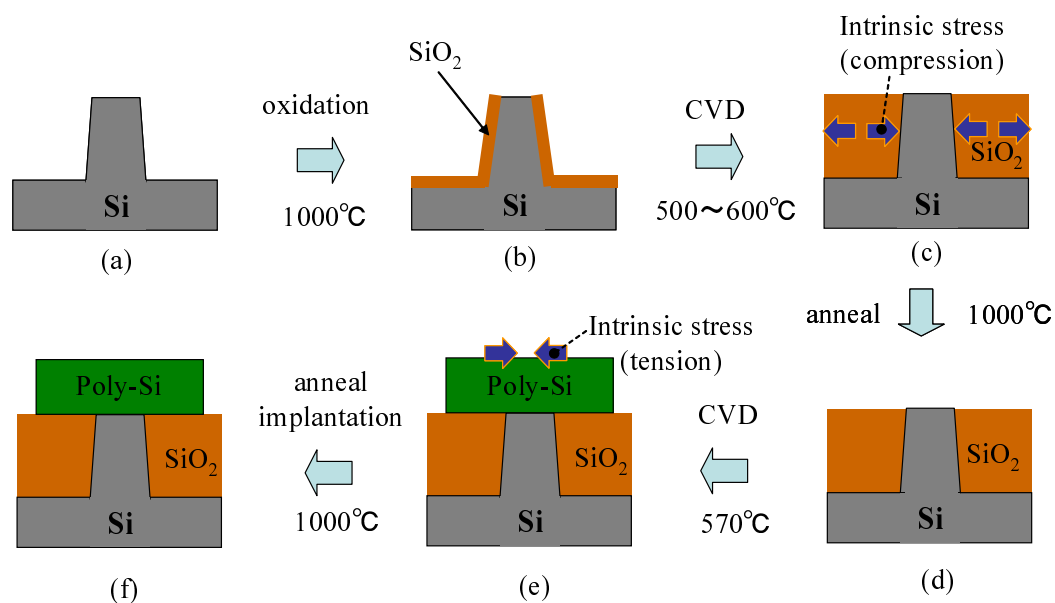


Fig. 3.4 Fabrication process of STI.

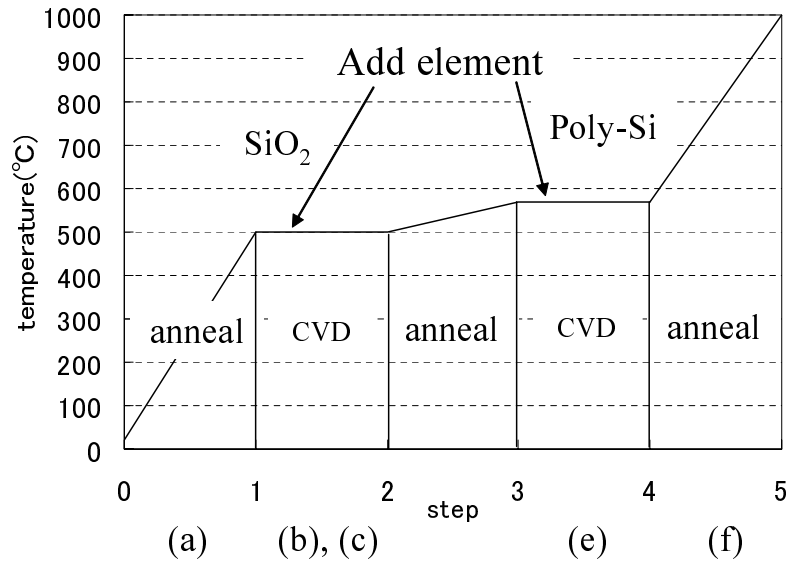


Fig. 3.5 Fabrication process of STI for FEM analysis.

3.2.3 解析結果

各ステップにおける変形図を Fig. 3.6 に示す．表示上の都合，step 1 からすべての要素が描かれているが，実際は Fig. 3.5 に従い step 2 で SiO₂，step 4 で Poly-Si の要素が付加されている．step 1 では A の部分を見てわかるようにシリコン基板が 500℃ までアニールされることにより熱膨張を起こしている．step 2 では付加された SiO₂ の要素が圧縮の初期応力を与えられているために膨張し，B の領域にあるシリコンを圧縮する変形を起こしている．step 3 では温度上昇に伴い全体が膨張を起こし，step 4 では付加された Poly-Si の要素が引っ張りの初期応力によって収縮していることが C の領域からわかる．step 5 では再び全体が膨張している．さらに step 5 の応力分布について Fig. 3.2 に示した G を通る xy 切断面の σ_x の応力コンター， σ_y ， σ_z の G を通る yz 切断面の応力コンターを Fig. 3.7 に示す． σ_x ， σ_z の分布から Active Area 全体では圧縮の力が働き，G 近傍では引っ張りの力を受けていることがわかる．最も大きな応力が発生するのは G の領域で，1 GPa 以上の応力が発生していることがわかった．これは拘束を受けていない Poly-Si 端が引っ張りの真性応力を受けることで下部の Si，SiO₂ を持ち上げるように変形するためと考えられる．Fig. 3.8 に G を通る yz 切断面内のミーゼス相当応力の分布を示す．step 2 と step 3，step 4 と step 5 の応力分布を比べた場合，SiO₂ や Poly-Si の真性応力によって発生する応力が支配的であり，熱応力による影響は小さく，逆に応力を解放する方向に作用していることがわかる．

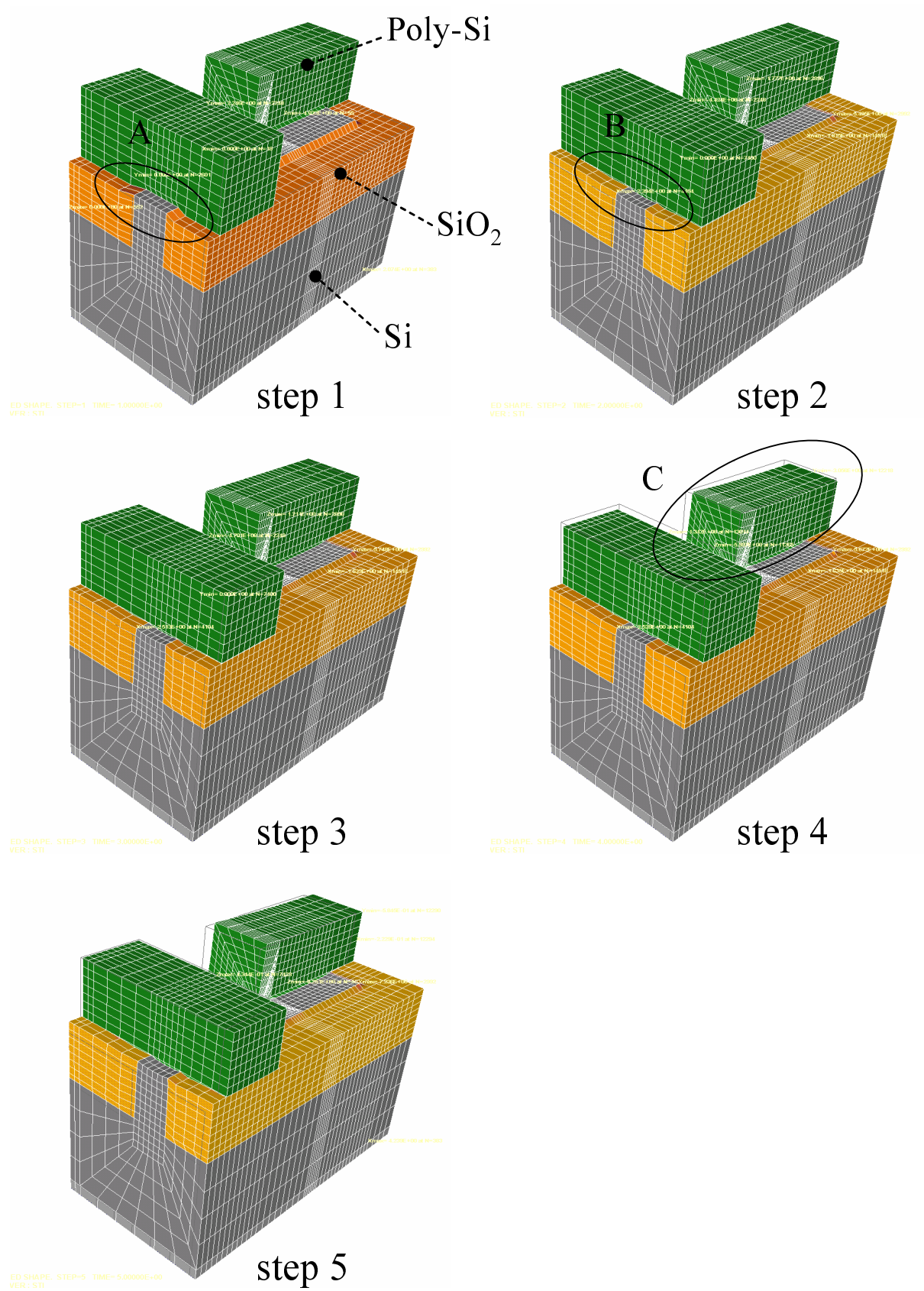


Fig. 3.6 Schematics of deformation of STI in each analysis step.

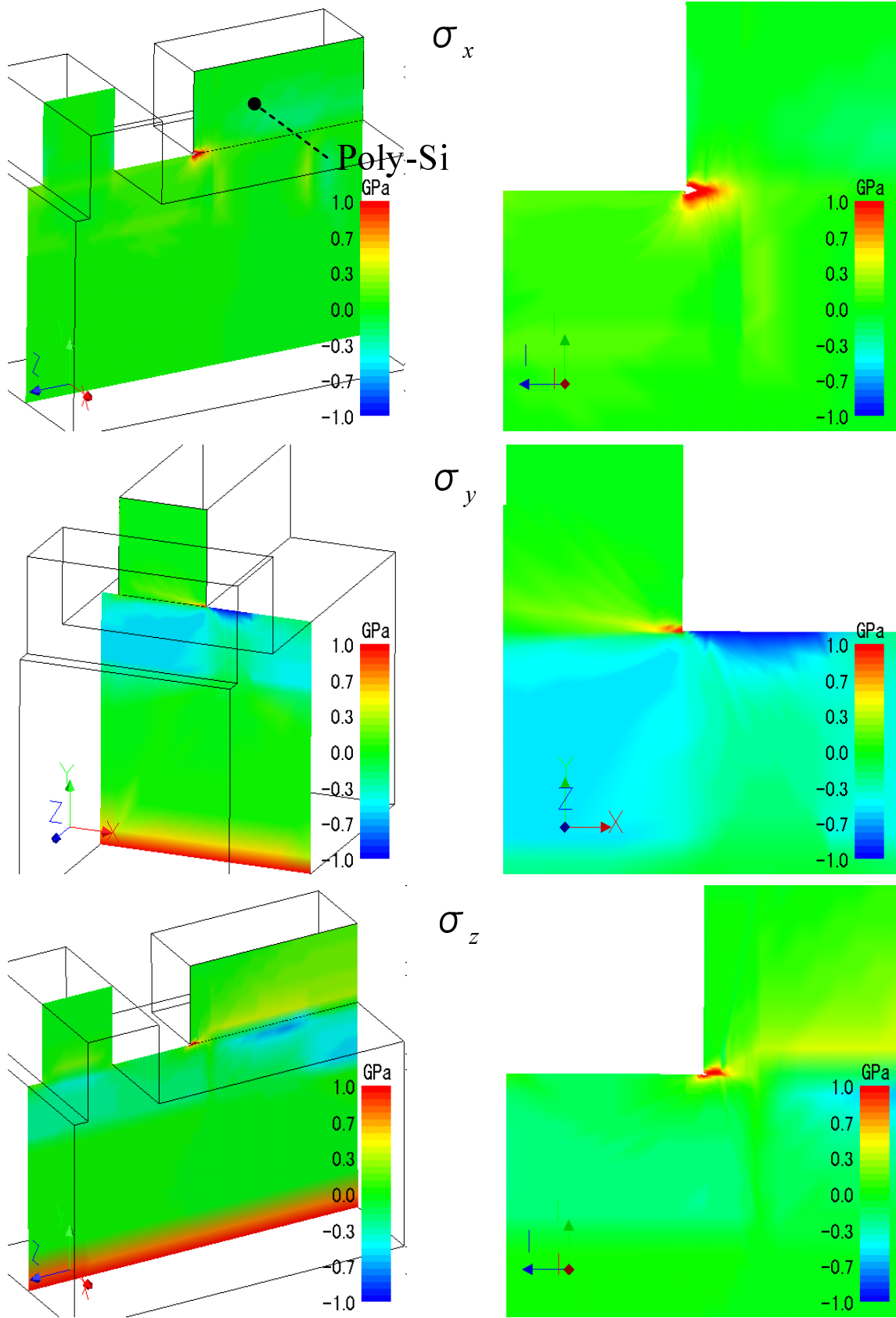


Fig. 3.7 Stress contours of σ_x , σ_y and σ_z in the cross sectional view.

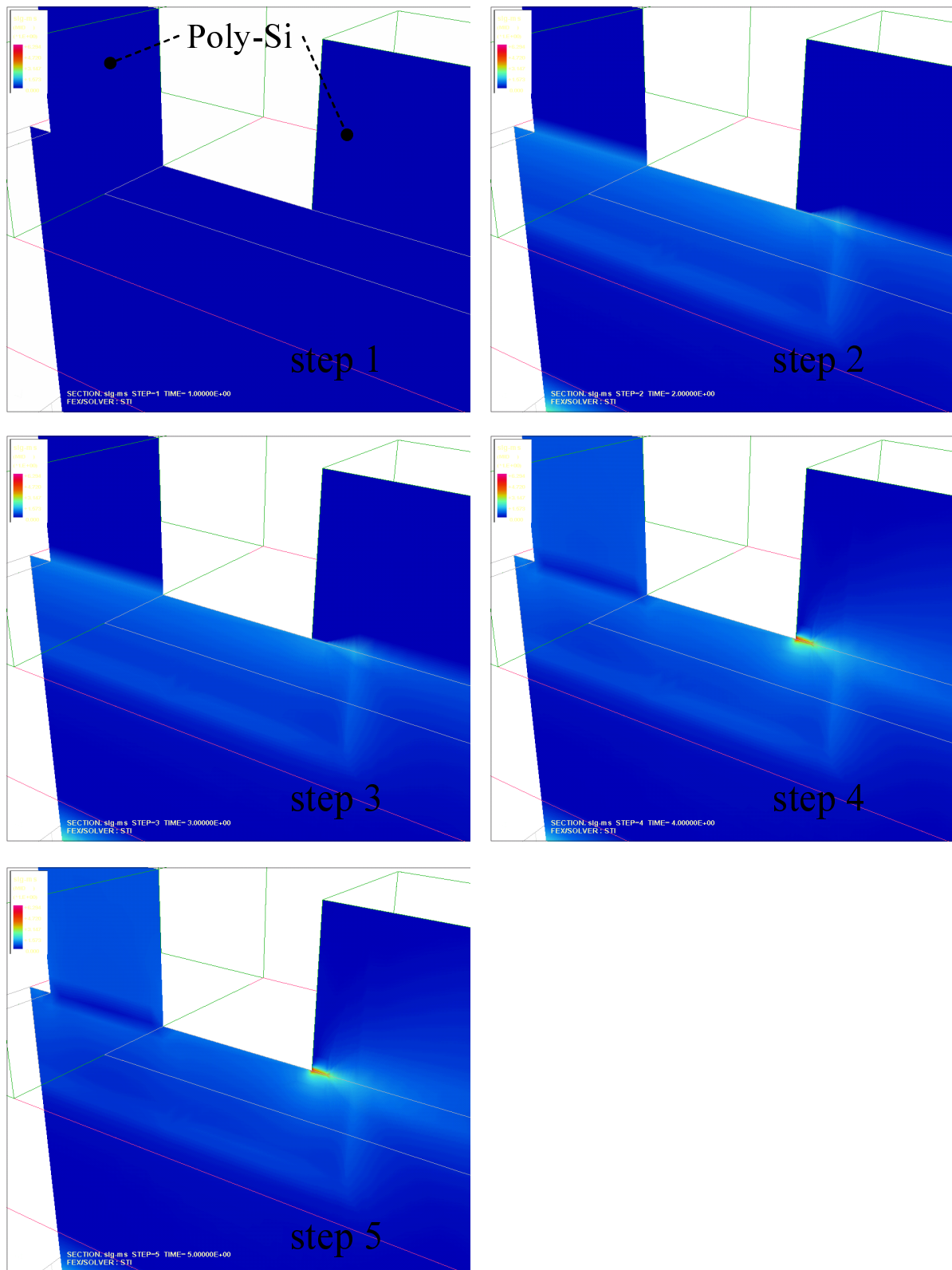


Fig. 3.8 Stress contours of σ_{mises} in each analysis step.

3.3 転位動力学シミュレーションの結果

転位動力学シミュレーションの実行にあたっては応力解析の結果を転位に働く外部応力としてシミュレータに受け渡す．シミュレーションにおける転位発生取り扱いについては応力集中部を転位の発生箇所と仮定し，その部分を起点とするすべてのすべり面，すべり方向のバーガースベクトルを持つ初期半径 10 nm の転位ループを置き，その転位が応力によって収縮することなく拡張した場合を発生とみなすこととした．前節までの応力解析の結果から STI の構造においては Poly-Si と Si, SiO_2 の三つの異なる材料が接する領域で大きなひずみが生じると考えられるため，Fig. 3.9 に示すように最も応力の大きかった G，次に大きな応力の分布が見られた Poly-Si の下部のうち対称性を考慮して H の二つの領域を転位発生箇所と仮定しシミュレーションを行った．

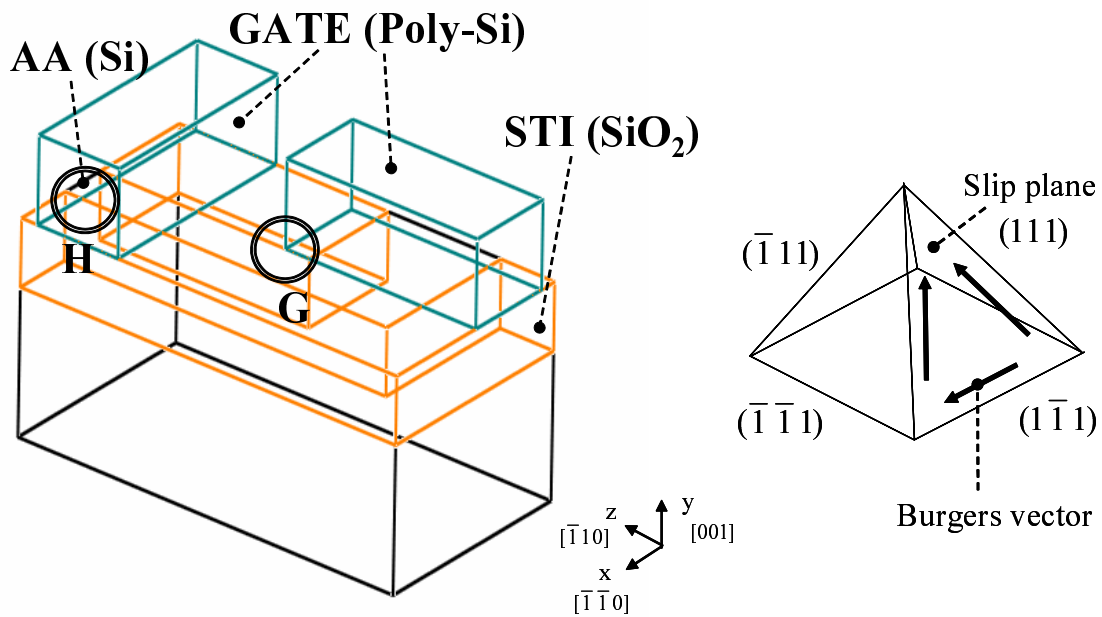


Fig. 3.9 Dislocation generation point G, H and coordinates of slip system.

