

修士論文

転位動力学シミュレータの開発と シリコンの転位発生・成長過程への適用

p.1 ~ 146 完

平成 18年 2月 10日 提出

指導教官 泉 聡志 助教授

46165 小林 尚司

目次

第 1 章	序論	13
1.1	研究背景	13
1.2	研究目的	17
1.3	本論文の構成	17
第 2 章	手法と検証	19
2.1	緒言	19
2.2	転位動力学法	19
2.2.1	転位に作用する力	21
2.2.2	外力の評価	21
2.2.3	転位間相互作用の評価	21
2.2.4	鏡像力の評価	35
2.2.5	転位位置更新手法	39
2.2.6	数値計算的技巧	42
2.2.7	近接反応	45
2.2.8	交差滑り	48
2.3	分子動力学法	52
2.3.1	スリップベクトル	52
2.3.2	転位の可視化	52
2.3.3	Tersoff ポテンシャルと Stillinger-Weber ポテンシャルに対する転位運動 再現性についての検証	54
第 3 章	SiN 薄膜真性応力起因転位への適応	58
3.1	緒言	58
3.2	実験概要 [1]	58
3.3	転位動力学解析と考察	61
3.3.1	転位形状	61
3.3.2	SiN 角部からの転位移動距離	65

3.4	結言	68
第 4 章	イオンインプランテーション起因転位への適用	69
4.1	緒言	69
4.2	PED 発生に対する仮説	69
4.3	EOR 転位の unfaulting	76
4.3.1	積層欠陥モデル	76
4.3.2	解析条件	77
4.3.3	解析結果	78
4.3.4	すべり転位の射出	80
4.3.5	熱的振動の影響	83
4.3.6	析出物半径の影響	84
4.3.7	完全転位から PED への成長	84
4.4	Pre-PED から PED への成長過程	90
4.4.1	分子動力的アプローチ	90
4.4.2	転位動力的アプローチ	103
4.5	PED の運動	106
4.5.1	応力場解析	106
4.5.2	転位動力学解析	109
4.6	結言	113
第 5 章	析出物起因転位発生への適用	114
5.1	緒言	114
5.2	解析モデル	115
5.3	応力場解析	117
5.4	転位動力学解析	120
5.5	考察	124
5.6	結言	127
第 6 章	結論と展望	128
6.1	結論	128
付録 A		129
A.1	古典分子動力学法	129
A.1.1	シリコンの経験的原子間ポテンシャル	129

A.1.2	周期境界条件	133
A.1.3	Book-Keeping 法とその高速化法	133
A.1.4	運動方程式	134
A.1.5	無次元化	135
	参考文献	136
	謝辞	145

目次

1.1	2005 ITRS Product Technology Trends - Function Per Chip [2].	14
1.2	2005 ITRS Product Technology Trends - Half Pitch and Gate Length [2].	14
1.3	Left figure is TEM micrograph of silicon dislocation [1]. Right figure is DRAM cell diagram [3] and schematic of generated dislocation.	15
1.4	Flowchart of the thesis.	18
2.1	Schematics of straight line approximation. Dislocation loops are divided into some straight lines and nodes.	20
2.2	Geometry for computing the stress field about a straight segment of dislocation.	22
2.3	(a) The geometry of a infinite screw dislocation. (b) (c)The stress distribution of a infinite screw dislocation. Comparison between the exact solution [4] and approximate solution for various segment size. (b) The σ_{xz} component and (c) the σ_{yz} component are shown, respectively.	23
2.4	(a) The geometry of a infinite edge dislocation. (b)~(e)The stress distribution of a infinite edge dislocation. Comparison between the exact solution [4] and approximate solution for various segment size. (b) The σ_{xx} component, (c) the σ_{xy} component, (d) the σ_{yy} component and (e) the σ_{zz} component of stress field are shown, respectively.	25
2.5	(a) The geometry of a prismatic dislocation loop. (b) The stress distribution of a prismatic loop. Comparison between the exact analytical solution [?, ?] and approximate solution for various segment size.	26
2.6	Schematic of computation method of contribution from local or none local segment on the same dislocation loop.	27
2.7	(a)The geometry of two adjacent segments. The interaction between them is evaluated using Eqs. 2.8(b)The geometry of a bent dislocation. Some symbols used in 2.8are illustrated graphically.	28
2.8	The geometry of finite-core treatment. The contributions from the two displaced arcs shown as solid lines are evaluated using Eqs. 2.11	30