3.3.1 発生起点 G

3.3.1.1 $(1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$ すべり系

応力集中部 G を通るすべり面 $(1\bar{1}1)$ におけるバーガースベクトル $[\bar{1}\bar{1}0]$ の転位に対し、転位動力学シミュレーションを行った結果を Fig. 3.10 に示す。一連の図は Fig. 3.3 の C とは逆の視点からモデルを見た図であり、(a) は G に配置した半径 10 nm の初期転位ループの形状を示した図で、すべり面 $(1\bar{1}1)$ の場合、上部が自由表面、右側が SiO_2 の結晶境界となっているため、円の四分の一の形状とした。(b)、(c)、(d) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$ 、 0.50×10^{-3} 、 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものであり、結晶方位は (b) に示すとおりである。次に視点 C からの様子と対応する TEM 断面写真を Fig. 3.11 に示す。(a) ~ (e) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$ 、 0.10×10^{-3} 、 0.10×10^{-2} 、 0.16×10^{-2} 、 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものであり、(e) の状態では転位ループの拡張はほぼ平衡状態に達し停止している。最終形状 (e) と断面 TEM 写真 (f) を比較すると転位ループの形状がよく再現されていることがわかる。

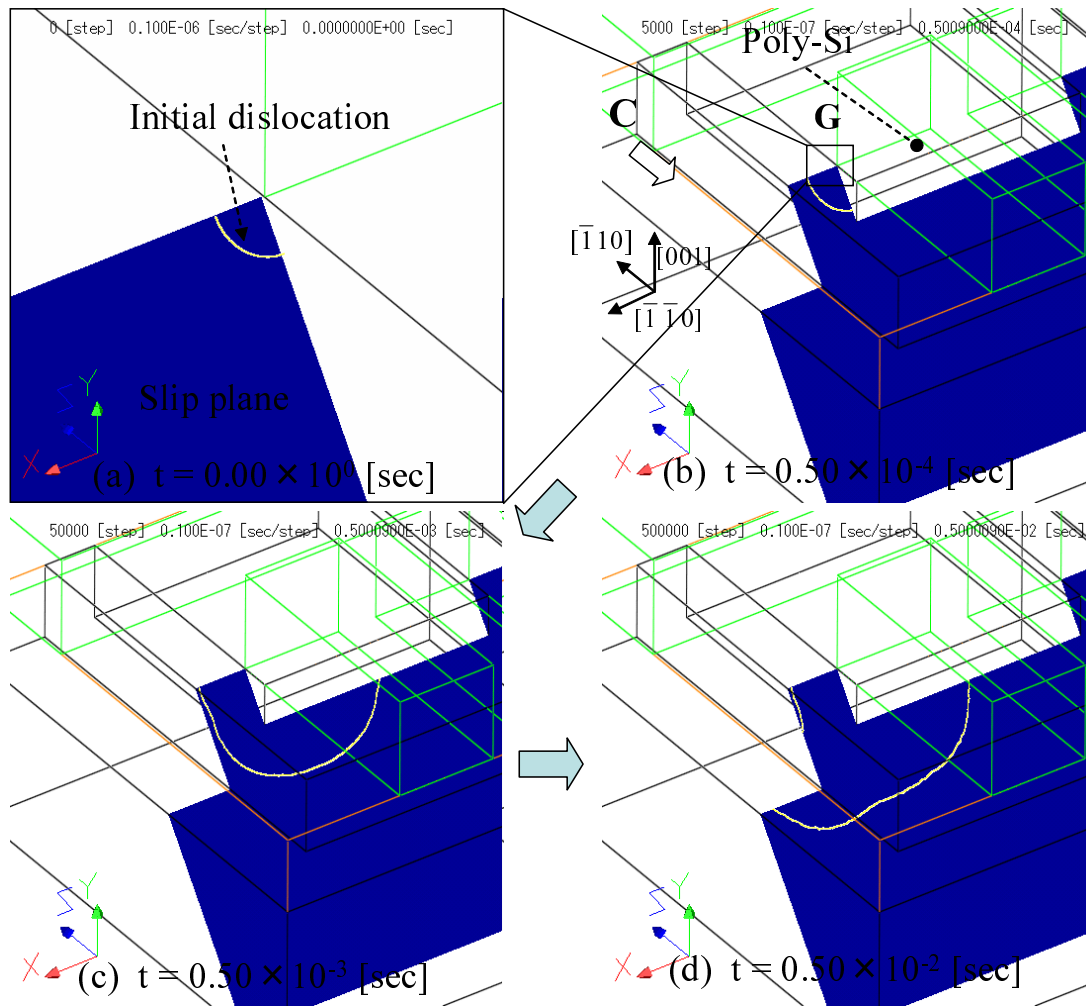


Fig. 3.10 Simulation results of $(1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$ slip system.

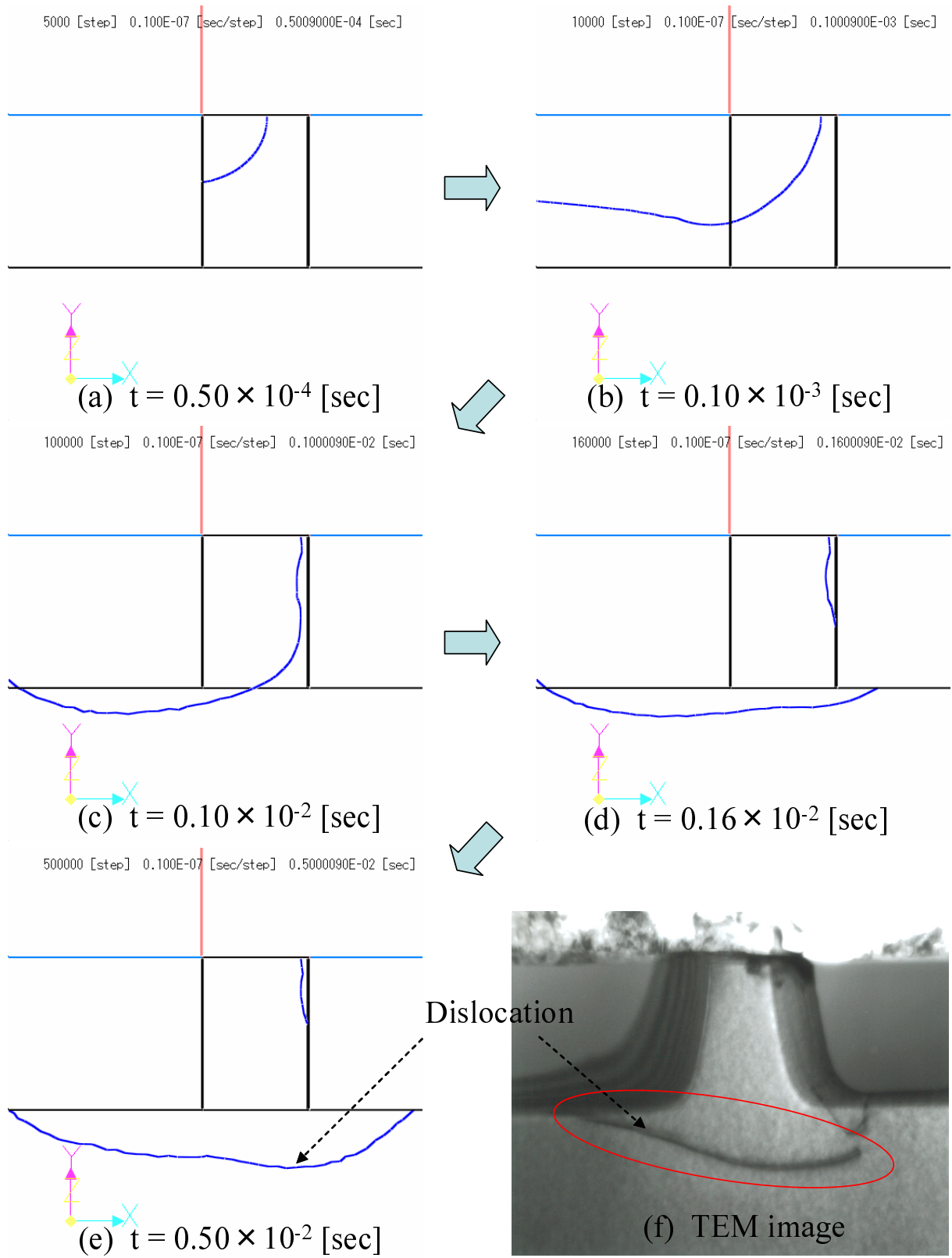


Fig. 3.11 Simulation results (a - e) of $(1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$ slip system and corresponding TEM image (f) of generated dislocations in STI.

3.3.1.2 $(\bar{1}\bar{1}1)[0\bar{1}\bar{1}]$ すべり系

同様のすべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ において異なるバーガースペクトル $[0\bar{1}\bar{1}]$ の転位に対しシミュレーションを行った結果を Fig. 3.12 に示す．前節の場合と同様に Fig. 3.3 の C とは逆の視点からモデルを見た図であり，配置した半径 10 nm の初期転位ループの形状も前節と同じ四分円である．(b)，(c)，(d) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.15×10^{-3} ， 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものである．Fig. 3.13 の (a)～(e) は $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.10×10^{-3} ， 0.20×10^{-3} ， 0.30×10^{-3} ， 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状をモデル上部からの視点で示したものであり，(e) の状態では転位ループの拡張はほぼ平衡状態に達し，停止している．最終形状 (e) と平面 TEM 写真 (f) を比較すると転位ループの形状がよく再現されていることがわかる．また Fig. 3.12 の (d)，Fig. 3.13 の (e) では転位ループの一端がシミュレーション領域に到達しているが，この部分については無限直線転位がその延長線上にあると仮定して処理を行っている．

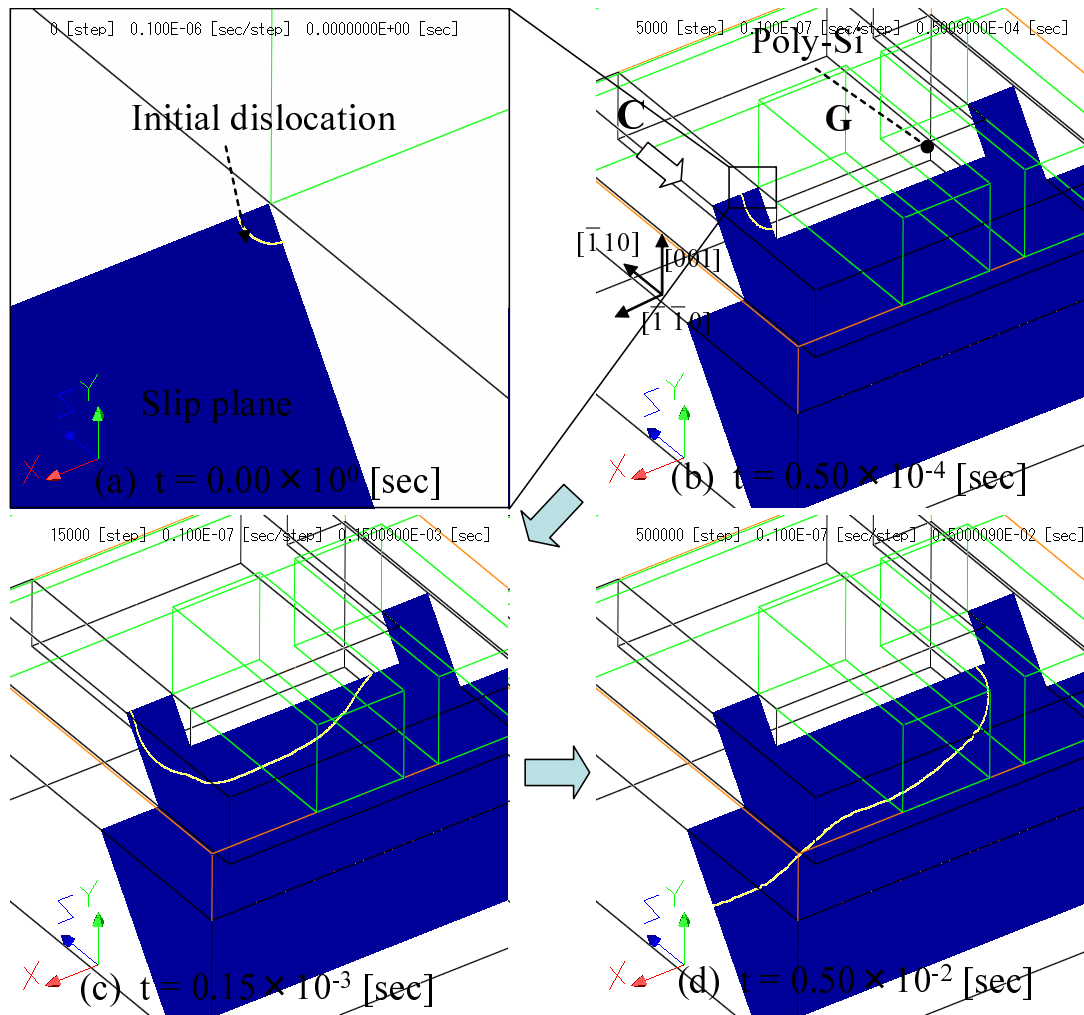


Fig. 3.12 Simulation results of $(\bar{1}\bar{1}1)[0\bar{1}\bar{1}]$ slip system.

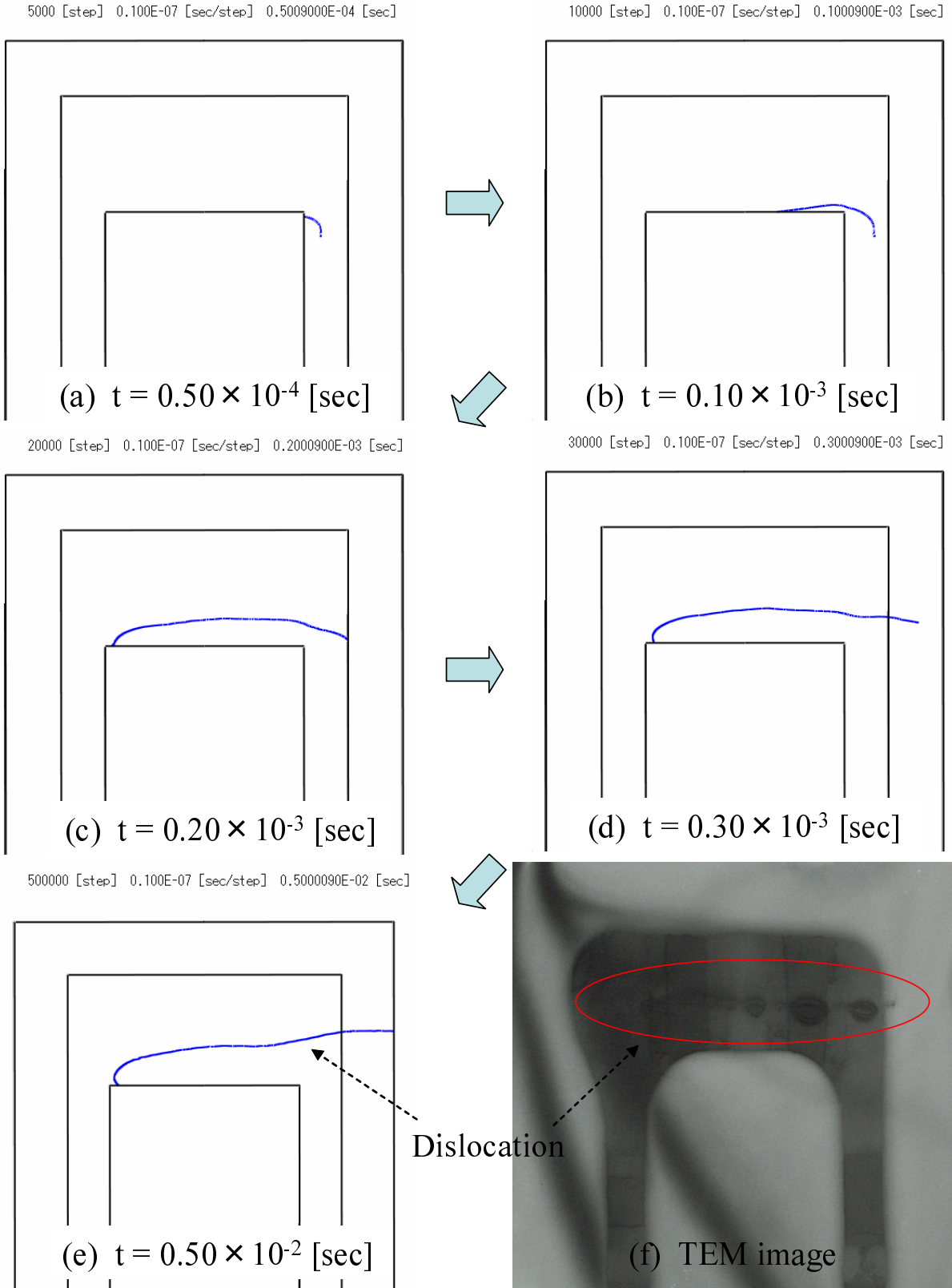


Fig. 3.13 Simulation results (a - e) of $(1\bar{1}1)[0\bar{1}\bar{1}]$ slip system and corresponding TEM image (f) of generated dislocations in STI.

3.3.1.3 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ すべり系

応力集中部 G においてこれまでとは異なるすべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ で拡張したバーガースベクトル $[011]$ の転位に対するシミュレーションを行った結果を Fig. 3.14 に示す．Fig. 3.3 と同じ視点からモデルを見た図であるが，シリコン基板部については xy ， yz 面に対して対称な部分も描画してある．(a) に示すのは半径 10 nm の半円状の初期転位ループで，自由表面から 10 nm 下部に配置したのはすべり面が STI の下部にもぐりこむようにするための幾何的な制約からである．(b)，(c)，(d) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.50×10^{-3} ， 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものである．Fig. 3.15 の (a) ~ (e) は $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.20×10^{-3} ， 0.55×10^{-3} ， 0.15×10^{-3} ， 0.50×10^{-2} 秒後の転位ループの形状をモデル上部から示したものであり，(e) の状態では転位ループの拡張はほぼ平衡状態に達し，停止している．最終形状 (e) と平面 TEM 写真 (f) を比較すると Active Area と STI の境界付近に横たわる転位ループの形状が再現されていることがわかる．

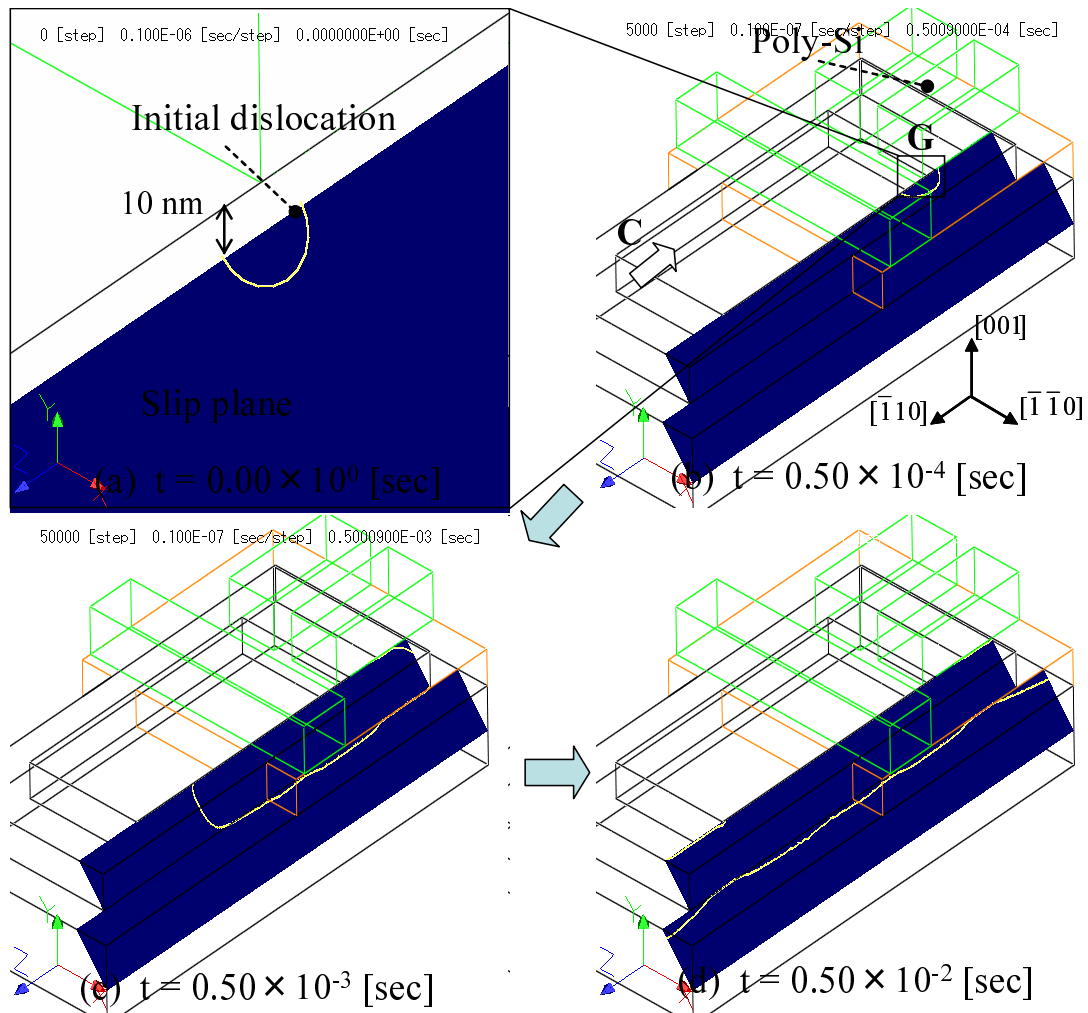


Fig. 3.14 Simulation results of $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ slip system.

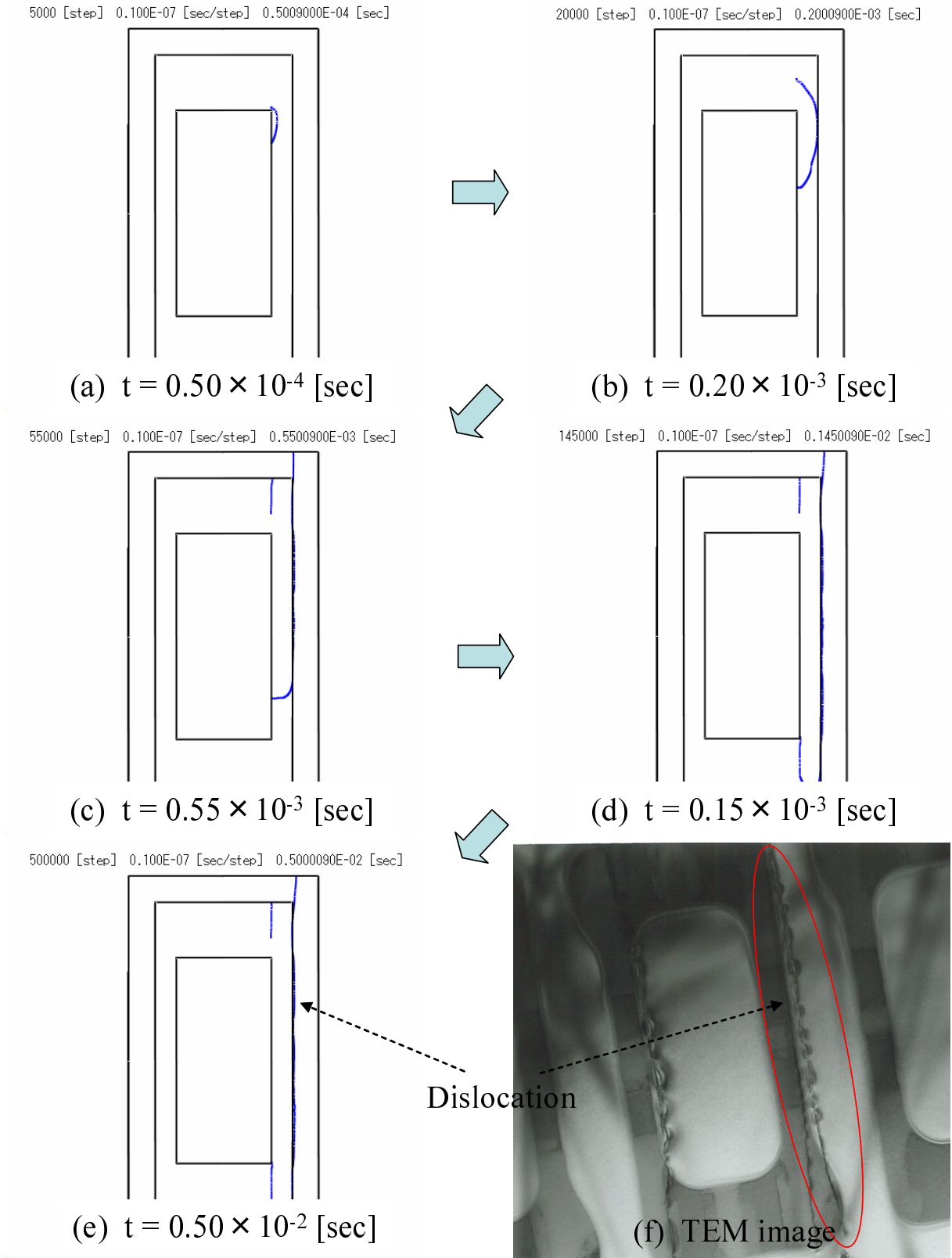


Fig. 3.15 Simulation results (a - e) of $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ slip system and corresponding TEM image (f) of generated dislocations in STI.