2.9	(a) The geometry of a prismatic dislocation loop. (b) (c) The line tension of a prismatic loop. Comparison between the exact analytical solution [4,5] and approximate solution by Force Methods for various division number (b), for various segment length(c).	31
2.10	(a) The geometry of a share dislocation loop. (b) (c) (d)(e) The line tension of a share loop. Comparison between the exact analytical solution [6,7] and approximate solution by Force Methods (b) (d) or Differential Stress Methods (c) (e) for various division number. The radius of the loop is 100[nm] for (b)(c), 10[μ m] for (d) (e).	33
2.11	(a) (b) The line tension of a share loop. Comparison between the exact analytical solution [6,7] and approximate solution by Differential Stress Methods for various core-split parameters. (a) is for various core slit range and (b) is for the core split offset δ used in eq.2.11.	34
2.12	The method of computing the image force. Some of the symbols used in eq.(2.15) are shown.	35
2.13	Two interpolation methods against free surface.	36
2.14	Propagation of a misfit dislocation in a strained layer with a free surface on $(1, \bar{1}, 1)$ glide plane with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$	37
2.15	Comparison of propagation of a misfit dislocation (a) considering free surface effect with (b) no free surface.	37
2.16	Comparison of propagation under some conditions. (1),(3) Considering the free surface effect (2)(4) with no effect. (1) and (2) use (a) type interpolation (Fig.2.13), and interpolation (B) for (3)(4)	38
2.17	Computational figures of the growth of loop on the $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$ under applied stress at subsequent equidistant time moments.(a)11.0[GPa] (b)0.1[GPa] (c) 0.05[GPa] resolved share stress is applied. (d) is under stress changing linearly from z axis top 5[GPa] to bottom -5 [GPa]. Dot line show 0[GPa] stress contour line.	41
2.18	Computational figures of the formation of a dipole on the $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$ under applied stress at subsequent equidistant time moments. (a)(b)1.0[GPa] resolved share stress is applied. (a) Two circular share loops (radius 100[nm]) (b) a single straight line with a jog are initially arranged.	42

2.19	(a)Deletion and (b)generation of the nodes on spline-interpolated line to maintain proper segment length.	43
2.20	Remesh methods for computing the long range contribution more effeciently. (a) is default division and (b) is more coarse division for stress calculation.	44
2.21	A flowchar of numerical algorithm for short range interaction.	45
2.22	Schematics of the local rule for the annihilation. Some symbols in eq.2.22are shown.	46
2.23	Simulation of annihilation on $(1, \bar{1}, 1)$ slip plane with Burgers vector $[1, 1, 0]$ under 1[GPa] resolved share stress field. (a)Two circular loops are 40[nm] apart. (b) The pinning points are 40[nm] apart. (b) is operating as a Frank-Read source. Snapshots are plotted by the same number of computational step.	47
2.24	Schematics of the local rule for the junnction formation. Some symbols in eq.2.23are shown.	48
2.25	Simulation of junction formation between two loops under 1[GPa] resolved share stress field. Both are on the same $(1, \bar{1}, 1)$ glide plane. One has Burgers vector $[0, 1, 1]$, the other with Burgers vector $[\bar{1}, 0, 1]$, which are shown with arrows in figure.	49
2.26	Schematics of the cross-slip mechanism [8].	49
2.27	A bow-out double kink model for cross slip [9].	50
2.28	Simulation of cross slip with an initial dislocation on $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $[1, 1, 0]$ under 1[GPa] resolved share stress field. Cross slip happens at the place marked with 4 arrows. Snapshots are plotted by the same number of computational step. (a) 3d view (b) $[\bar{1}, \bar{1}, 0]$ view (c) $[1, \bar{1}, 0]$ view	51
2.29	Schematics of the algorithm of the slip vector.(a) The initial atomic arrangements. (b)The current atomic arrangement. (c)Schematics of the slip vector.	53
2.30	Comparison of motion of the screw dislocation the SW potential with the T3 at 0[[K]] under share stress. (a)The screw dislocation model. Simulation result at 5.4[ps] with the SW(b) and T3(c).	55
2.31	Comparison of motion of the edge dislocation the SW potential with the T3 at 0[[K]] under share stress. (a)The edge dislocation model.Simulation result at 5.4[ps] with the SW(b) and T3(c).	57
3.1	Schematics of SiN thin film pattern and expected dislocation loop configtrations. . . .	59