3.3.1.4 その他のすべり系

すべり面 $(1\bar{1}1)$ の残る一つのすべり方向 $[\bar{1}01]$, すべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ の残る二つのすべり方向 $[101]$, $[\bar{1}10]$, すべり面 $(\bar{1}11)$ のすべり方向 $[0\bar{1}1]$ においては初期半径 10nm の転位は応力によって拡大せず, 張力によって収縮したため転位の発生と見なすことができなかった. すべり面 $(\bar{1}11)$ のすべり方向 $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}0\bar{1}]$ では転位ループが完全に収縮して消滅することは無かったがほとんど初期形状から拡大することも無かった. Table 3.3 に転位発生起点 G における転位ループ拡大の可否をまとめて示す. なお転位線の向きを一方向に固定した場合, バーガースベクトルの向きは正負の二方向をとることができる. 表に示した×の場合は正負の両方向においても転位が拡大しなかった場合であり, ○・ のケースは示したすべり方向の場合には拡大し反対方向では収縮してしまう.

Table 3.2 Whether initial dislocation (radius=10nm) expands or not in each case of different slip planes and slip directions.

Slip plane	Slip direction		
$(1\bar{1}1)$	$[\bar{1}01]$ ×	$[0\bar{1}\bar{1}]$ ○	$[\bar{1}\bar{1}0]$ ○
$(\bar{1}\bar{1}1)$	$[011]$ ○	$[101]$	$[\bar{1}10]$ ×
$(\bar{1}11)$	$[\bar{1}0\bar{1}]$ ×	$[0\bar{1}1]$ ×	$[\bar{1}\bar{1}0]$

3.3.2 発生起点 H

3.3.2.1 (111)[01 $\bar{1}$] すべり系

次に Fig. 3.2 に示す手前の Poly-Si の下部 H で転位の発生を仮定した場合のシミュレーション結果を Fig. 3.16 に示す．すべり面は (111)，バーガースベクトルは $[01\bar{1}]$ とし，(a) に示すのは初期転位ループで前節と同様にすべり面が STI の下部にもぐりこむよための幾何的な制約から半径 10 nm の半円状の自由表面から 10 nm 下部に配置した．(b)，(c)，(d) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.50×10^{-3} ， 0.25×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものである．Fig. 3.15 の (a) ~ (e) は $t = 0.50 \times 10^{-4}$ ， 0.20×10^{-3} ， 0.50×10^{-3} ， 0.15×10^{-3} ， 0.25×10^{-2} 秒後の転位ループの形状をモデル上部から示したものであり，(e) の状態では転位ループの拡張はほぼ平衡状態に達し，停止している．最終形状 (e) と平面 TEM 写真 (f) を比較すると，前節の $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ すべり系とは反対位置の Active Area と STI の境界付近に横たわる転位ループの形状が再現されていることがわかる．

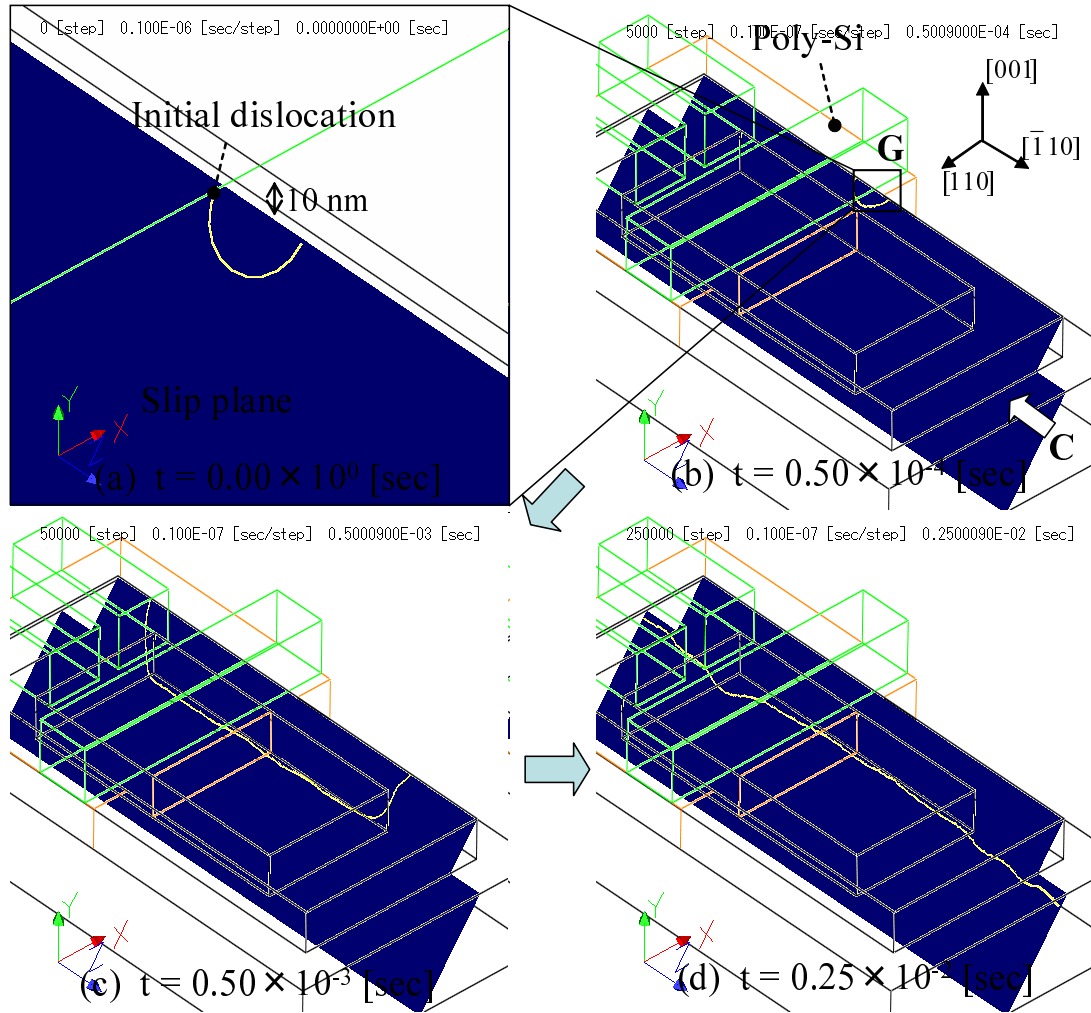


Fig. 3.16 Simulation results of (111)[01 $\bar{1}$] slip system.

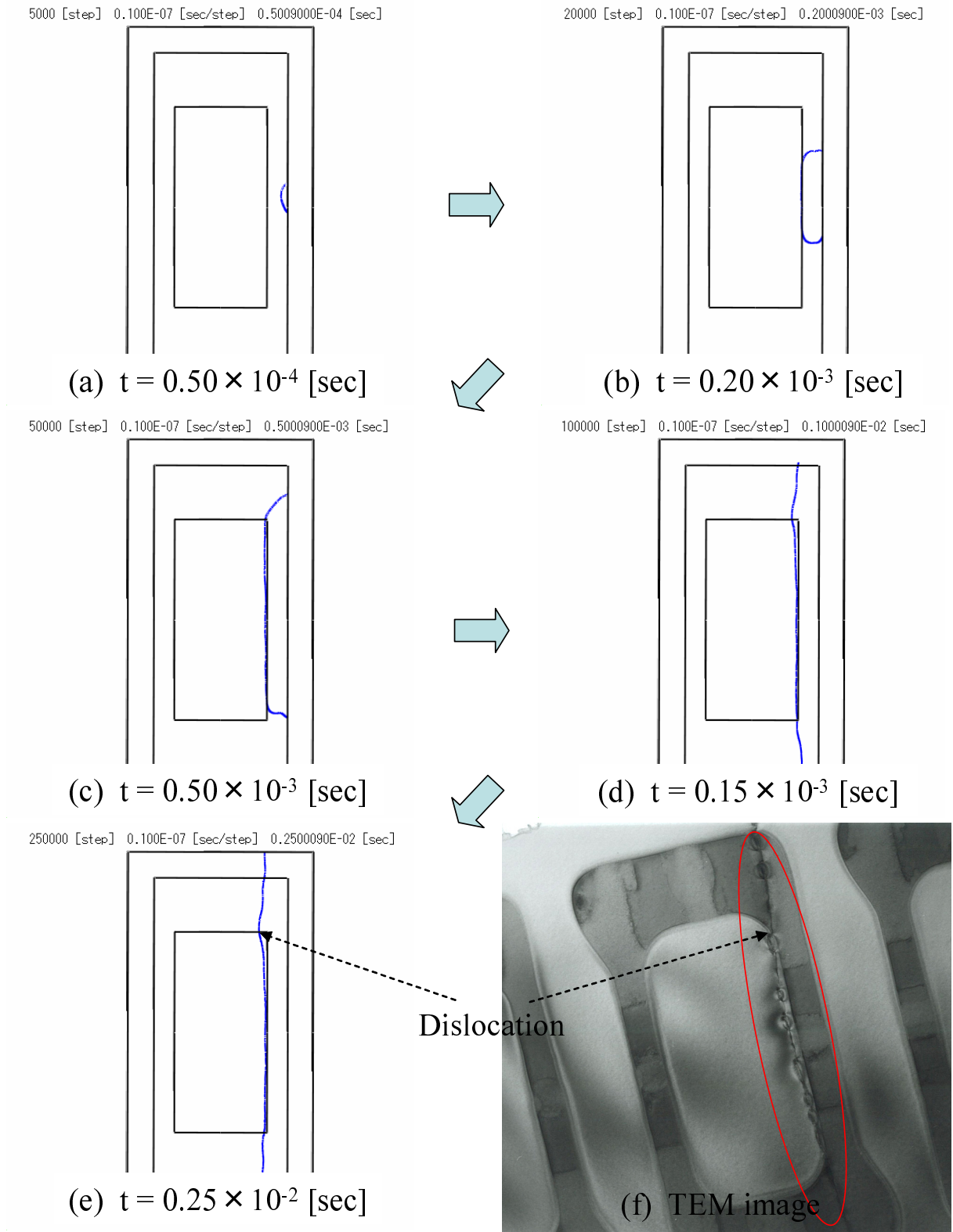


Fig. 3.17 Simulation results (a - e) of $(111)[01\bar{1}]$ slip system and corresponding TEM image (f) of generated dislocations in STL.

3.3.2.2 $(\bar{1}\bar{1}1)[10\bar{1}]$ すべり系

同じ発生起点 H で異なるすべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$, すべり方向 $[10\bar{1}]$ の場合のシミュレーション結果を Fig. 3.18 に示す . (a) に示すのは半径 10 nm の 1/4 円状の初期転位ループである . (b) , (c) , (d) はシミュレーション開始から $t = 0.25 \times 10^{-4}$, 0.50×10^{-3} , 0.25×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものである . 拡大した転位ループは発生起点とは反対側にある Si と SiO_2 の界面に衝突し (c) に示すように二つの転位ループに分離する . (d) の状態では分離した二つの転位ループとも平衡状態に達している .

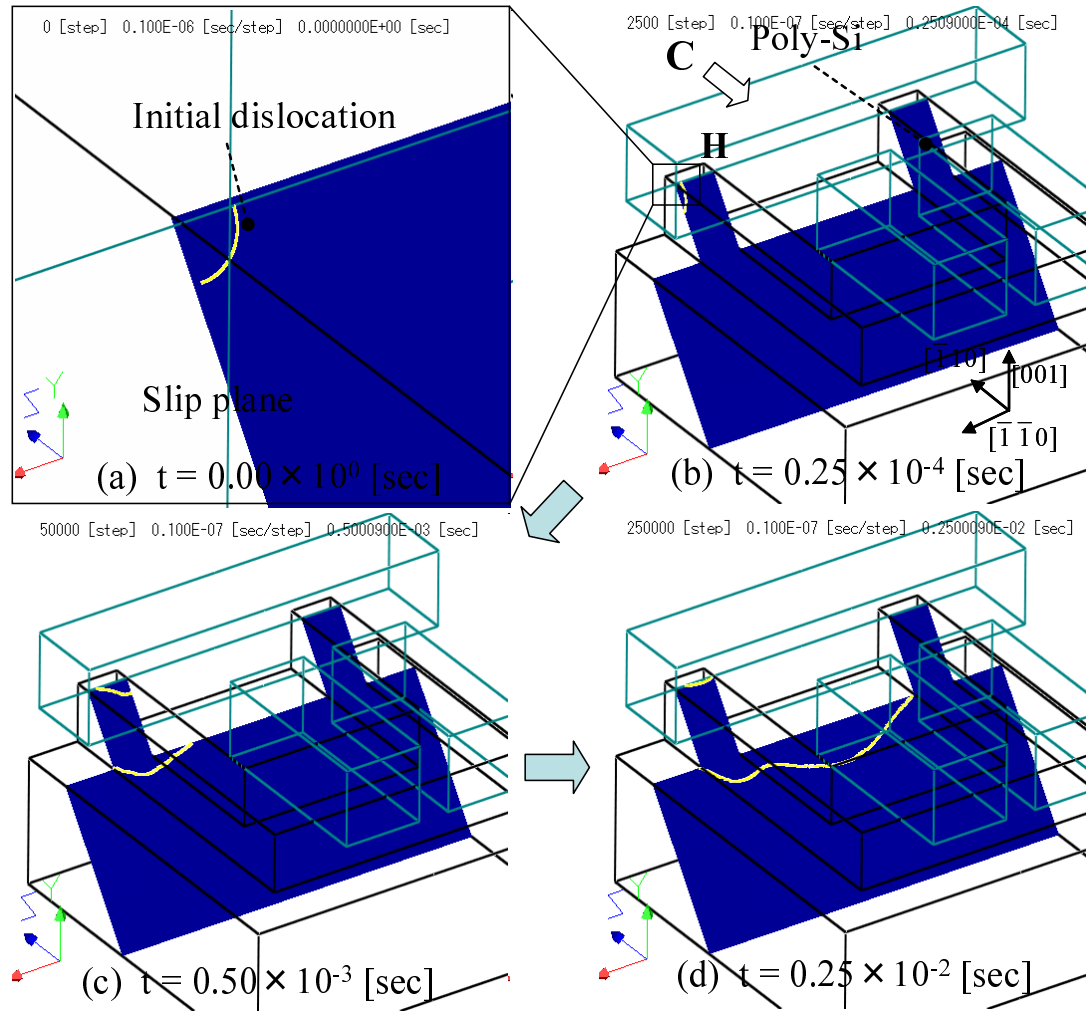


Fig. 3.18 Simulation results of $(\bar{1}\bar{1}1)[10\bar{1}]$ slip system.

3.3.2.3 $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$ すべり系

同様のすべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ で異なるすべり方向 $[110]$ の場合のシミュレーション結果を Fig. 3.19 に示す．(a) に示すのは半径 10 nm の 1/4 円状の初期転位ループである．(b) , (c) , (d) はシミュレーション開始から $t = 0.50 \times 10^{-4}$, 0.50×10^{-3} , 0.10×10^{-2} 秒後の転位ループの形状を示したものである．転位ループは応力によって拡大するものの大きく拡張することなく平衡状態に達している．

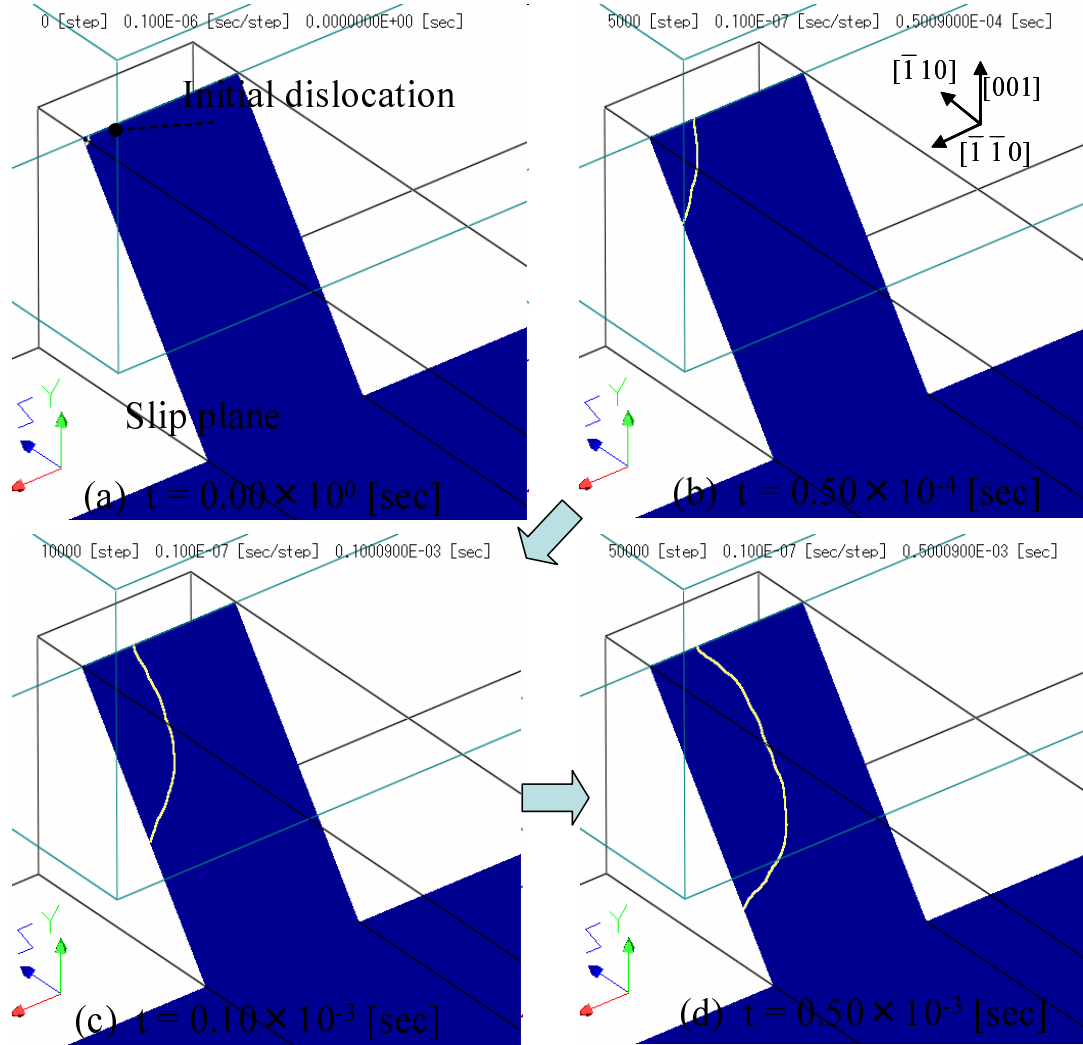


Fig. 3.19 Simulation results of $(\bar{1}\bar{1}1)[110]$ slip system.

3.3.2.4 その他のすべり系

すべり面 $(1\bar{1}1)$ の残る一つのすべり方向 $[011]$, すべり面 (111) の残る二つのすべり方向 $[\bar{1}10]$, $[\bar{1}01]$ においては初期半径 10nm の転位は応力によって拡大せず, 張力によって収縮したため転位の発生と見なすことができなかった. Table 3.3 に転位発生起点 H における転位ループ拡大の可否をまとめて示す. 転位発生起点 G の場合の結果と同様に転位線の向きを一方向に固定した場合, バーガースベクトルの向きは正負の二方向をとることができるため, 表に示した $\times$ の場合は正負の両方向においても転位が拡大しなかった場合であり, $\circ$ のケースは示したすべり方向の場合には拡大し反対方向では収縮することを意味している.

Table 3.3 Whether initial dislocation (radius=10nm) expands or not in each case of different slip planes and slip directions.

Slip plane	Slip direction		
$(1\bar{1}1)$	$[10\bar{1}]$ $\circ$	$[011]$ $\times$	$[110]$ $\circ$
(111)	$[01\bar{1}]$ $\circ$	$[\bar{1}01]$ $\times$	$[\bar{1}10]$
$(\bar{1}11)$	$[\bar{1}0\bar{1}]$ $\times$	$[0\bar{1}1]$ $\times$	$[\bar{1}\bar{1}0]$ $\times$

3.4 すべり系せん断応力分布との比較

シミュレーションを行った三つのすべり系において転位ループの最終形状とすべり系せん断応力の分布を比較したものを Fig. 3.20 に示す．すべり系 $(1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$ では転位発生を仮定した G の領域において応力分布がマイナスであることから，転位ループは負のせん断応力によって発生，運動していることがわかる．(b) のコンター図に示すせん断応力 $\tau = -20.0, 0.0$ [MPa] の等値線と比較した場合，転位ループは $\tau = -20.0$ [MPa] にほぼ従うような形で平衡状態に達していることがわかる． $(1\bar{1}1)[0\bar{1}\bar{1}]$ すべり系では同様に負のせん断応力が転位運動の駆動源となっているが，応力分布が大きく広がっているため転位ループの形状もそれに合わせてより大きく張り出している．このすべり系においてもせん断応力 $\tau = -20.0$ [MPa] の等値線の方が転位の最終形状に近い．すべり系 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ では正の応力が駆動源となっているが，転位線とバーガースベクトルの向きを反転させた場合には負の応力によって運動することになるためこれまでの比較と同義である．このすべり系の場合では転位の平衡状態の位置がせん断応力 $\tau = 0.0, 20.0$ [MPa] の両者の等値線の分布とよく一致している．前者二つのすべり系との違いは転位線が弧を描かずに直線状であるということから，転位は基本的にはせん断応力が反転する領域で平衡状態に達するものの，曲率を持った形状の場合，転位の線張力の影響によって若干のずれが生じるということがわかる．

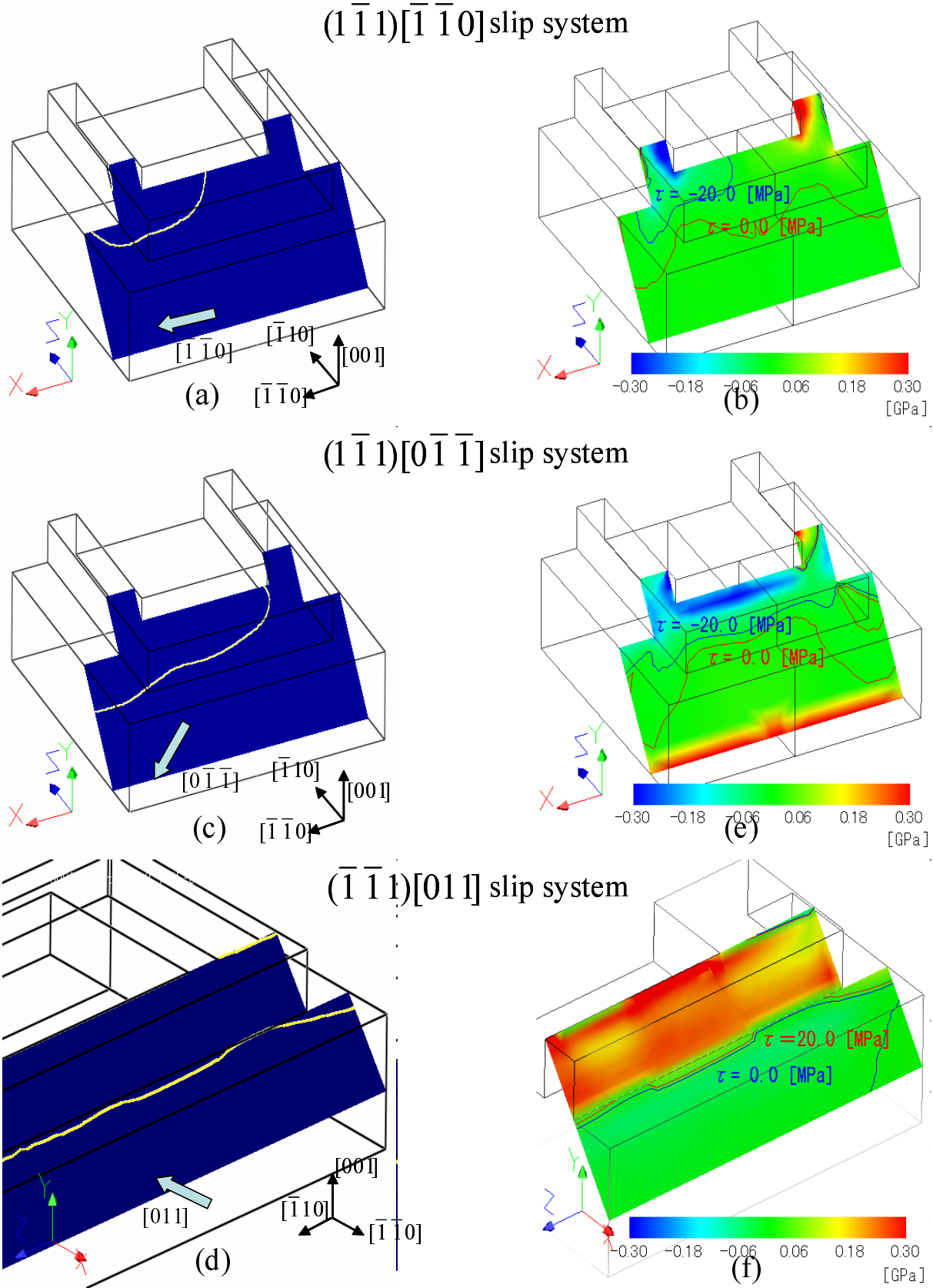


Fig. 3.20 Simulation results of dislocation equilibrium configuration (a, c, e) in various slip systems and corresponding contours of shear stress.

3.5 結言

半導体構造の一つである STI に対して転位動力学シミュレーションを適用するために STI 製造プロセスに沿う形で温度を変化させ、かつ材料の形成順に要素を付加していく応力解析を行った。その結果 Active Area に発生する応力は SiO_2 や Poly-Si 形成時に作用する真性応力が主な原因であることが確かめられると共に、応力が集中する部位をシミュレーションにおける転位発生箇所と仮定した。求められた応力場に基づきシミュレーションを行った結果、応力集中部位から拡張した転位ループの平衡状態の形状は STI 内部に発生した転位の形状を捉えた TEM 写真と良く一致した。シミュレーションでは発生を物理的に取り扱っているわけではないため定量的な評価を行うには至っていないが、転位が発生してしまった場合それがどのように運動し、どのような形状に落ち着くかを再現し、実際に発生した転位の観察結果と比較することができるため、発生した転位のすべり系を特定することができると考えられる。特に $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ すべり系と $(111)[01\bar{1}]$ すべり系のシミュレーションでは TEM 観察ではほぼ同一の形状をしている転位が全く異なるすべり面、バーガースベクトルを持つことが確認された。この結果からこれまで TEM 等の観察だけでは困難であった発生箇所や転位の横たわるすべり面とバーガースベクトルの特定が、応力解析と転位動力学シミュレーションによって転位の運動が可視化されることで容易になるため発生原因の推定が容易になると考えられる。また転位の平衡状態の形状は駆動源となっているせん断応力分布がゼロに近い領域において、転位線が曲率を持つことによって生じる線張力とつりあう形で停止することが示された。

第4章 SiN 薄膜に対する適用

4.1 緒言

半導体ではシリコン基板上に多数の薄膜が形成されるが，構成材料の一つである SiN 薄膜は化学的に不活性であり，機械的強度も優れているため絶縁膜として幅広く使われている．一方，半導体の高集積，微細化による素子サイズの低下に伴い，応力に起因する膜のはく離やストレスマイグレーション，転位の発生といった半導体デバイスの信頼性に影響を与える問題が顕在化してきた．なかでも SiN 薄膜は CVD(chemical vapor deposition) によって形成される際に大きな真性応力が発生するため²⁷⁾，800 以上に昇温する過程を経る半導体製造プロセスでは，薄膜の真性応力によってシリコン基板内に転位が発生する*ことが確認されている²⁸⁻³²⁾．本章ではそのような SiN 薄膜の真性応力に起因する転位の発生・運動に対して転位動力学シミュレータを適用し実験結果との比較を行った．

*シリコンは約 600 以上で塑性変形を起こす

4.2 解析手法

4.2.1 解析対象

解析対象として Fig. 4.1 に示す直線状の SiN 薄膜 (Line & Space) と正方形の SiN 薄膜 (Square Pad) の二種類の形態の薄膜が形成されたシリコンウエハとした．Line & Space では膜厚 250 ~ 280 nm , 膜幅 1.2 ~ 4.0 μm の帯状の薄膜 (Line) が 9.6 μm 間隔 (Space) で厚さ約 500 μm のシリコン基板上に成膜されている．Square Pad では厚さ 250 nm , 20 μm 四方の形状となっている．これらの引っ張りの真性応力を有する薄膜パターン形成されたシリコンウエハを高温にアニールすることで下部のシリコン基板に転位が発生する．

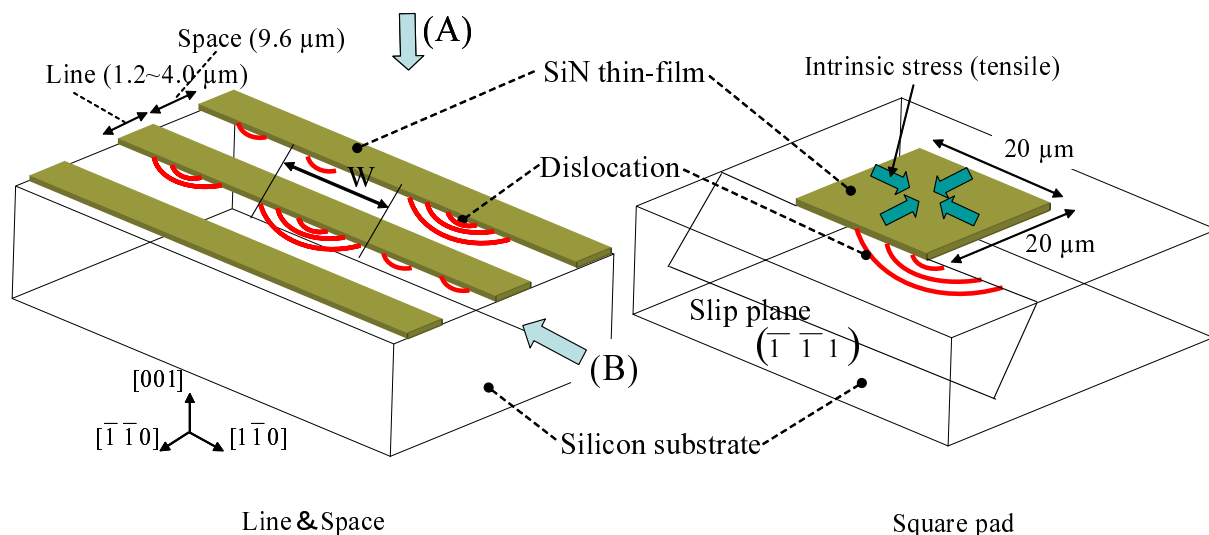


Fig. 4.1 Schematics of SiN thin film pattern and expected dislocation loop configurations. (A) Line and space pattern (B) Square pad pattern.

4.2.1.1 Line & Space

Line & Space については太田ら^{33,34)}によって行われた転位の発生・運動と応力特異場の大きさやシリコンウエハの酸素濃度の影響について明らかにした実験結果との比較を行った．Fig. 4.2 に示すのは発生した転位をとらえた写真である．左側はアニール後の試験片をフッ酸を主成分とするエッチング溶液に浸し，現れる腐食孔を Fig. 4.1 左の (A) 方向からレーザー走査型顕微鏡で観察したもので，横に走っている黒い線が帯状の SiN 薄膜，黒い点がシリコン表面付近に存在する転位周辺のひずみによって選択的に腐食されたエッチピットである．右側は Fig. 4.1 左の (B) から見た断面 TEM 画像である．二枚の写真から三次元的な転位ループの形状は Fig. 4.1 に示すものであることが確認できる．

シミュレーションでは Fig. 4.1 に示したある幅 W を境界とする転位の運動を解析する．実験³⁴⁾では転位ループが SiN 薄膜長手方向に多数発生していることが確認されているが，今回の解析では計算時間等を考慮してその中のある特定の領域内の転位に着目したシミュレーションを行うこととした．つまり発生した転位ループは応力場によって SiN 薄膜長手

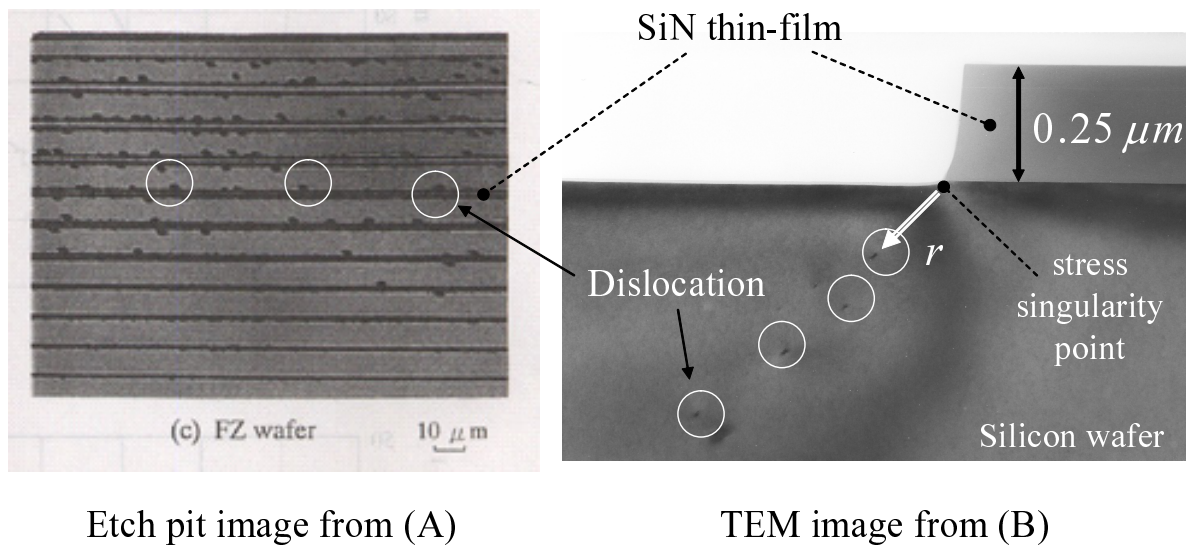


Fig. 4.2 Left picture is Etch-pit image³⁴⁾. Black lines are SiN thin-film and black points are dislocations intersect at the silicon surface. Right picture is TEM photograph³⁴⁾ from cross sectional view.

方向へ拡張するものの、隣接する転位ループと同符号の場合は annihilation を起こして一つのループとなり、異符号の場合は junction などによって不動化し（2.7.3 節，2.7.4 節），ある有限の幅で長手方向への拡張が押さえられると仮定している．よって新たに発生した同符号の後続の転位は SiN 薄膜応力場の強い外力により境界部分に次々と押し寄せることになり，先行している転位と反発し合うためシミュレーションの境界に堆積し，その部分が Fig. 4.2 に示したエッチピットとして観察されているものと解釈した．また 2.7 節で述べたように，転位ループが接近している部分は素片サイズを細かくする制御を行っているため，無用な転位節点の振動，それに伴う計算処理を回避する必要がある．そこで近接する素片とある距離以内で，互いの反発力により転位素片に働く力がある応力以下なった場合，その素片，節点を堆積による平衡状態にあると判断し，変位を 0 として節点を固定することでこれに対処した．ただし新たな後続の転位が接近するなどして力のバランスが崩れ，再びある応力以上になれば運動を再開させることとする．

4.2.1.2 Square Pad

Square Pad については薄膜が形成されたシリコンウエハ試験片を加熱し，転位の発生運動に対するウエハの酸素濃度，アニール時間の影響を調べる実験を行った．試験方法としてはまず Fig. 4.3 に示すように厚さ 250 nm の SiN 薄膜パターンが形成された酸素濃度の異なる二種類のシリコンウエハ（CZ ウエハ [高酸素濃度]，FZ ウエハ [低酸素濃度]）を用意し，試験片としてウエハから 5 ～ 10 角程度を切り出した．成膜されている SiN 薄膜のパターンを SEM で拡大したものが右に示す写真で，図中の a の部分に Fig. 4.1 の右に示す正方形の薄膜がある．次に加熱炉を用いて Fig. 4.4 に示すプロセスでアニールを行った．室温から昇温速度 50 /min で加熱を行い，900 において両ウエハとも 1，3，10，20，60 分間温度を保持し，その後 30 /min 程度で室温まで冷却する．なおアニー

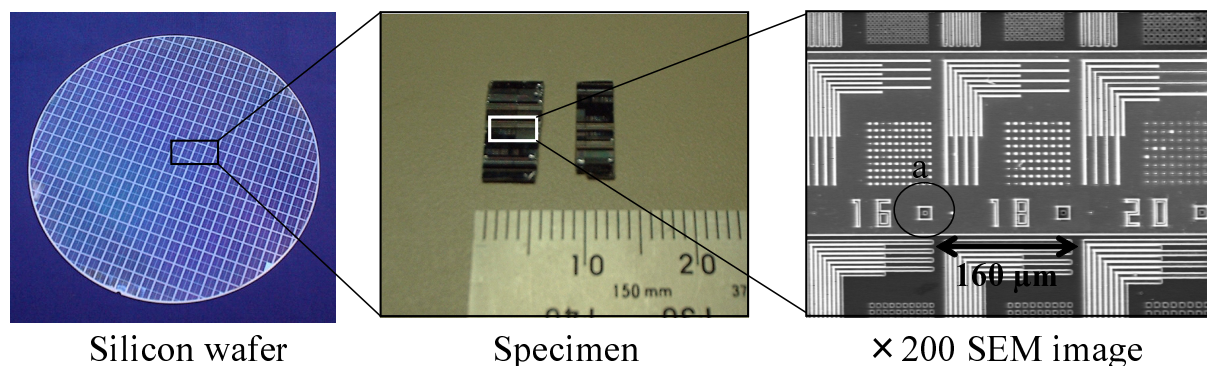


Fig. 4.3 Picture of specimen cutting from silicon wafer and SiN thin film pattern ($\times 200$, SEM).

ル中の炉内は窒素置換され、試験片の酸化を防いでいる。シリコンは約 600℃ 以上で塑性変形を起こすため、SiN 薄膜が有する真性応力によってシリコン基板内に転位が発生する。アニール後の試験片に発生した転位の観察結果を Fig. 4.5 に示す。左側の写真はア

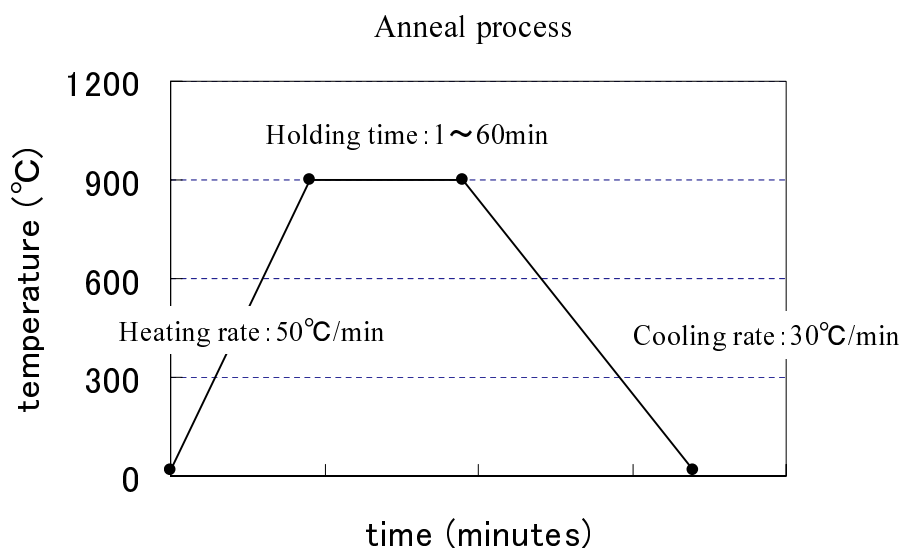


Fig. 4.4 Process of annealing specimen.