3.2	Picture of specimen cutting from silicon wafer and SiN thin film pattern ($\times 200$, SEM).	59
3.3	Process of annealing specimen.	60
3.4	Etch pit and TEM image of generated dislocations near the SiN square pad.	60
3.5	Propagation of a dislocation in the CZ wafer under large share stress caused by the SiN thin film. Snapshots are plotted by the same number of computational step with upside view.	61
3.6	(a)(b)(c)(d)Snapshots of simulation result of dislocation configuraton (solid line) (a)(b)in CZ wafer and (c)(d)in FZ wafer from 3D view when only one dislocation generates at the generation point. Resolved share stress iso-contours are plotted in dash line. (e) Comparison of the stationary configuration of the dislocation in CZ wafer with in FZ wafer.	63
3.7	(a)(b)(c)(d)Snapshots of simulation result of dislocation configuraton (solid line) (a)(b)in CZ wafer and (c)(d)in FZ wafer from 3D view when 6 dislocations generate at the generation point. Resolved share stress iso-contours are plotted in dot line. (e) Comparison of the stationary configuration of the dislocations in CZ wafer with in FZ wafer.	64
3.8	Comparison of (a) the simulation result of 6 dislocations in FZ wafer with (b) the TEM image [1].	65
3.9	Time history of (a)the coordination or (b)velocity of the first dislocation. Experiment results and simulation results involving 1, 3 and 6 dislocations are shown . . .	67
4.1	Generation and growth mechanism of dislocations:(a)after implantation (b)during anneal(first stage),(d)during anneal(second stage) (d)during anneal(middle stage) (e)during anneal(final stage) [10].	70
4.2	TEM image of dislocation characteristics during annealing. Annealing condition is (a)10[min],900[]: (b)60[min], 900[] [10].	71
4.3	(a)TEM bright field image. (b)(c)(d)TEM dark field image. (b) $\langle 2, 2, 0 \rangle$ (c) $\langle \bar{2}, 2, 0 \rangle$ (d) $\langle 0, 4, 0 \rangle$	72
4.4	Schematics of unfolding of a intrinsic-type Frank partial. Nucleation and growth of a Shockley partial within a faulted Frank sessile loop.(a)initial state (b)middle stage (c)final stage.	73
4.5	TEM image of PED. (a)cross sectional view (b)plane view.	74

4.6	Schematics of a PED with its slip system.	75
4.7	Extrinsic-type stacking fault projected on $(\bar{1}, 1, 0)$ plane [11].	76
4.8	Bonding pattern in crystal silicon. (a)Perfect crystal; (b)stacking fault	77
4.9	Extrinsic-type stacking fault simulation model. Cross-sectional view of the the stacking fault(two dash lines) is shown.	78
4.10	Snapshots of the simulation result. Atoms which have slipped by the norm of the partials' Burgers vector are shown from 3D view point. (a) $t = 10.8$ [ps]: (b) $t = 15.1$ [ps]:(c) $t = 17.0$ [ps]:(d) $t = 22.4$ [ps]:(e) $t = 24.3$ [ps]	81
4.11	Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector from cross-sectional view (Fig.4.10). (a) $t = 10.8$ [ps]: (b) $t = 15.1$ [ps]:(c) $t = 17.0$ [ps]:(d) $t = 22.4$ [ps]:(e) $t = 24.3$ [ps].	82
4.12	(a)A snapshot of punched-out perfect dislocations at 13.7[ps]. (b) Dependance of the energy per atom on time.	83
4.13	(a)(b)Snapshots of the initial and stationary configuration of the simulation result. Atoms which have slipped by the norm of the partials' Burgers vector are shown from 3D view point. (c) Cross-sectional view of (b).	84
4.14	(a)Time history of the energy per atom for various radius.(b)(c)Snapshots of the initial and stationary configuration of the defect.($r = 3a_0$)	85
4.15	Schematics of the growth of a perfect loop to a PED.	87
4.16	Bright field TEM images [10] corresponding to Fig.4.15.	88
4.17	Image force distribution (green solid arrows) and self-force distribution (red dot arrows) on circular loop with $(1, 1, 1)[1, 1, 0]$ slip system. The loop is 50[nm] from free surface, 1000[nm] from the SiN edge ,and its radius is 45[nm]. (a)3d view (b)top view (c) side view.	89
4.18	Simulation model for computation of the intercation between a stacking fault and a screw dislocation	91
4.19	Snapshots of the simulation result. Not 4-coordinate-numbered atoms are displayed to show the dislocation figure. (a) $t = 4.32$ [ps]:(b) $t = 16.2$ [ps]:(c) $t = 21.6$ [ps]:(d) $t = 22.68$ [ps]: (e) $t = 27.0$ [ps]:(f) $t = 29.16$ [ps]	93
4.20	Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 4.32$ [ps]:(b) $t = 16.2$ [ps]:(c) $t = 21.6$ [ps]:(d) $t = 22.68$ [ps]: (e) $t = 27.0$ [ps]:(f) $t = 29.16$ [ps].	94