ニール後の試験片をフッ酸を主成分とするエッチング溶液に浸し、現れる腐食孔をレーザー走査型顕微鏡で観察したもので、黒い点がシリコン表面付近に存在する転位のエッチピットである。右側の写真は表面にある転位を直接観察した TEM 画像であり、写真の横幅は $1.3\mu\text{m}$ 、表面から $0.3\mu\text{m}$ 程度の深さにある転位ループの形状が捉えられている。エッチピットによる観察から転位は SiN 薄膜の角部から各辺の延長線上にあるすべり面に存在することがわかり、TEM による観察から転位ループが曲率を持っていることがわかる。また SiN 薄膜の真性応力に起因する転位の形状を捉えた他の実験結果³¹⁾を踏まえ、発生した転位ループの形状は Fig. 4.1 の右に示すような形状であることが推測される。

実験における転位の移動距離 R (Fig. 4.5 の左に示したレーザー顕微鏡の画像にある転位列で SiN 膜端から最も遠い位置) と転位発生数をアニール時間に対してプロットしたも

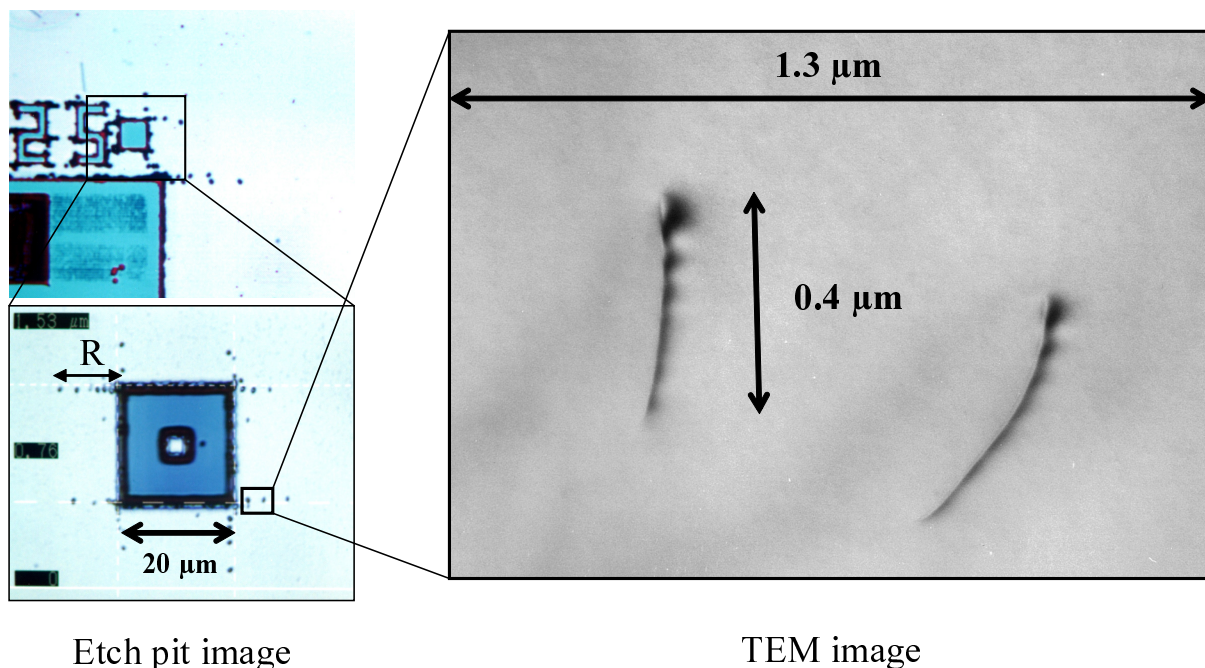


Fig. 4.5 Etch pit and TEM image of generated dislocations near the SiN square pad.

のを Fig. 4.6 の左に，転位の速度を同じくアニール時間に対してプロットしたものを右に示す．アニール時間の増加に従い転位の発生数は両ウエハとも3個から6個へ増加し，移動距離も FZ ウエハの場合 $9.5 \mu\text{m}$ から $13.8 \mu\text{m}$ ，CZ ウエハの場合には $7.7 \mu\text{m}$ から $12.7 \mu\text{m}$ へと進展している．速度も時間の増加に従い低下しているが，60 分間のアニール後も完全な停止状態に達していない．移動距離については FZ ウエハが CZ ウエハに比べて $1 \sim 2 \mu\text{m}$ 程度進んでおり，酸素濃度の異なる二種類のウエハにおいて明確な差が見られる．

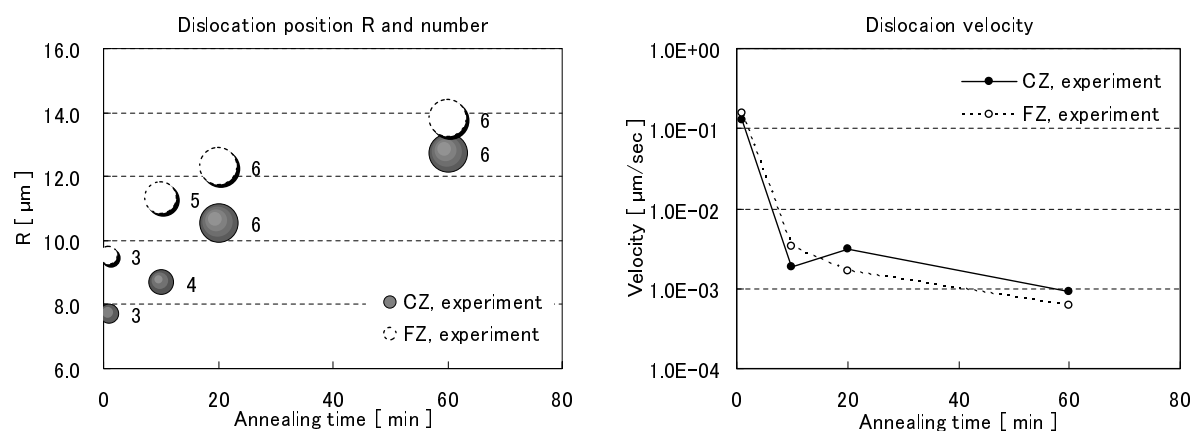


Fig. 4.6 Dependence of dislocation position R, generated number and velocity on annealing time in experiment.

4.2.2 応力解析

転位動力学シミュレーションを実行するにあたっては転位に作用する外部応力が必要であるため、SiN 薄膜の真性応力によってシリコン基板に発生する応力場は有限要素解析ソフト ANSYS7.0 を使用して算出した。Fig. 4.1 から Line & Space については断面方向において一様な形状であるため二次元応力解析とし、Square Pad については対称性から 1/4 モデルにおける三次元応力解析を行った。温度については実験でのアニール保持温度 900 を一様に与えている。

4.2.2.1 Line & Space

作成した Line & Space の解析モデルを Fig. 4.7 に示す。解析範囲をシリコン基板上の一本の SiN 薄膜とし、対称性を考慮して 1/2 モデルとした。SiN 薄膜の膜厚は 280 nm、膜幅は $1.4\mu\text{m}$ 、シリコン基板部は幅 $6.2\mu\text{m}$ 、深さ $40.0\mu\text{m}$ とした。使用した要素は四辺形一次の平面ひずみ要素で、総要素数は 2835、総節点数は 2967 である。SiN 薄膜と Si の界面の端部に応力が集中すると考えられるのでその領域のメッシュを密に切っている。最小メッシュサイズは 0.8 nm である。境界条件は x 方向右面、y 方向底面をそれぞれ面方向固定、x 方向左面を面方向カップリングとし、SiN 薄膜に比べて十分に厚いシリコン基板が一様に変形する状態を考慮した。使用した物性値は Table 4.1 に示すとおり、シリコン基板にはヤング率 170GPa、ポアソン比 0.28、線膨張係数 3.0×10^{-6} 、SiN 薄膜はヤング率 260GPa、ポアソン比 0.25、線膨張係数 3.1×10^{-6} である。なお SiN 薄膜には形成時に作用する引っ張りの真性応力を初期応力 1.8GPa として与えた。

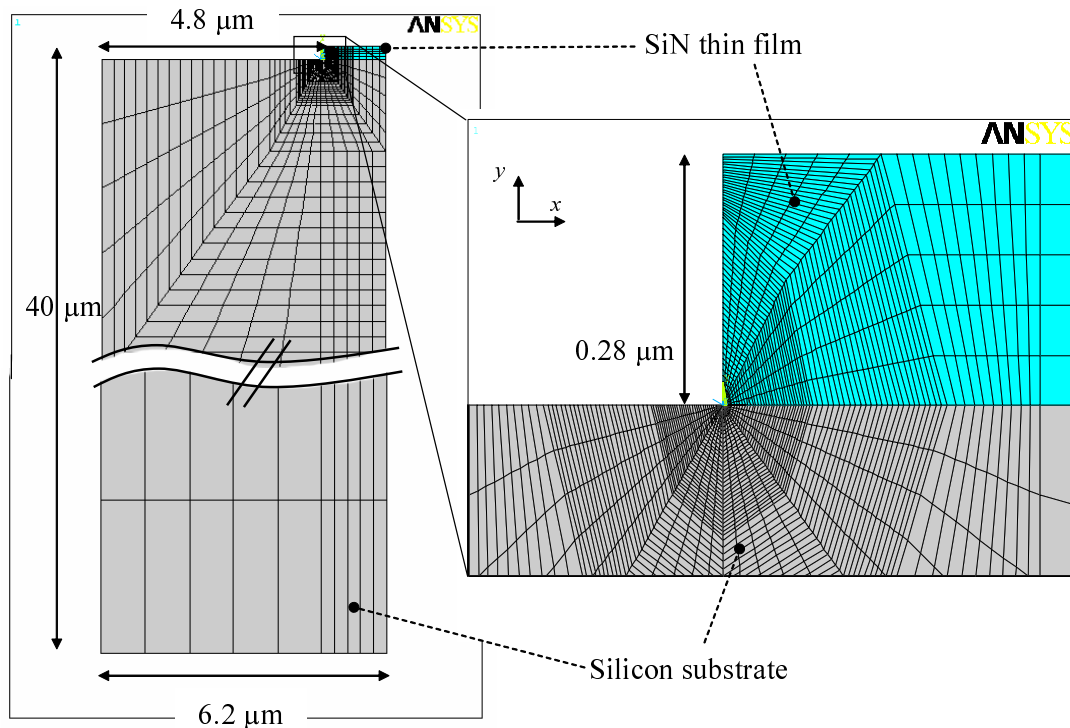


Fig. 4.7 2D FEM mesh of the analysis model for Line & Space.

Table 4.1 Material properties used in the FEM model.

material	young ratio [GPa]	poisson ratio	linear thermal expansion coefficient [1/]	Initial stress [GPa]
Si	170	0.20	3.0×10^{-6}	-
SiN	260	0.25	3.1×10^{-6}	1.6 ~ 1.8
Equivalent stiffness Si	2.0×10^5	0.20	3.0×10^{-6}	-

応力解析の結果を Fig. 4.8 に示す．引っ張りの真性応力が作用する SiN 薄膜が収縮することで下部のシリコン基板が引っ張り上げられるように変形していることが (a) の変形図からわかる．(b) は σ_x の分布で SiN 膜端のシリコンとの界面近傍に応力が分布することがわかる．(c), (d) は結晶方位を示した Fig. 4.1 におけるすべり面 ($\bar{1}\bar{1}1$) の $[011]$ 方向の分解せん断応力分布である．SiN 薄膜と Si の界面の端部に 1GPa 以上の大きな応力が生じ，薄膜の外側に向かう方向により大きな応力場が分布する結果となり，Fig. 4.2 に示した転位の分布とも一致していることがわかる．

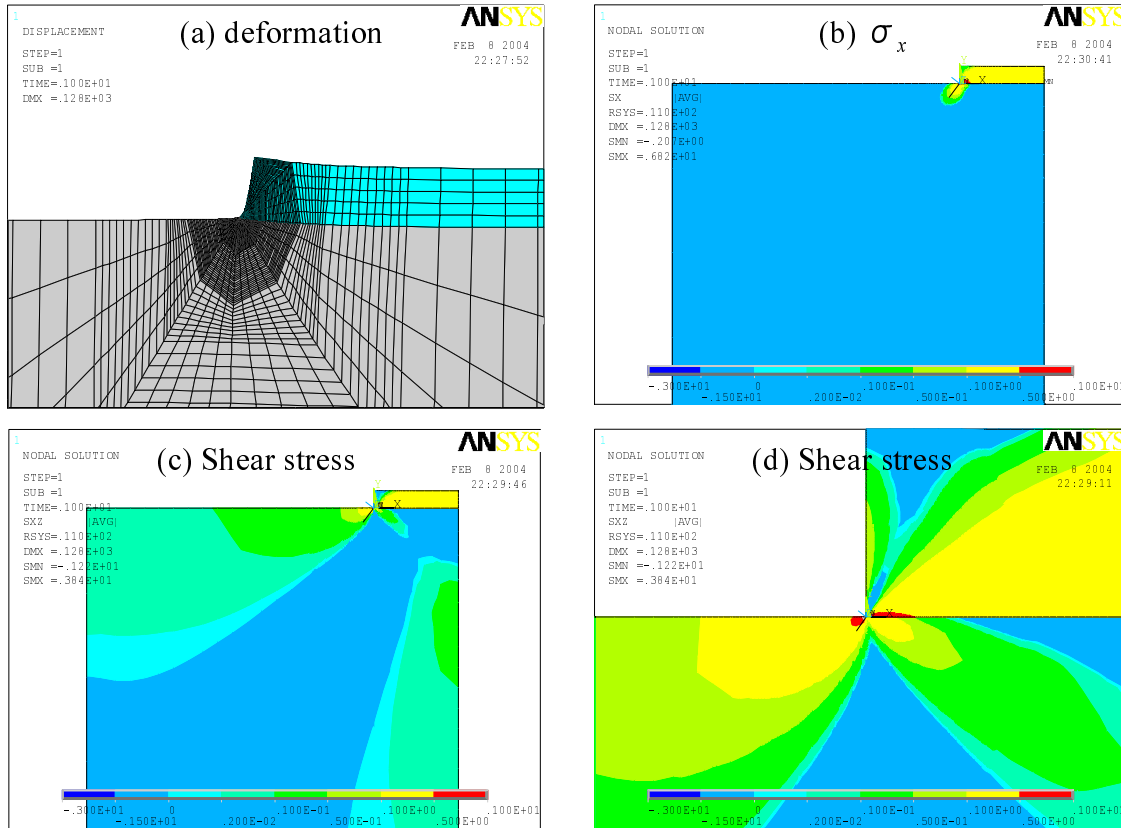


Fig. 4.8 Result of FEM. (a) is deformation, (b) is σ_x distribution. (c) and (d) are distribution of applied stress for ($\bar{1}\bar{1}1$)[011] dislocation. The large force exists from stress singularity point toward the dislocation slip direction.

4.2.2.2 Square Pad

作成した Square Pad の三次元解析モデルを Fig. 4.9 に示す．解析範囲をシリコン基板上にある一つの正方形 SiN 薄膜とし，対称性を考慮して 1/4 モデルとした．SiN 薄膜の膜厚は 250 nm，膜幅は $10.0\mu\text{m}$ ，シリコン基板部は幅 $20.0 \times 30.0\mu\text{m}$ ，深さ $5.0\mu\text{m}$ とし，実際のシリコン基板の厚さ $500\mu\text{m}$ を近似する 100 nm の厚さの等価剛性要素をその下部に使用して要素数の増加を抑えた．使用した要素は六面体一次要素で，総要素数は 26456，総節点数は 29281 である．Line & Space の場合と同様に SiN 薄膜と Si の界面の端部，特に薄膜角部に応力が集中すると考えられるのでその領域のメッシュを密に切っている．境界条件は x, z 方向の対称境界面， y 方向底面をそれぞれ面方向固定，もう一方の x, z 方向面を面方向カップリングとし，SiN 薄膜に比べて十分に厚いシリコン基板が一様に変形する状態を考慮した．使用した物性値は Line & Space の場合と同様に Table 4.1 に示すとおりで，シリコン基板等価剛性要素はヤング率 204000GPa ，ポアソン比 0.20，線膨張係数 3.0×10^{-6} としている．ただし SiN 薄膜には形成時に作用する引っ張りの真性応力を初期応力 1.6GPa として与えた．

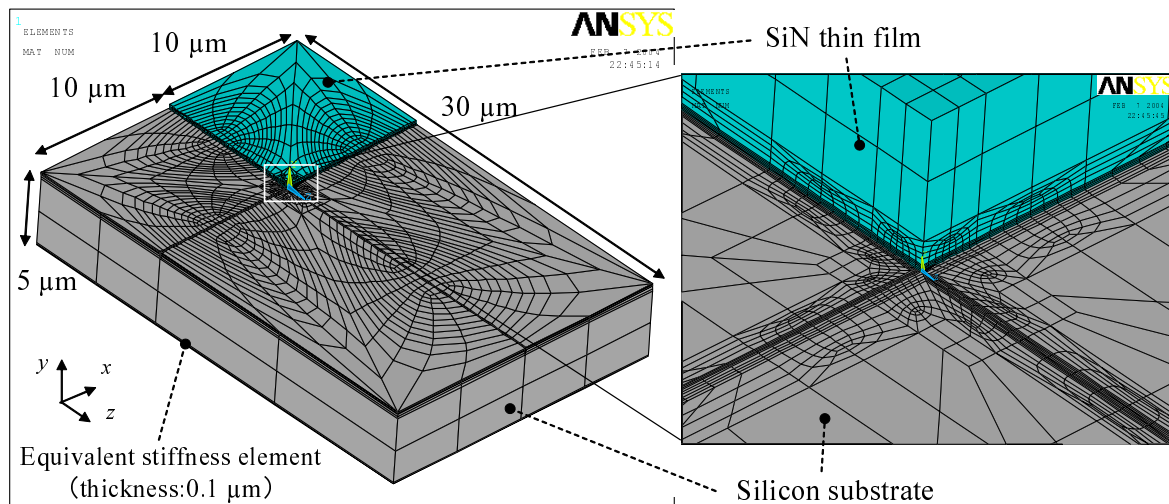


Fig. 4.9 3D FEM mesh of the analysis model for square SiN thin film.

応力解析の結果を Fig. 4.10 に示す．(a)，(b) は薄膜とシリコン基板近傍を拡大した変形図で，引っ張りの真性応力によって SiN 薄膜全体が収縮することによって角部が三次元的な変形を起こしていることがわかる．中段の二つのコンターはミーゼスの相当応力の分布を示したもので (c) はモデル全体を，(d) は膜端部を拡大したものである．シリコン基板と SiN 薄膜の界面端部で大きな応力が発生することがわかる．(e) は Fig. 4.1 の右に示す模式図と同様に SiN 薄膜の端部で (f) をすべり面 $(\bar{1}\bar{1}1)$ で切断し $[011]$ 方向の分解せん断応力分布を示したものである．(d) は $z = -20.0\text{ nm}$ における xy 切断面でのすべり系 $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ せん断応力分布を示したもので，Fig. 4.8 と同様に SiN 薄膜と Si の界面の端部に 1GPa 以上の大きな応力が生じ，転位のすべり面・すべり方向に沿って分布している．ただし三次元モデルのため二次元解析と比較してメッシュが粗くなっているためコンターが滑らかではない．

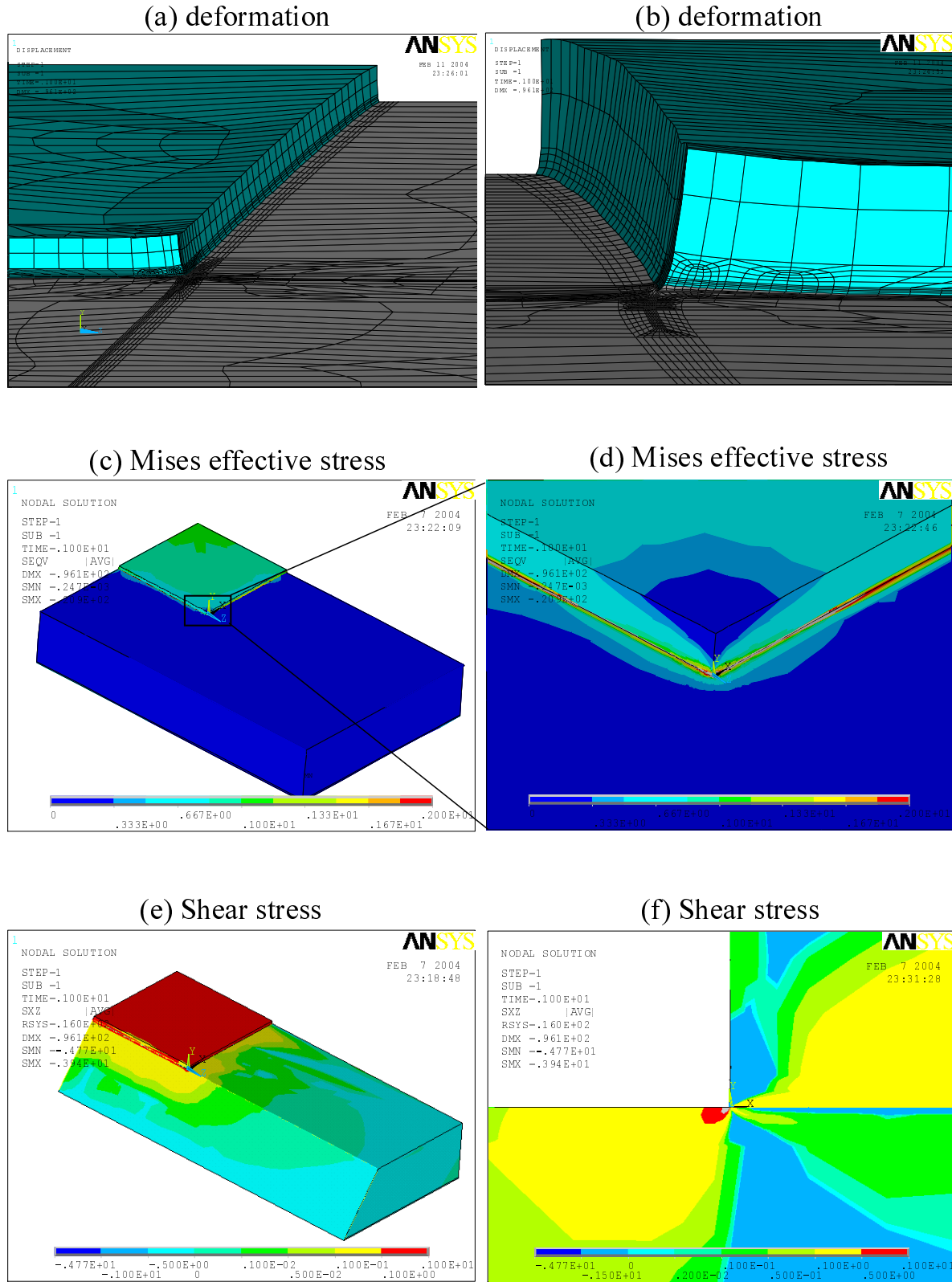


Fig. 4.10 (a), (b) are deformation, (c), (d) are contours of mises effective stress and (e), (f) are shear stress in $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ slip system.