4.21	Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 17.82$ [ps];(b) $t = 23.76$ [ps];(c) $t = 25.38$ [ps];(d) $t = 27.00$ [ps]; (e) $t = 29.16$ [ps];(f) $t = 30.78$ [ps]	95
4.22	Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 17.82$ [ps];(b) $t = 23.76$ [ps];(c) $t = 25.38$ [ps];(d) $t = 27.00$ [ps]; (e) $t = 29.16$ [ps];(f) $t = 30.78$ [ps]	96
4.23	Simulation model for computation of the intercation between a stacking fault and a edge dislocation	97
4.24	Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 1.08$ [ps];(b) $t = 12.96$ [ps];(c) $t = 16.2$ [ps];(d) $t = 19.98$ [ps]; (e) $t = 23.76$ [ps];(f) $t = 27.0$ [ps]	99
4.25	Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 1.08$ [ps];(b) $t = 12.96$ [ps];(c) $t = 16.2$ [ps];(d) $t = 19.98$ [ps]; (e) $t = 23.76$ [ps];(f) $t = 27.0$ [ps]	100
4.26	Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 14.04$ [ps];(b) $t = 18.36$ [ps];(c) $t = 19.44$ [ps];(d) $t = 20.52$ [ps]; (e) $t = 22.68$ [ps];(f) $t = 25.38$ [ps]	101
4.27	Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 14.04$ [ps];(b) $t = 18.36$ [ps];(c) $t = 19.44$ [ps];(d) $t = 20.52$ [ps]; (e) $t = 22.68$ [ps];(f) $t = 25.38$ [ps]	102
4.28	Snapshots of plane-view configuration of Pre-PED and EOR dislocation interaction and a corresponding TEM image [10] . (a) $t = 0$ [sec] (b) $t = 0.01$ [sec] (c) TEM image [10]	104
4.29	Snapshots of plane-view configuration of Pre-PED and Pre-PED interaction and a corresponding TEM image [10] . (a) $t = 0$ [sec] (b) $t = 0.01$ [sec] (c) TEM image [10] (d) TEM image [10].	105
4.30	Schematics of line and space pattern.	107
4.31	Plane-view of the schematics of the Line and Space pattern with slip direction . . .	108
4.32	Mises equivalent stress contour of Si substrate.	108
4.33	Resolved share stress contour of Si substrate with $(1, \bar{1}, 1)[1, 1, 0]$ slip system. Solid line shows iso-stress contours with $\text{SiO}_2 0$ [nm] and dot line for $\text{SiO}_2 9$ [nm].	109
4.34	(a)(b)(c)(d)(e)(f) Snapshots of simulated dislocation loop. (a)(c)(e) initial state. (b)(d)(f) stationary configuration.(f) TEM Image of Experiment result [10]	110

4.35	Dependence of the PEDs position from the SiN edge on SiN thickness.	112
4.36	Dependence of the PEDs position from the SiN edge on SiO ₂ thickness.	112
5.1	TEM image of dislocations punched out from precipitate [12].	115
5.2	Schematics of the generation of prismatic loops at a particle [13]. (a)(b) The geometry of the slip planes around BMD. (a)Cross sectional view (b)3D-view. (c) A share loop on the (1, 1, 1) glide plane with the Burgers vector $1/2[1, 0, \bar{1}]$ expands until its screw segments lie parallel to highly stressed cross-slip planes. Repeated cross slip then generates a prismatic loop as shown (b)~(d).	116
5.3	The Geometry of the coordinate to calculate stress field around BMD. Some symbol used in eq.5.1 are shown.	117
5.4	The resolved share stress contour (a)on the (1, 1, 1) plane and (b)on the (1, $\bar{1}$, 1) plane.	119
5.5	Computational figures of the punch out dislocation on the initial glide plane (1, 1, 1) and cross slip plane (1, $\bar{1}$, 1) with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 0, \bar{1}]$ under applied stress caused by the BMD at subsequent equidistant time moments.	120
5.6	The simulated operation of a punched out dislocation with 3d view. The sequence of the operation is shown at various time moments:(a) $t = 0[\mu\text{sec}]$;(b) $t = 12[\mu\text{sec}]$;(c) $t = 87[\mu\text{sec}]$; (d) $t = 128[\mu\text{sec}]$;(e) $t = 174[\mu\text{sec}]$;(f) $t = 195[\mu\text{sec}]$	121
5.7	The simulated operation of a punched out dislocation with upside view. The sequence of the operation is shown at various time moments:(a) $t = 0[\mu\text{sec}]$;(b) $t = 12[\mu\text{sec}]$;(c) $t = 87[\mu\text{sec}]$; (d) $t = 128[\mu\text{sec}]$;(e) $t = 174[\mu\text{sec}]$;(f) $t = 195[\mu\text{sec}]$	122
5.8	Comparison of the simulation result(a) with TEM image(b) [12].	123
5.9	Comparison of the simulation result (a)with cross slip with (b)without cross slip from upside view.	125
5.10	The equilibrium shape of a dislocation loop(solid line) bulging from the interface of a particale with Iso-stress contour line as broken lines.	126
5.11	(a)Time history of the distance from the center of the BMD to the dislocation edge. Simulation result with the cross slip (the solid line) is compared with without the cross slip (dash line).(b) The distance used in (a) is graphically shown.	126
A.1	Atomic configuration of diamond structure.	130
A.2	Schematic diagram of periodic boundary condition.	133
A.3	Schematic diagram of (left) book-keeping method and (right) domain decomposition method.	134

表目次

2.1	Analysis condition for Fig.2.16.	38
2.2	The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.2.30.	56
2.3	The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.2.31.	56
4.1	The region size and the number of the atoms in the simulation cell	77
4.2	The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.4.18.	90
4.3	The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.4.23.	97
4.4	Material constants used in the FEM.	107
A.1	Non dimensional parameter of the silicon.	136

第1章 序論

1.1 研究背景

ノートパソコンやモバイル端末に代表されるような情報通信機器分野における高性能化・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各種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．この傾向を端的に表現している法則にムーアの法則 (Moore's Law) がある．これは，世界最大の半導体メーカー Intel 社の創設者の一人である Gordon Moore 博士が 1965 年に経験則として提唱した「半導体の集積密度は 18～24ヶ月で倍増する」という法則である．実際の集積密度の向上ペースはこれより鈍化しているが「集積密度」を「性能向上」に置き換えて考えると，この法則は現在でも成立しているとされる．Fig. 1.1 に示すグラフは，ITRS (International Technology Road map for Semiconductors [2]) に掲載されている年度毎の DRAM や Flash，MPU (Micro Processing Unit) の機能向上動向を示すものであり，ムーアの法則から導かれる機能向上曲線が併記されている．Fig.1.2 より 2005 年現在においてもムーアの法則の有効性が確認できる．ムーアの法則は，半導体の微細加工技術の発展をその根拠としている．Fig. 1.2 [2] に上記各種デバイスの年代毎の DRAM の最小配線ピッチとゲート長の微細化動向を示す．Fig. 1.2 中の DRAM は，大量生産可能で安価な半導体メモリであり，Leading Edge としてしばしば指標として取り上げられるものであるが，ゲート長は 2004 年の時点ですでに 90nm と 100 nm 以下となり，今後も，3 年周期で 30 % ずつ微細化が進むと予想される．これは 1998 年から 2004 年度までの 2 年周期の微細化からは，多少鈍化するものの 2010 年には更に現在の半分の 45nm に微細化が進むと予想される．