4.2.3 転位の発生

これまでの応力解析の結果から SiN 薄膜とシリコン基板の界面端部には応力特異場が存在することが明らかになった．一方，太田³⁴⁾らは応力特異点近傍のすべり系分解せん断応力が式 (4.1) によって K 値で表される場合， 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を実験的に確かめた．よって本章のシミュレーションにおいてはこの K 値を転位の発生条件として導入する．

$$\tau_{rss} = \frac{K}{r^\lambda} \quad (4.1)$$

r は Fig. 4.2 に示す SiN 薄膜とシリコン基板の界面端部の応力特異点から転位までの断面内の距離である． 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 と膜幅によらず一定である．ただし式 (4.1) を利用し， K 値を転位の発生条件とするためには有限要素解析によって得られたせん断応力 τ_{rss} が式 (4.1) 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 (4.1) を式 (4.2) に変形し Line & Space や Square Pad の応力解析によって得られたすべり系せん断応力 τ_{rss} からこれらの解析モデルにおける K 値を求める．

$$K = \tau_{rss} \cdot r^\lambda \quad (4.2)$$

応力特異点近傍の K 値をプロットしたのが Fig.4.11 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 値を求めることができる．Line & Space の場合には $K = 0.071$ ，Square Pad では三次元解析によるメッシュの粗さからばらつきが大きい $K = 0.12$ とした．次にこの K 値を式 (4.1) に代入して求まるせん断応力と，作成した有限要素解析からもとまるせん断応力を比較したのが Fig.4.12 である．グラフから応力特異点からの距離が 10 nm 以下の領域では解析モデルにおける応力特異点近傍のせん断応力は式 (4.1) によく当てはまることが確認されたため， K 値を転位の発生条件として導入できる．

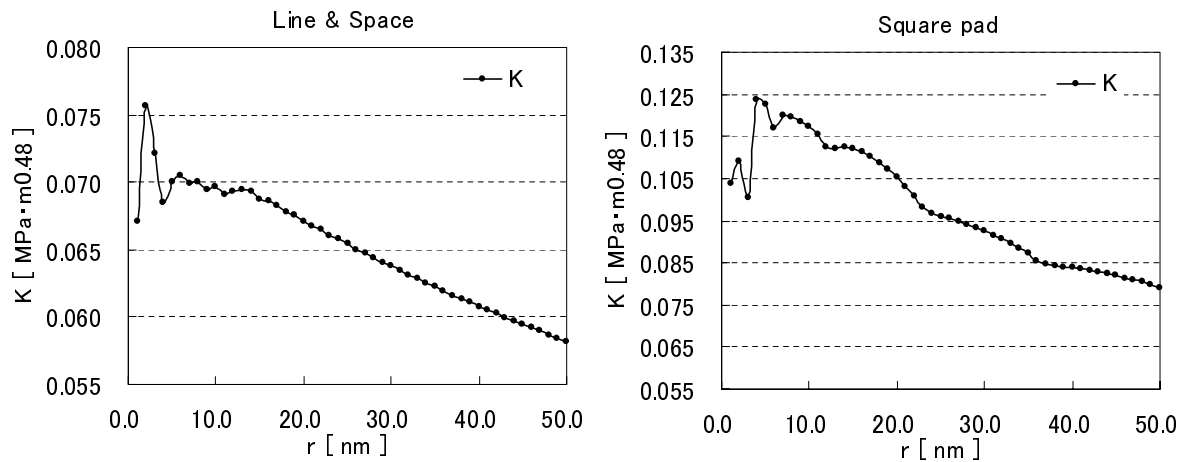


Fig. 4.11 Graph of K-value calculated from eq. (4.2). The horizontal axis is distance from stress singularity point and the vertical line is K value [MPa·m^{0.48}].

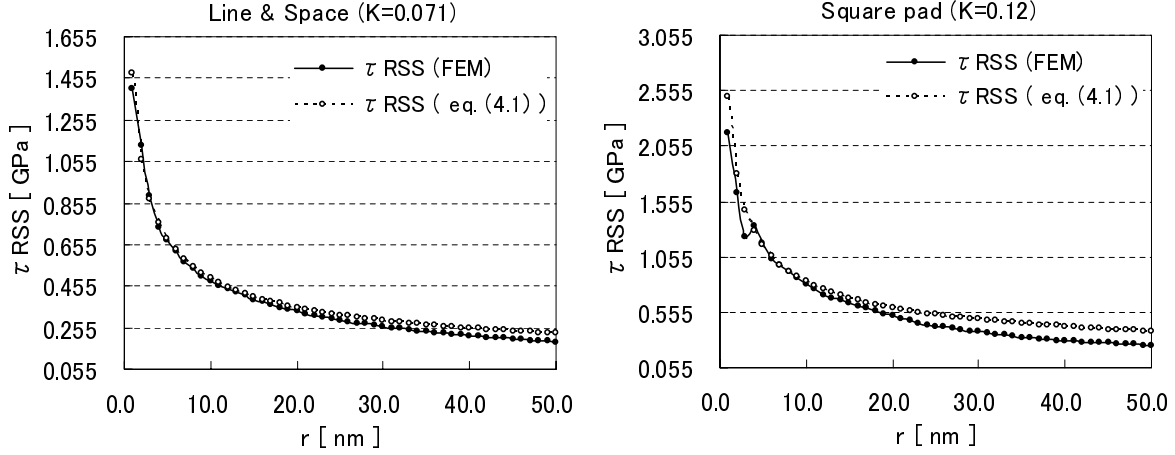


Fig. 4.12 Comparison of τ_{rss} from eq. (4.1) with FEM analysis. The horizontal axis is distance from stress singularity point and the vertical line is τ_{rss} [MPa].

実際の現象では転位が発生することで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 (4.3) のように応力解析により求めた 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³⁵⁾。

$$K' = K - K_{rep} \quad (4.3)$$

$$K_{rep} = \frac{\mu b(1 - 0.25v)}{2\pi(1 - v)} \sum_i^n \frac{1}{r_i^{0.52}} \quad (4.4)$$

μ :せん断率 (60.5 GPa), v :ポアソン比 (0.20), b :バーガースベクトルの大きさ (0.384 nm), K_{rep} :転位の応力特異点に対する影響である。式 (4.4) の K_{rep} の導出は以下に説明する。距離 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, 刃状転位に働く力は式 (4.5), (4.6) で表される。

$$f_{rep,screw} = \frac{\mu b}{2\pi r} \quad (4.5)$$

$$f_{rep,edge} = \frac{\mu b}{2\pi(1 - v)r} \quad (4.6)$$

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 (4.7) は互いに平行な n 本の 60° 転位の内, i 番目の転位が他の転位から受ける力である。

$$f_{rep}^i = \frac{\mu b^2(1 - 0.25v)}{2\pi(1 - v)} \sum_{j=0, j \neq i}^n \frac{1}{r_i - r_j} \quad (4.7)$$

以上から $f = \tau b$ と式 (4.7), 式 (4.1) を利用して以下の式変形により応力特異点に対する K 値の減少分 K_{rep} を導出できる。

$$\tau_{rep} = \frac{\mu b(1 - 0.25v)}{2\pi(1 - v)} \frac{1}{r}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\mu b(1 - 0.25\nu)}{2\pi(1 - \nu)} \frac{1}{r^{0.52}} \frac{1}{r^{0.48}} \\
&= \frac{K_{rep}}{r^\lambda}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

式 (4.3) は応力解析から式 (4.1) を利用して算出された K 値を転位の存在により減少させ ($-K_{rep}$) , 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 , すなわち転位が発生することで応力特異点近傍のひずみ場が緩和されるということを意味する . よってシミュレーションのアルゴリズムとし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新たな転位が発生するものとする . ただしこれまでの議論は無限直線転位同士の相互作用に基づいて K_{rep} 値の導出を行っているため , 三次元形状の転位ループに適用する場合には転位発生箇所 (応力特異点) からの距離 r と比較して転位形状が直線状であると近似できる場合に限る .

4.2.4 酸素濃度の影響

転位はシリコン基板中に存在する酸素原子によってその運動を妨げられ , ある応力以下では固着することになる^{36,37)} . そこで基板の酸素濃度の影響をシミュレーションに反映させる手法として , 転位の移動速度に酸素濃度による停止応力の項を組み込んだ式³⁸⁾ を使用することとした . つまり転位の運動は以下の式で表される .

$$v = \begin{cases} B \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \exp \left(-\frac{Q}{k_B T} \right) & \tau > \tau_{cr} \\ 0 & \tau \leq \tau_{cr} \end{cases} \tag{4.9}$$

$$\tau_{cr} = 2.2 \times 10^{-19} C_0 \exp \frac{0.215}{k_B T} \tag{4.10}$$

$B = 7.2 \times 10^{10} [\mu\text{m/s}]$, $m = 1.1$, $Q = 2.2 [\text{eV}]$, $\tau_0 = 10 [\text{MPa}]$, k_B はボルツマン定数 , T は温度 $[\text{K}]$, C_0 は酸素濃度 $[\text{cm}^{-3}]$ である . つまり式 (4.9) は , 転位の移動速度 v はせん断応力 τ 依存するが酸素による固着の効果を表す応力 τ_{cr} よりも小さい場合には移動速度を 0 とみなすことで酸素濃度の影響を取り込んでいる .

4.3 転位動力学シミュレーションの結果

4.3.1 Line & Space

Line & Space に対するシミュレーションでは Fig. 4.2 から計測される SiN 薄膜長手方向の転位発生密度や断面内における転位発生数，転位間距離を実験との比較を行った．シリコン基板は実験で扱われた三種類のウエハのうち，酸素濃度の最も小さい FZ ウエハと最も大きい CZ ウエハの二種類を対象とした．それぞれのシリコンウエハの酸素濃度と式 (4.10) から算出される停止応力を Table 4.2 に示す．FZ ウエハと CZ ウエハの酸素原子による停止応力はそれぞれ 0.156×10^{-1} ， 0.125×10^1 [MPa] と二桁ほど CZ ウエハの方が大きな値で，FZ ウエハについては酸素原子の影響がほぼ無いとみなすことができる．シミュレーション条件は FZ ウエハ（低酸素濃度）では温度 900 ，応力特異場の大きさ

Table 4.2 Critical stress of dislocation calculated from eq. (4.10) which is dependent on oxygen concentration of silicon substrate.

	Oxygen concentration C_0 [atoms/cm ³]	Critical stress τ_{cr} [MPa]
FZ wafer	1.0×10^{16}	0.156×10^{-1}
CZ wafer	8.0×10^{17}	0.125×10^1

$K=0.10$ ，CZ ウエハ（高酸素濃度）では 1000 ， $K=0.085$ とした．Fig. 4.2 左のエッチピット写真から SiN 薄膜長手方向の転位密度をおおよそ概算でき，Fig. 4.1 に示す転位拡張幅（シミュレーション幅） W は FZ ウエハでは $W=20 \mu\text{m}$ ，CZ ウエハでは $W=1.0$ ， $2.0 \mu\text{m}$ とした．転位の発生条件は発生点を通過する $[001][\bar{1}\bar{1}0]$ 断面（Fig. 4.2 参照）内での K 値を 4.2.3 節の手法により評価する．具体的には 900 ，1000 における転位発生限界 K 値を 0.080，0.060 とし³⁴⁾，初期転位ループ半径を 10 nm，すべり系は $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ とした．ただし CZ ウエハでは薄膜長手方向に発生する転位ループ間隔が狭く，無限直線転位同士の相互作用に基づいて応力特異場の大きさ K 値を減少させる手法をそのまま適用するのは難しいため，断面内では一本の転位ループが確認されたという実験結果³⁴⁾に合わせて転位の発生を一つに限った場合の計算も行った．

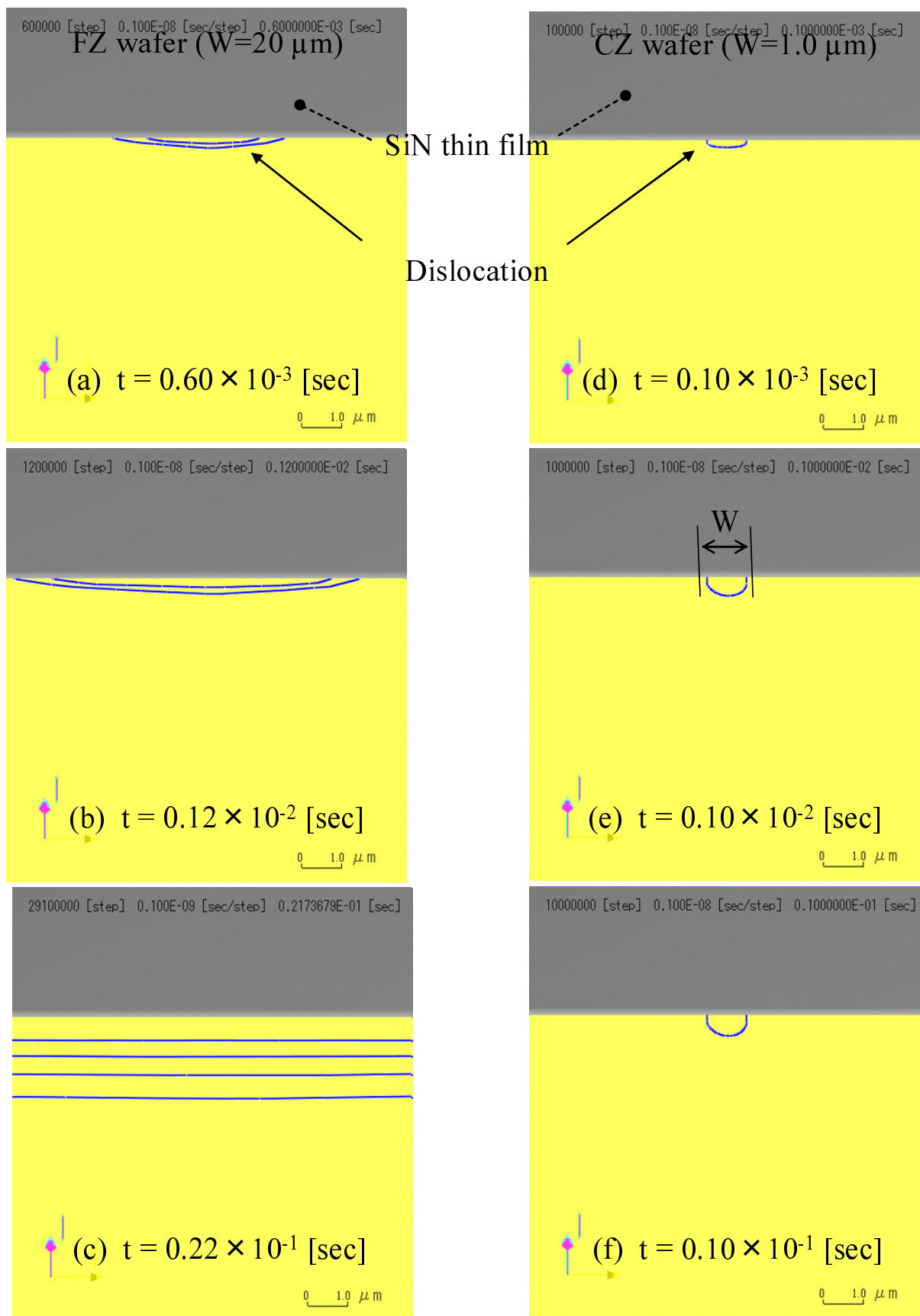


Fig. 4.13 Simulation results of generated dislocation loops in FZ (a, b, c) and CZ (d, e, f) wafer.

両ウエハにおける転位ループ運動の様子を Fig. 4.13 に示す．(a) , (b) , (c) は $W=50\text{ }\mu\text{m}$ の場合の FZ ウエハにおける $t = 0.60 \times 10^{-3}, 0.12 \times 10^{-2}, 0.22 \times 10^{-1}$ 秒後の転位ループ , (d) , (e) , (f) は $W=1.0\text{ }\mu\text{m}$ の場合の CZ ウエハにおける $t = 0.10 \times 10^{-3}, 0.10 \times 10^{-2}, 0.10 \times 10^{-1}$ 秒後の様子を示している．FZ ウエハでは K 値に基づいた発生条件を適用しているため新たな転位が生じ , (c) の状態では四本の転位ループが存在している．一方 , 発生条件を適用していない CZ ウエハでは $W=1.0\text{ }\mu\text{m}$ の幅に広がった転位ループが張力によりそれ以上運動できなくなっている．発生した転位数を N , 転位の応力特異点からの距離 r を実験と比較した結果を Table 4.3 に示す．FZ ウエハの場合 , 転位の発生数は 4 個となり複数個発生した実験結果の傾向を再現することができた．CZ ウエハでは一つの転位ループのみを発生させた $W=1.0, 2.0\text{ }\mu\text{m}$ の条件では TEM の断面写真における応力特異点からの距離 $0.6\text{ }\mu\text{m}$ と近い値となり転位の分布を再現することができた．

Table 4.3 Dislocation coordinates from a stress singularity point. Comparison of simulation results with TEM observations ³⁴⁾.

	FZ wafer (900)		CZ wafer (1000)			
	TEM image ³⁴⁾	Simulation	TEM image	Simulation		
W [μm]		20		1.0	2.0	1.0
N	> 4	4	1	1 (fixed)	1 (fixed)	3
r [μm], 1 st	0.20	0.644	0.60	0.468	0.657	0.179
2 nd	0.36	1.09	-	-	-	0.368
3 rd	0.50	1.62	-	-	-	0.704
4 th	0.80	2.27	-	-	-	-

4.3.2 Square pad

実験に対応させて行った転位動力学シミュレーションの結果を示す．応力場については 4.2.2.2 節で解析を行ったものを使用した．また Fig. 4.5 に示した転位の発生状況から，対称性を考慮して四つある SiN 薄膜の角部の内，一つの転位列に対するシミュレーションを行う．解析条件は実験に対応させ温度を 900 ，初期転位ループの半径は 10 nm，すべり系は $(\bar{1}\bar{1}1)[011]$ と仮定し，発生位置は Fig. 4.9 に示す座標系において白い四角で囲まれた SiN 薄膜角部のシリコン基板との境界を原点とした場合 $(x, y, z) = (0, 0, -20)$ となる位置である．転位の発生数を 1 個に限定し，シリコン基板酸素濃度の影響を調べるシミュレーションを行った結果を Fig. 4.14 に示す．(a)，(b)，(c) は FZ ウエハにおける $t = 0.60 \times 10^{-3}$ ， 0.26×10^{-2} ， 0.18×10^0 秒後の転位ループの全体形状を，(d)，(e)，(f) は CZ ウエハの場合の $t = 0.50 \times 10^{-3}$ ， 0.25×10^{-2} ， 0.51×10^{-1} 秒後の形状である．両ウエハとも (c)，(f) の状態では式 (4.10) から算出される酸素原子による停止応力との平衡状態にある．SiN 薄膜角部からの距離 R は FZ ウエハでは $4.57 \mu\text{m}$ ，CZ ウエハでは $2.78 \mu\text{m}$ と明瞭な差が表れた．また転位ループ形状が実験結果から推測された形状に近いことが確認され，STI に適用した結果と同様に Fig. 4.10 に示したすべり系せん断応力分布に沿う形状となっている．

次に転位の発生数を複数個へ増加させた場合のシミュレーションを行った．転位発生条件として Line & Space の場合と同様に発生点を通る $[001][\bar{1}\bar{1}0]$ 断面 (Fig. 4.2 参照) 内での K 値により評価を行った．両ウエハにおける結果を Fig. 4.15 に示す．ただし転位数を増加させると計算負荷が大きくなるため，発生数の上限を 3 個とし，また単一の転位ループのシミュレーション結果から SiN 薄膜にかかる部分は無限直線転位と見なし (b) に示すようにカットオフを行い，計算時間の短縮を行った．(a)，(b) は FZ ウエハでの $t = 0.75 \times 10^{-2}$ ， 0.69×10^1 秒後の転位ループの形状であり，(d)，(e) は CZ ウエハでの $t = 0.75 \times 10^{-2}$ ， 0.24×10^0 秒後の転位ループの形状である．両ウエハとも (b)，(e) の状態では式 (4.10) から算出される酸素原子による停止応力との平衡状態にある．SiN 薄膜角部からの距離 R は FZ ウエハでは $7.06 \mu\text{m}$ ，CZ ウエハでは $4.39 \mu\text{m}$ と両ウエハとも明瞭な差を維持しながら転位ループ数が 1 個の時よりも大きくなった．(c)，(f) は Fig. 4.5 右の TEM 写真に対応させ (b)，(e) における転位形状を真上から見たものである．幅 $0.4 \mu\text{m}$ の部分は表面から深さ幅 $0.3 \mu\text{m}$ の位置を表しており TEM 観察試験片と同じ厚さである．両者の転位形状がよく似ていることからシミュレーションにおける実験結果の再現性の高さを裏付けるものとなっている．

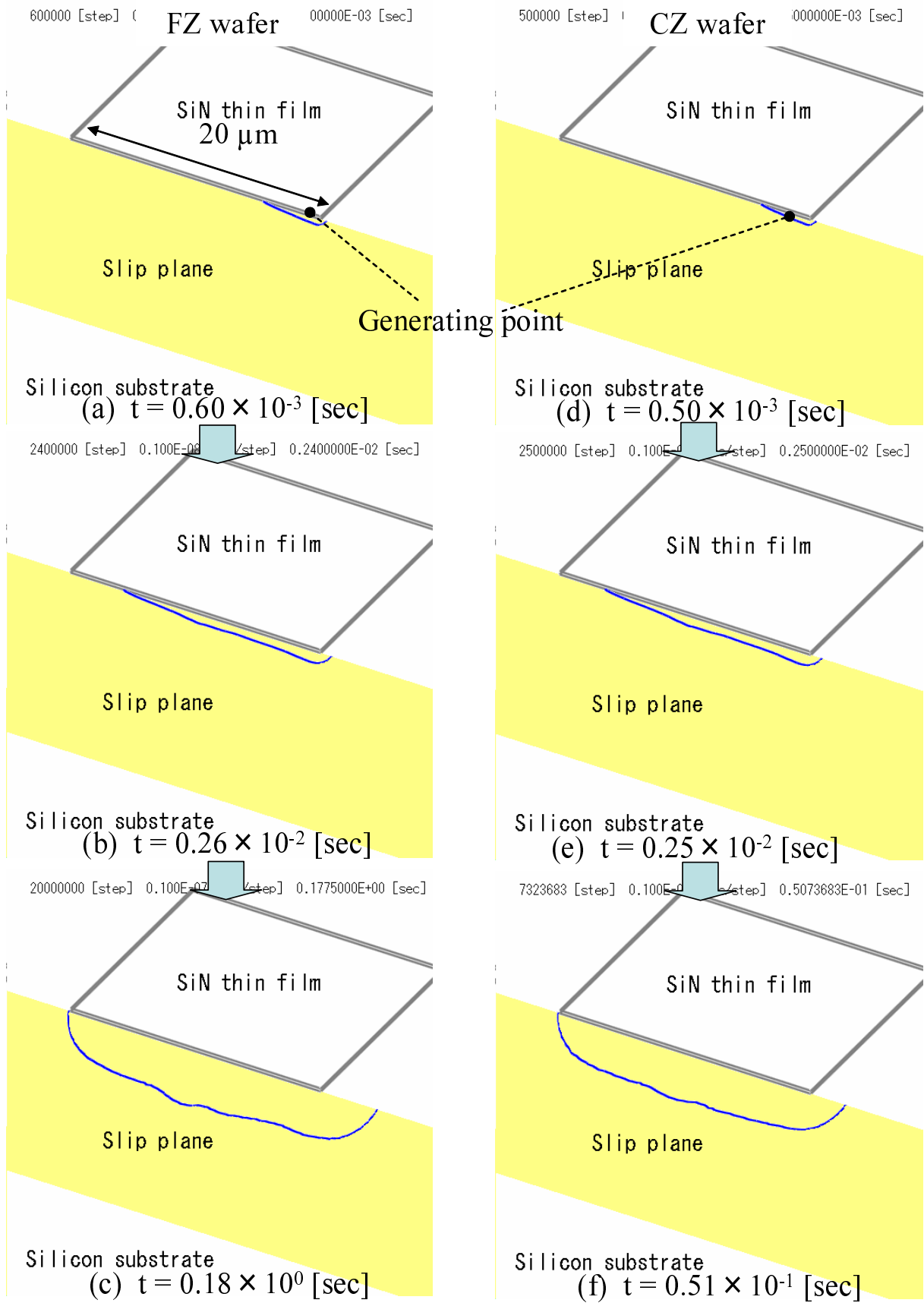


Fig. 4.14 Simulation results of generated dislocation loops near the SiN square pad in FZ and CZ wafer.