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 [14]．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り，応力起因による膜の剥離や「転位 (dislocation)」と呼ばれる結晶欠陥の発生などの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．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，結晶学的には線欠陥に分類され，塑性変形の原因とし

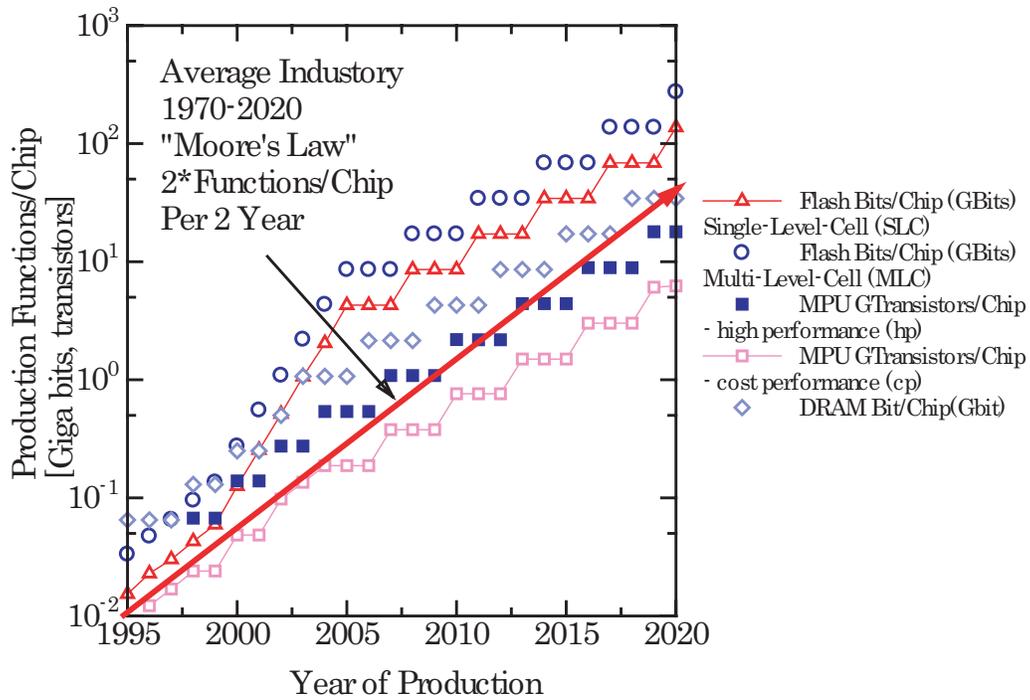


Fig. 1.1 2005 ITRS Product Technology Trends - Function Per Chip [2].

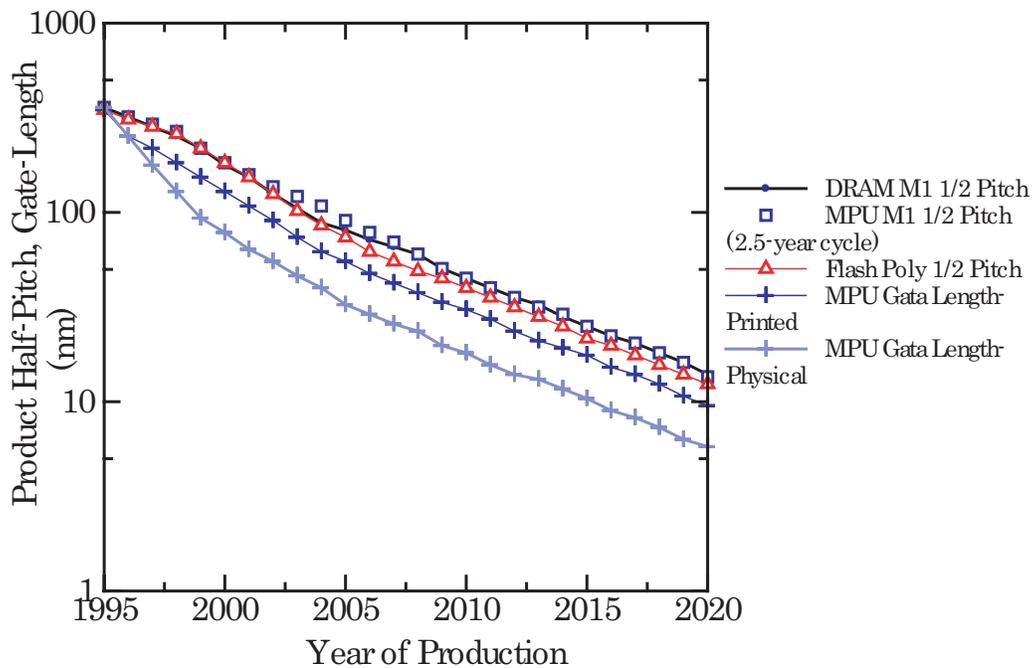


Fig. 1.2 2005 ITRS Product Technology Trends - Half Pitch and Gate Length [2].

て一般に広く知られている．半導体素子として広く用いられる単結晶シリコンウエハ中においては，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 [15]．Fig. 1.3 の左に示すのは DRAM 内部に発生した転位の TEM 画像 [1,16,17]，右は DRAM 構造 [3] 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．元来半導体製造に

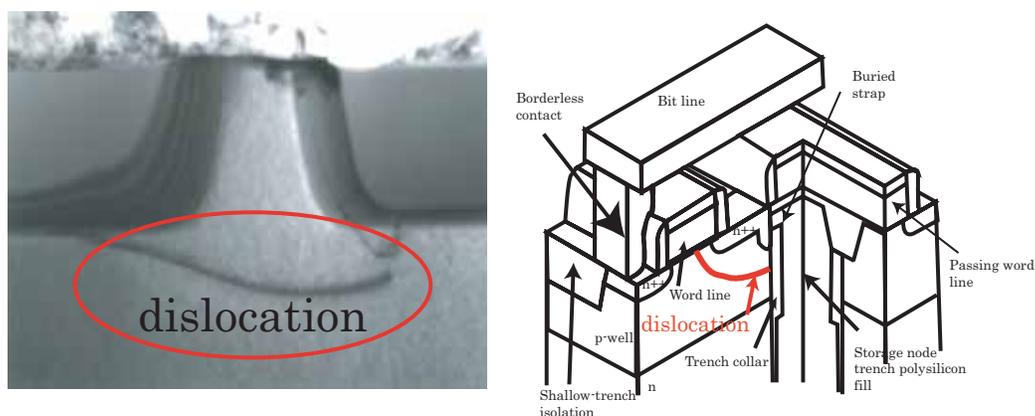


Fig. 1.3 Left figure is TEM micrograph of silicon dislocation [1]. Right figure is DRAM cell diagram [3] and schematic of generated dislocation.

用いら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 [18]，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アニール時の熱応力，あるいは基板特性の改善のために行なわれる不純物のイオンインプランテ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．

金属中の塑性変形が転位運動の結果であることは古くから知られ，エッチピット法 [19] や透過型電子顕微鏡 (Transmission Electron Microscope:TEM) [10,20,21] を用いた実験的観察は多くの転位に関する知見を与えている．これら実験的知見と弾性論に基づく転位論 [4,8,22-24] は，転位の作り出す応力場，運動や相互反応に関する多くの現象を理論的に説明することを可能にした．しかし，転位論により解析的に厳密解を導くことができるのは，比較的単純な転位形状や反応についてのみ [4] であり，複雑な反応下にある転位挙動を解明することはできない．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近年計算機能力の向上に伴い発展し