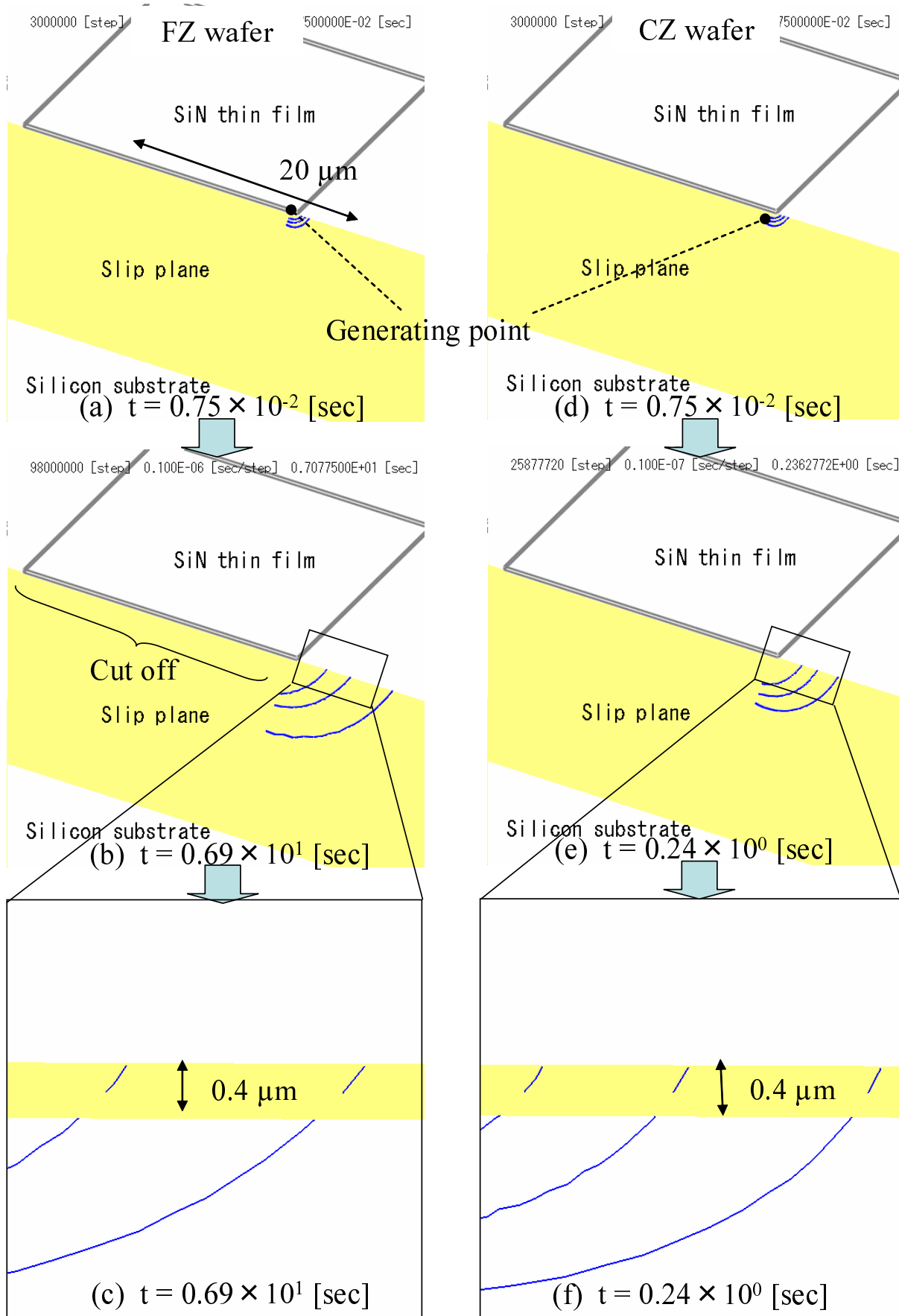


Fig. 4.15 Simulation results of generated dislocation loops with cut off in FZ and CZ wafer.

転位形状のカットオフを行い，最大発生数を1あるいは3個とした場合の両ウエハにおける転位列の移動距離 R と速度を，4.2.1.2の実験結果と合わせてプロットしたものを Fig. 4.16 に示す．シミュレーションでは実験で行った最小アニール保持時間 60 秒に到達する前に発生した転位ループが平衡状態に達し停止する結果となった．ただし移動距離や速度におけるグラフの傾きから，実験値はシミュレーション結果の延長線上にあるため，実験では観測できなかったミリ sec オーダーの初期の転位ループの運動について再現できていると考えられる．

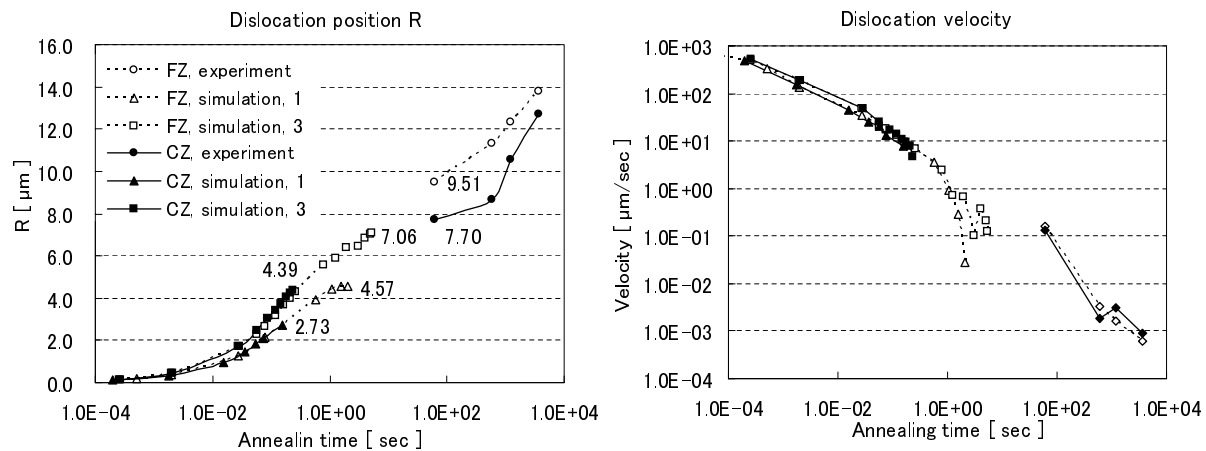


Fig. 4.16 Dependence of dislocation position, number and velocity on annealing time in experiment and simulation.

4.4 考察

4.4.1 転位発生条件

Line & Space に対して行ったシミュレーションでは Table 4.3 に示すように、FZ ウエハの場合は転位ループが断面内において複数個発生する実験結果の傾向を再現することができたが、応力特異点からの距離 r について高い再現性を得ることはできなかった。これは酸素濃度による停止応力が小さい FZ ウエハでは平衡状態までシミュレーションできなかったためであると考えられる。応力特異点からの距離が近い順に比較を行っているため、新たに転位が発生することによってシミュレーションの結果は大きく変わってしまうと考えられる。一方 CZ ウエハにおいて 1 本の転位ループのみを発生させた場合、応力特異点からの転位の距離について実験結果との良い再現性が得られたが、 K 値によって後続の転位の発生を許した場合、FZ ウエハと同様に複数の転位が発生してしまい、実験結果とは一致しなかった。

シミュレーションではシリコン基板の酸素濃度の影響を転位の停止応力として反映させる手法を採用し、二種類のウエハの停止応力は CZ ウエハの場合 1.25 MPa、FZ ウエハでは 1.85×10^{-2} MPa と二桁程度異なる。しかしながら SiN 薄膜近傍では応力分布が数百 MPa 程度であり、転位ループは停止応力に影響されることなく運動するため、Line & Space のシミュレーションを取り扱う場合には酸素濃度の影響が反映されない結果となった。そこで実験での観察結果から SiN 薄膜長手方向の転位密度がシリコン基板酸素濃度によって変化することに着目し、転位拡張幅 W を入力パラメータとすることで CZ ウエハと FZ ウエハにおける酸素濃度の差を再現したが、転位発生頻度がシリコン基板酸素濃度によってなぜ異なるかについての議論、またシミュレーションにおいて酸素濃度の違いを反映できる転位発生基準の構築が必要である。

4.4.2 転位の反応

Line & Space におけるシミュレーションでは発生した転位ループが隣接する転位ループと同符号の場合は annihilation を起こして一つのループとなり，異符号の場合は junction などによって不動化すると仮定した．このような現象をシミュレーションによって再現した結果を Fig. 4.17 に示す．すべり面が $(\bar{1}\bar{1}1)$ の場合，取りうるすべり方向は $[101]$ ， $[011]$ ， $[1\bar{1}0]$ の3方向，正負を考慮すると6方向となる．転位線の向きを Fig. 4.17 で左から右に向かう向きとした場合，転位が拡張する方向に運動するのは Line & Space における応力場では $b_1 = \frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}]$ ， $b_2 = \frac{a}{2}[\bar{1}0\bar{1}]$ の二つとなることをシミュレーションによって確認した．junction におけるバーガースベクトルの反応は

$$b_1 + b_2 = \frac{a}{2}[\bar{1}0\bar{1}] + \frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}] = \frac{a}{2}[\bar{1}\bar{1}\bar{2}] = b_3 \quad (4.11)$$

となり， b_3 がこのすべり面のすべり方向とは一致せず，エネルギーについても $|b_1|^2 + |b_2|^2 < |b_3|^2$ となるため，この反応は反発する転位同士が外部応力などによって強制的に junction を形成させられている状態を示している．一方 annihilation は

$$b_1 + (-b_1) = \frac{a}{2}[\bar{1}0\bar{1}] + \frac{a}{2}[101] = 0 \quad (4.12)$$

となるため当然反応部分の転位は消滅する． b_2 を - 倍しているのは反応を起こす部分の転位線ベクトルが異符号となっているためである．また下段に示したように junction と annihilation が隣り合う形で反応を起こすケースもある．

4.4.3 転位密度

実際に計測することが困難な三次元形状の転位の長さを 4.3 節で示したシミュレーションの結果から算出し，CZ ウエハと FZ ウエハでの比較を行った．両者ともシミュレーション幅 $W=20 \mu\text{m}$ ，つまり長さが $20 \mu\text{m}$ の SiN 薄膜の片側に発生・拡張した転位の総延長として求めた．FZ ウエハは $W=20 \mu\text{m}$ の場合に発生した4本の転位の総延長を，CZ ウエハについては $W=1.0 \mu\text{m}$ のシミュレーションを基本単位として，SiN 薄膜方向に20個連ねることで長さが $20 \mu\text{m}$ の SiN 薄膜近傍でのシミュレーションと考え，発生した一つの転位ループの長さを20倍にして比較を行った．結果を Table. 4.4 に示す．シリコン SiN 薄膜

Table 4.4 Sum of dislocation length in CZ and FZ wafer per $20 \mu\text{m}$ SiN thin film.

	CZ wafer	FZ wafer
Simulation width $W [\mu\text{m}]$	$1.0 \times 20 = 20.0$	20.0
Each dislocation length $[\mu\text{m}]$	2.06	20.2, 20.8, 21.7, 22.8
Sum of each length $[\mu\text{m}]$	41.2	85.5

1mm 当たりの転位発生数を CZ ウエハと FZ ウエハで比較した場合，エッチピットによる観察³⁴⁾では CZ ウエハの転位発生数は FZ ウエハのおよそ3倍ほどと，大きな差がある．

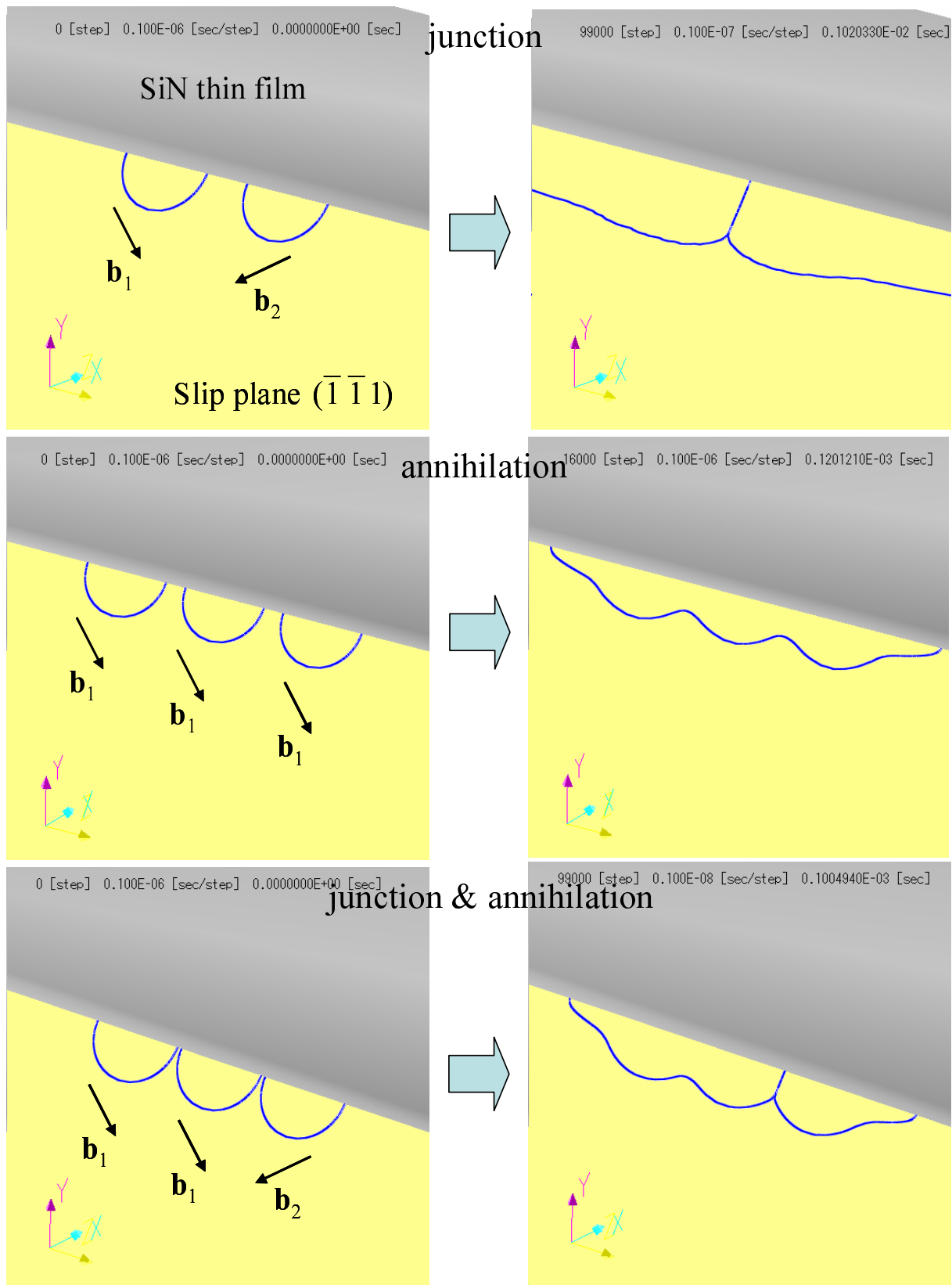


Fig. 4.17 Short range reaction (annihilation, junction) of generated dislocaitons near SiN thin film.

しかしながらシリコン基板内部に拡張している転位ループの総延長をシミュレーション結果から比較した場合、Table. 4.4 でわかるように、逆に FZ ウエハの転位の総延長の方が長い。よって半導体素子上のシリコン基板においても「電流のリーク源となって半導体素子の不良を招く転位」の影響を見積もるという観点からは、見かけ上の転位発生数ではなく、本来の転位密度の定義 $\rho = \text{単位体積の結晶中に含まれる転位の全長} [\text{m}/\text{m}^3 = \text{m}^{-2}]$ を比較するほうがよりの確であると思われる。今回の結果から、実際の不良素子中の転位密度を算出するにあたって本シミュレーションが有効なツールとして活用できる可能性があらることが示された。

4.4.4 転位の運動

Square pad に対するシミュレーションでは計算量を削減するために転位ループの形状のカットオフを行ったが、その影響を Fig. 4.18 に示す。FZ, CZ の両ウエハにおいて転位ループ数が 1 個の場合の全形状をシミュレーションした場合とカットオフを行った場合の転位の移動距離 R について比較を行っている。カットオフを行った場合、転位の移動速度はカットオフを行わなかった場合に比べて FZ ウエハ, CZ ウエハでそれぞれ 8 %, 31 % 程度にまで小さくなってしまう。最終到達位置についてはカットオフを行わなかった場合 FZ ウエハ, CZ ウエハでそれぞれ $4.54 \mu\text{m}$, $2.78 \mu\text{m}$, カットオフを行った場合はそれぞれ $4.57 \mu\text{m}$, $2.73 \mu\text{m}$ と大きな違いが見られない。これは転位ループの運動初期段階では Fig. 4.14 の (d) に示すカットオフ領域に存在する転位が主な運動源となっているため、右側の転位部分も張力によって張り出されるが、平衡状態付近ではカットオフ領域に存在する転位ループはほぼ直線状であり、距離も大きく離れていることから最終到達位置 R には大きな影響を及ぼさないものと考えられる。

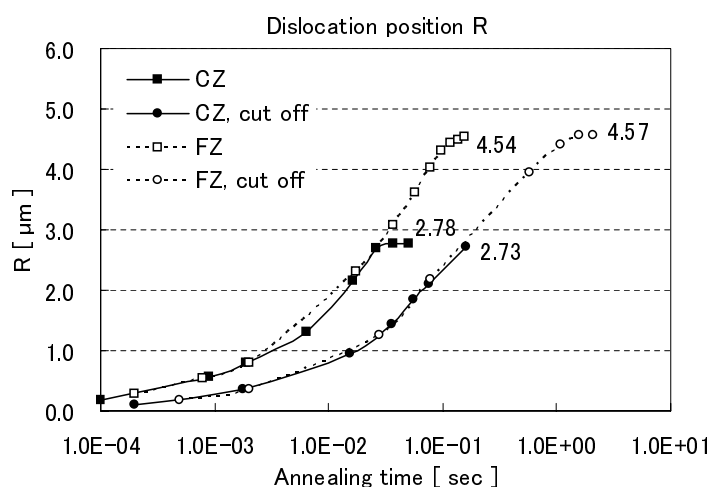


Fig. 4.18 Dependence of dislocation position on annealing time in simulation. Comparison of none cut off with cut off.

Fig. 4.6 右に示したグラフから、実験における二種類のウエハでの転位の移動速度はほぼ等しいため、Fig. 4.6 左のグラフに見られる転位移動距離 R の差は昇温中に転位が拡張し始めるタイミングが異なることで生じていると考えられる。一方シミュレーションにお

いては実験を行ったアニール保持時間に到達する前に発生した転位ループが平衡状態に達し停止したものの、Fig. 4.16 に示すように転位数を 1 から 3 に増加させた場合、両ウエハで転位の移動距離が増加した。このことから Fig. 4.5 で観察された SiN 薄膜の角部に発生する転位列においては、先発の転位は後発の転位によって押し出されていることがわかる。次に転位の発生数を実験において 60 分のアニール後に発生した平均転位数 6 個としたシミュレーションを行い、新たに発生する転位が既存の転位ループの位置に与える影響を調べるシミュレーションを行った。ただし計算時間の制約から転位の形状全体ではなく表面近傍にある転位素片のみの計算を行った。結果を Fig. 4.19 に示す。両ウエハにおい

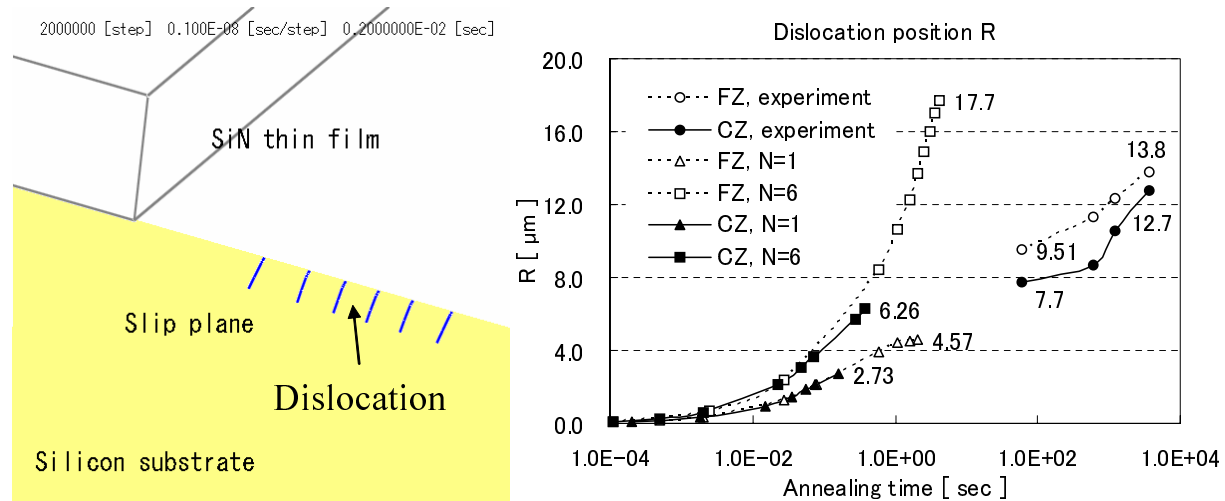


Fig. 4.19 Dependence of dislocation position on annealing time in case of 6 short and straight dislocation segments.

て転位発生数が一つの時と比較して転位移動距離 R は大幅に増加した。FZ ウエハの場合は $R=17.7 \mu\text{m}$ と、実験で得られたアニール 60 分後の $R=13.8 \mu\text{m}$ を超えても停止することなく運動を続けた。このことから新たに発生する転位が既存の転位との相互作用によってその位置に影響を与えることが再確認された。一方 CZ ウエハの場合、移動距離は増加するものの実験値 $R=12.7 \mu\text{m}$ に到達すること無く $6.26 \mu\text{m}$ で平衡状態に達した。転位の形状をカットオフし Fig. 4.19 の左の図に示すように張力の作用が無いほぼ直線状の転位線であるにもかかわらず実験値に到達することなく停止してしまったことから式 (4.10) によって算出された酸素原子による停止応力式の妥当性について検討する必要がある。

4.5 結言

開発した転位動力学シミュレータを SiN 薄膜が形成されたシリコン基板に適用した．応力解析を行うことで薄膜の有する真性応力によってシリコン基板内に発生する応力場を明らかにすると共に，転位の発生や運動について実験との比較を行った．その結果，Line & Space については転位拡張幅 W をパラメータとすることで酸素濃度の違いによる断面内転位位置を再現できた．ただしシリコン基板酸素濃度に依存する転位の定量的な発生条件，シミュレーションにおけるアルゴリズムの導入については課題として残された．一方，半導体素子の電気的特性に与える影響を見積もる上で，転位密度を定量的に評価することができた本シミュレーションは有効なツールとして活用できると考えられる．Square pad においては SiN 薄膜起因の転位について実験を行い，アニール時間に対する発生数と移動距離の関係を得ることができた．またシミュレーションを行うことによって実験で観察された転位ループの形状や転位発生数と移動距離の傾向を再現することができた．ただし実験結果との定量的な合わせこみを行うにはプログラムの高速化を行い，転位の発生数を増加させたシミュレーションや応力場のばらつきを考慮したシミュレーションを行う必要がある．

第5章 結論

半導体デバイス内に発生する転位の運動を解析することを目的として、転位論に基づいた三次元離散転位動力学シミュレータの開発を行った。作成したシミュレータを基本的な転位ループの運動や反応に適用し、その妥当性を確認した。また応用として半導体構造における転位発生例として代表的な STI 構造や SiN 薄膜起因の転位に対してシミュレーションを実行し、実験結果との定性・定量的な比較を行うことにより以下の結論を得た。

- 実験で観察された STI 構造や SiN 薄膜近傍に発生する転位の形状を再現することができたため、半導体構造内部での転位のすべり系の特性が可能になると共に、応力解析と転位動力学シミュレータを組み合わせることで発生箇所の推定が容易になることを実証した。
- 転位の平衡状態の形状は運動の駆動源となっているすべり系分解せん断応力分布が小さくなる領域において、転位線が曲率を持つことによって生じる線張力、酸素による固着の効果とつりあう形で停止する。
- 転位拡張幅 W をパラメータとすることでシリコン基板酸素濃度の違いによる断面内転位位置の傾向をおおよそ再現することができたが、転位の定量的な発生条件、シミュレーションにおけるアルゴリズムの導入については課題として残された。
- 転位密度を定量的に評価できることから半導体素子の電気的特性に与える影響を見積もる上で本シミュレーションが有効なツールとして活用できる。

付 録 A 任意点の応力値の算出

本論文では有限要素解析を行って応力分布を算出し、求めた応力値を転位に作用する外部応力としてシミュレータに受け渡している。転位の運動を解析するには解析範囲のあらゆる場所の応力値が必要なのにに対し、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入手できない。よって以下では本論文で行った得られた節点値のデータから任意の場所の応力値を求める方法について説明する。

A.1 四辺形一次要素

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³⁹⁾。以下では本論文中の二次元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について話を進める。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ためアイソパラメトリック要素では実際の要素における変位、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。

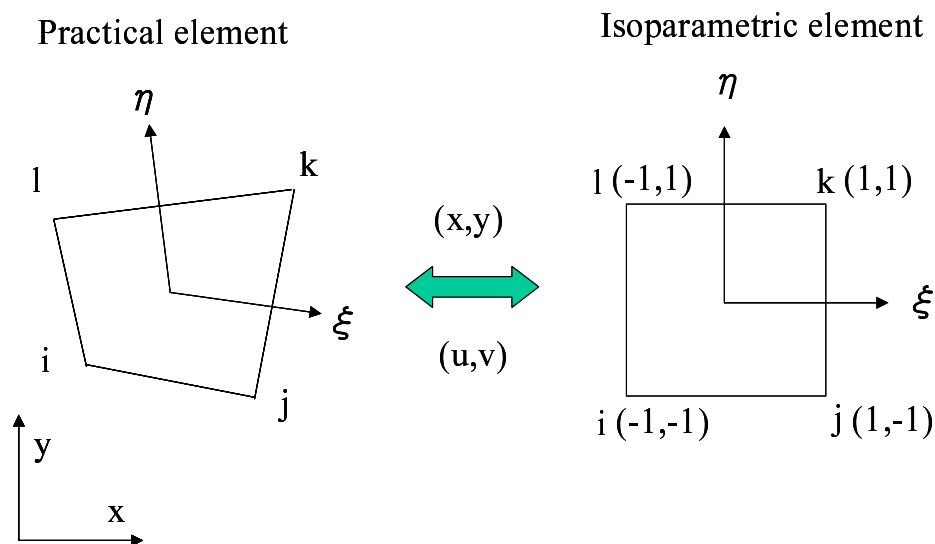


Fig. A.1 The isoparametric element and a quadrilateral linear element. The displacement and coordinate are translated by the shape function.

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

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

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

$N_{i \sim l}$ 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．任意の点 A(x_a, y_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．

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

式 (A.4) から点 A の要素内局所座標 $A'(\xi_a, \eta_a)$ を求めることができる．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．

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

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．よつ

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．

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

A.2 六面体一次要素

三次元応力解析で使用した六面体八節点一次要素における任意点 (x_a, y_a, z_a) の応力値 $\sigma_a(x_a, y_a, z_a)$ は二次元における四面体一次要素の場合と同様に以下のプロセスによって算出した．有限要素法からは節点の情報（節点番号，座標，応力），要素の情報（構成節点）を必要とする．

1. 任意点を内包する要素の判定
2. 要素内局所座標の算出
3. 節点応力から形状関数による補完

1. の判定については六面体要素を構成する六つの面それぞれの内向き法線ベクトルを算出し，その面内のある点と任意点 (x_a, y_a, z_a) とを結ぶベクトルとの内積をとることでその面と任意点との内外判定を行うことができる．六面体要素を構成する 6 面すべてについて内側にあると判定されれば応力を知りたい任意点はその要素に内包されていることになる．続く 2. では 1. によって判定された要素を構成する節点の座標 (x_i, y_i, z_i) と形状関数 $N_i(\xi, \eta, \zeta)$ から以下の方程式を解くことで任意点 (x_a, y_a, z_a) に対応する要素内局所座標 (ξ_a, η_a, ζ_a) を求めることができる⁴⁰⁾．

$$\begin{aligned} f_x(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=1}^8 N_i(\xi, \eta, \zeta) x_i - x_a = 0 \\ f_y(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=1}^8 N_i(\xi, \eta, \zeta) y_i - y_a = 0 \\ f_z(\xi, \eta, \zeta) &= \sum_{i=1}^8 N_i(\xi, \eta, \zeta) z_i - z_a = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

この連立一次方程式は Newton-Raphson 法により解く．

$$\begin{aligned} \xi_{k+1} &= \xi_k + \Delta\xi \\ \eta_{k+1} &= \eta_k + \Delta\eta \\ \zeta_{k+1} &= \zeta_k + \Delta\zeta \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\begin{Bmatrix} \Delta\xi \\ \Delta\eta \\ \Delta\zeta \end{Bmatrix} = -A^{-1} \begin{Bmatrix} f_x(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \\ f_y(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \\ f_z(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \end{Bmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_x}{\partial \xi} & \frac{\partial f_x}{\partial \eta} & \frac{\partial f_x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial f_y}{\partial \xi} & \frac{\partial f_y}{\partial \eta} & \frac{\partial f_y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial f_z}{\partial \xi} & \frac{\partial f_z}{\partial \eta} & \frac{\partial f_z}{\partial \zeta} \end{pmatrix} \quad (\text{A.10})$$

ここで六面体八節点一次要素の形状関数は以下のように与えられる⁴¹⁾ .

$$\begin{aligned}
N_1 &= \frac{1}{8}(1 - \xi)(1 - \eta)(1 - \zeta), \quad N_5 = \frac{1}{8}(1 - \xi)(1 - \eta)(1 + \zeta) \\
N_2 &= \frac{1}{8}(1 + \xi)(1 - \eta)(1 - \zeta), \quad N_6 = \frac{1}{8}(1 + \xi)(1 - \eta)(1 + \zeta) \\
N_3 &= \frac{1}{8}(1 + \xi)(1 + \eta)(1 - \zeta), \quad N_7 = \frac{1}{8}(1 + \xi)(1 + \eta)(1 + \zeta) \\
N_4 &= \frac{1}{8}(1 - \xi)(1 + \eta)(1 - \zeta), \quad N_8 = \frac{1}{8}(1 - \xi)(1 + \eta)(1 + \zeta)
\end{aligned} \tag{A.11}$$

3. では 2. で求められた要素内局所座標 (ξ_a, η_a, ζ_a) と形状関数, 有限要素解析によって得られた任意点を内包する要素の節点応力 $\sigma(x_i, y_i, z_i)$ から以下の式によって任意点応力 $\sigma_a(x_a, y_a, z_a)$ が求まる .

$$\sigma_a(x_a, y_a, z_a) = \sum_{i=1}^8 N_i(\xi_a, \eta_a, \zeta_a) \sigma(x_i, y_i, z_i) \tag{A.12}$$

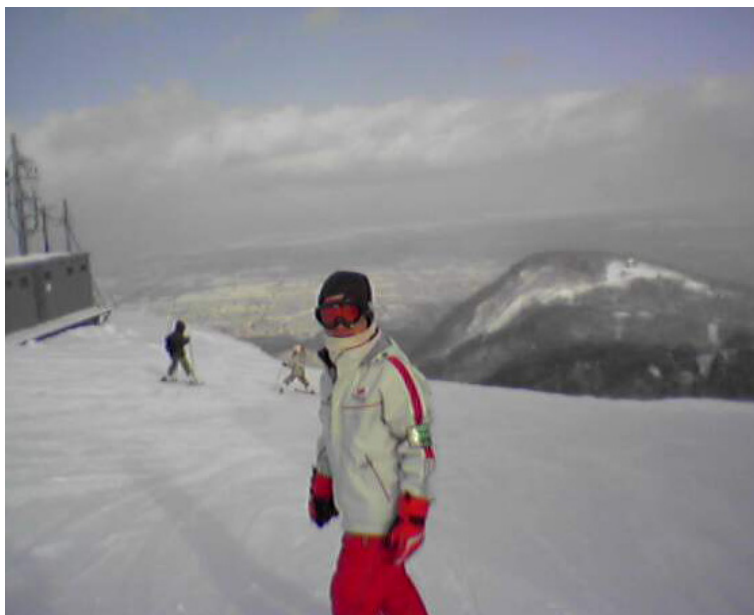
あとがき

謝辞

本研究を修士論文としてまとめるにあたり，学部四年時の卒業研究を含めて三年間，日々の研究についてご指導頂いた酒井信介教授，泉聡志講師には深く感謝致します．また日立製作所機械研究所第3部ナノデバイス構造研究室における二ヶ月間の実習では，それまで研究テーマでありながら，数値計算でしか扱ったことの無かった転位に関して実際に実験を行わせいただくと共に，開発したシミュレータの適用題材を提供して頂くことができました．研究室の皆様，そしてお忙しい中時間を割いてくださった太田裕之研究室長には深く感謝します．

岩崎さんをはじめ研究室の皆さんには研究だけではなく様々な面でお世話になりました．特に山際謙太工学博士，現博士課程の原祥太郎さんにはFMLのなんたるかを教えていただいたような気がします．最後に優秀な同期のみんな，お疲れ様でした．

著者近影



「行ってきます。」

参考文献

- (1) THE INTERNATIONAL TECHNOLOGY ROADMAP FOR SEMICONDUCTORS, “ 2003 EDITION EXECUTIVE SUMMARY ”, 39-40, (2003).
- (2) 徳山 巍 編著, “ 半導体ドライエッチング技術 ”, 産業図書 (1992).
- (3) 加藤 雅治, “ 入門 転位論 ”, 裳華房 (1999).
- (4) 志村 忠夫, “ 半導体シリコン結晶工学 ”, 丸善 (1993).
- (5) Intel Penang Microprocessor Failure Analysis Department, Malaysia, “ An Overview of Advanced Failure Analysis Techniques for Pentium and Pentium Pro Microprocessors ”, Intel Technology Journal Q2, 1-12 (1998).
- (6) Guenther Benstetter, Michael W. Ruprecht, Douglas B. Hunt, “ A review of ULSI failure analysis techniques for DRAMs ”, Microelectronics Reliability, 42, 307-316 (2002).
- (7) 阿部 孝夫, “ シリコン 結晶成長とウェーハ加工 ”, 培風館 (1994).
- (8) B. Devincere, M. Condat, “ MODEL VALIDATION OF A 3D SIMULATION OF DISLOCATION DYNAMICS: DISCRETIZATION AND LINE TENSION EFFECTS ”, Acta metall. mater. 40, 10, 2629-2637 (1992).
- (9) Nasr M. Ghoniem, L.Z. Sun, “ Fast-sum method for the elastic field of three-dimensional dislocation ensembles ”, PHYSICAL REVIEW B, 60, 128-139 (1999).
- (10) Hussein M. Zbib, Moono Rhee and John P. Hirth, “ ON PLASTIC DEFORMATION AND THE DYNAMICS OF 3D DISLOCATIONS ”, Int. J. Sci., 40, 113-127 (1998).
- (11) H. Cleveringa, E. Van der Giessen and A. Needleman, “ Discrete dislocation simulation and size dependent hardening in single slip ”, J. Phys. France, 8, 83-92 (1998).
- (12) L. Z. Sun, N. M. Ghoniem, S. - H. Tong, B. N. Singh, “ 3D dislocation dynamics study of plastic instability in irradiated copper ”, Journal of Nuclear Materials, 283-287, 741-745 (2000).

- (13) Hussein M. Zbib, Tomas Diaz de la Rubia, Moono Rhee, Jhon P. Hirth, “ 3D dislocation dynamics: stress-strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals ”, *Journal of Nuclear Materials* 276, 154-165 (2000).
- (14) M Verdier, M Fivel and I Groma, “ Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in fcc metals: Principles and applications ”, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 6, 755-770 (1998).
- (15) K. W. Schwarz, “ Simulation of dislocation on the mesoscopic scale. . Methods and examples ”, *J. Appl. Phys.*, 85, 108-119 (1999).
- (16) K. W. Schwarz, D. Chidambarro, “ Dislocation dynamics near film edges and corners in silicon ”, *J. Appl. Phys.*, 85, 7197-7208 (1999).
- (17) K. W. Schwarz, X. H. Liu, D. Chidambarrao, “ Dislocation modeling for the silicon world ”, *Materials Science and Engineering A309-310*, 229-232 (2001).
- (18) M Rhee, H M Zbib et al, “ Models for long-/short-range interactions and cross slip in 3D dislocation of BCC single crystals ”, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 6, 467-492 (1998)
- (19) J. Vanhellemont and S. Amelinckx, “ Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. . Theoretical model ”, *J. Appl. Phys.*, 61, 2170-2175 (1987).
- (20) John Price Hirth and Jens Loth, “ THEORY OF DISLOCATIONS ”, Wiley-Interscience, 149 (1982).
- (21) Haël Muhrabi, “ Self-consistent experimental determination of the dislocation line tension and long-range internal stress in deformed copper crystals by analysis of dislocation curvatures ”, *Material Science and Engineering*, A309-310, 237-245 (2001)
- (22) M. Imai, K. Sumino, *Philos. Mag. A*, 47, 599 (1983).
- (23) Udo Schwalke, “ Progress in device isolation technology ”, *Microelectronics Reliability*, 41, 483-490, (2001).
- (24) Tetsuya Ohashi, Michihiro Sato, Takuya Maruizumi, Isao Kitagawa, “ Simulation of dislocation accumulation in ULSI cells with STI structure ”, *Applied Surface Science*, 216, 340-346 (2003).
- (25) 齊藤直人, 坂田信二, 清水翼, 磯前誠一, 増田弘生, “ 薄膜多層構造体応力解析プログラム SIMUS2D/F の開発 ”, *日本機械学会論文集 (A 編)*, 55, 515, 1652-1656 (1989).
- (26) P. Sallagoity, F. Gaillard, M. Rivoire, M. Paoil, M. Haond, S. McCLATHIE, “ STI PROCESS STEPS FOR SUB-QUARTER MICRON CMOS ”, *Microelectronics Reliability*, 38, 271-276, (1998).

- (27) Masahiko Maeda, Koichi Ikeda, " Stress evaluation of radio-frequency-biased plasma-enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films ", J. Appl. Phys. , 83, 3865-3870 (1998).
- (28) J. Vanhellemont and S. Amelinckx, " Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. . Application of the theoretical generation model for local oxidation processes on (001) silicon substrates ", J. Appl. Phys., 61, 2176-2188 (1987).
- (29) J. Vanhellemont and C. Claeys, " Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. . High voltage transmission electron microscopy observations and theoretical results for ($\bar{1}11$) and (011) silicon substrates ", J. Appl. Phys., 63, 5703-5711 (1988).
- (30) S. Isomae, Y. Tamaki, A. Yajima, M. Nanba, M. Maki, " Dislocation Generation at Si_3N_4 Film Edges on Silicon Substrates and Viscoelastic Behavior of SiO_2 Films ", J. Electrochem. Soc. , 126, 1014-1019 (1979).
- (31) Seiichi Isomae, " Stress distributions in silicon crystal substrates with thin films ", J. Appl. Phys. , 52, 2782-2791 (1980).
- (32) Seiichi Isomae, " Stress in silicon at $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{SiO}_2$ film edges and viscoelastic behavior of SiO_2 films ", J. Appl. Phys. , 57, 216-223 (1984).
- (33) Hiroyuki Ohta, Hideo Miura and Makoto Kitano, " METHOD FOR PREDICTION OF DISLOCATION GENERATION IN SILICON SUBSTRATES OF SEMICONDUCTOR DEVICES ", Materials Science Research International, 4, 261-266 (1998).
- (34) 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).
- (35) Yun-Biao Xin and K. Jimmy. Hsia, " SIMULATION OF THE BRITTLE-DUCTILE TRANSITION IN SILICON SINGLE CRYSTALS USING DISLOCATION MECHANICS ", Acta mater. 45, 4, 1747-1759 (1997).
- (36) Dimitris Maroudas and Robert A. Brown, " Analysis of the effects of oxygen migration on dislocation motion in silicon ", J. Appl. Phys., 69, 3865-3877 (1991).
- (37) Dimitris Maroudas and Robert A. Brown, " Model for dislocation locking by oxygen gettering in silicon crystals ", Appl. Phys. Lett., 58, 1842-1844 (1991).
- (38) Dimitris Maroudas and Robert A. Brown, " Constitutive modeling of the effects of oxygen on the deformation behavior of silicon ", J. Mater. Res., 6, 2337-2352 (1991).
- (39) 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).

- (40) 泉 聡志, “ 分子動力学によるシリコンの原子レベル弾性の解明と有限要素法との結合手法の研究 ”, 博士論文, 付章
- (41) G. Dhatt, G. Touzat, “ 有限要素法全解 ”, パーソナルメディア, (1990).

以上

p.1 ~ 88 完

修士論文

平成 16 年 2 月 13 日 提出

26195 三宅 威生