てきた。転位動力学は、複雑な転位線を複数の単純な線分に分割し、各線分にかかる力を転位論に基づき計算することで転位の動的な挙動をシミュレーションする技法である。転位動力学には、必要とされる精度と計算機コストに応じて様々な手法が考案されている。代表的な手法及びその研究者には、Lattice Methods [25,26] (Kubin, Canova, DeVincre), Force Methods [5,9,27] (Zbib, Hirth, Bulatov, Rhee), Differential Stress Methods [6,28] (Schwartz, Tersoff, LLNL forks), Parametric Dislocation Dynamics [29,30] (Ghoniem, Sun, Huang), Phase Field Methods [31,32] (Khatchaturian, Wang) らが挙げられる。題材も金属の塑性変形 [33], 照射脆化 [34] や半導体の強度評価 [35] など多岐に渡るシミュレーションが行なわれ各分野において注目を集めている。これらの研究では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から, 比較的少数の転位の形状や発生条件, 応力場やエネルギー場の評価を行なうもの様々なシミュレーションが存在する。

しかしこうした転位動力学法は、連続体の仮定による転位論に基づくものであり、転位芯から数原子離れた弾性場の計算を行なうことは、可能であるが、転位の発生や相互作用の影響を直接扱うことはできずローカルルール [9] として持ち込むことで取り扱っている。ローカルルールの作成には、転位についての仮定を必要とせずに原子間のポテンシャルのみを仮定して計算することが可能であるため、分子動力学法が用いられる [36]。分子動力学法は、このように転位に関する多くの知見を与えてくれるもの、現実的な現象を扱うためには大多数の原子を必要とするため、現在の最速の計算機を用いたとしても時間的、空間的に不可能である。よって着目する現象にあわせて適宜解析手法を選択することが必要不可欠である。

今回取り扱う現象は前述したようにシリコンウエハの転位現象である。そこで転位運動に扱うに際しては、転位動力学法を用い、転位発生現象については、連続体仮定の成立するスケールにおいては転位動力学を、それ以下のスケールでは分子動力学を用いそれぞれの長所を生かして解析を行なう。

1.2 研究目的

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．よって停留位置における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，従来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は可能であるため，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．また半導体製造プロセス改善のより一層の効率化のために，転位の発生・運動を予測・制御，あるいは支援可能なシミュレーターの必要性が高まっている．

ここで今研究では，半導体中の転位挙動を調べることが目的である．この研究に先立ち三宅ら [1,16,17] により半導体素子における転位運動において Differential Stress Methods による転位動力学解析結果は，実験とよい一致をみることを示した．今研究では転位運動の再現においてはシミュレータを拡張することでより時間的・空間的スケールを実験系に近づけ，複雑な転位形状の運動の再現を目的とする．また転位発生現象については前述したように転位動力学法では扱えないため分子動力学を用いてその考察を行なう．

1.3 本論文の構成

本論文は，本章を含め，全 7 章から構成される．以下に各章の概要を示す．第 1 章では，序論として本論文の背景と目的と述べる．

第 2 章では，本論文で用いた転位動力学法，分子動力学法の主な計算アルゴリズムについて述べた後，その精度についての検証を行なう．

第 3 章では，本研究で作成した転位動力学シミュレーターの適応事例として，シリコン基板上の窒化膜真性応力起因の転位運動の実験 [1] に対する追加解析を行なう．

第 4 章では，第 3 章同様の適用事例としてイオンインプラント起因の転位発生実験 [10] における転位運動に対する転位動力学解析を行なう．前半ではイオンインプラント起因の転位発生の原因として考えられている格子間シリコンが凝集されることによって形成されるフランク部分転位 (Frank Partial) の unfaulting について分子動力学を用いて検討を行なう．併せて刃状転位・らせん転位とフランク部分転位の相互作用についても考察を行なう．後半では転位動力学を用いて窒化膜厚や酸化膜厚が転位運動に及ぼす影響について考察する．併せてアニール中における基板中の転位反応の可能性について言及する．

続く第 5 章では転位発生について転位転位動力学を用いて検討を行なう．基板中の酸素析出物 (Bulk Module Defect : BMD) 起因の応力場により射出されるパンチアウト転位の発生メカニズムを転位動力学を用いて再現する．パンチアウト転位は交差滑り (Cross slip) を起こすことで形成されるため，交差滑りの有無における反応の変化を検討する．

第 6 章では，本論文で得られた結果を総括し，今後の展望について述べる．

本論文の構成を Fig.1.4 に示す．

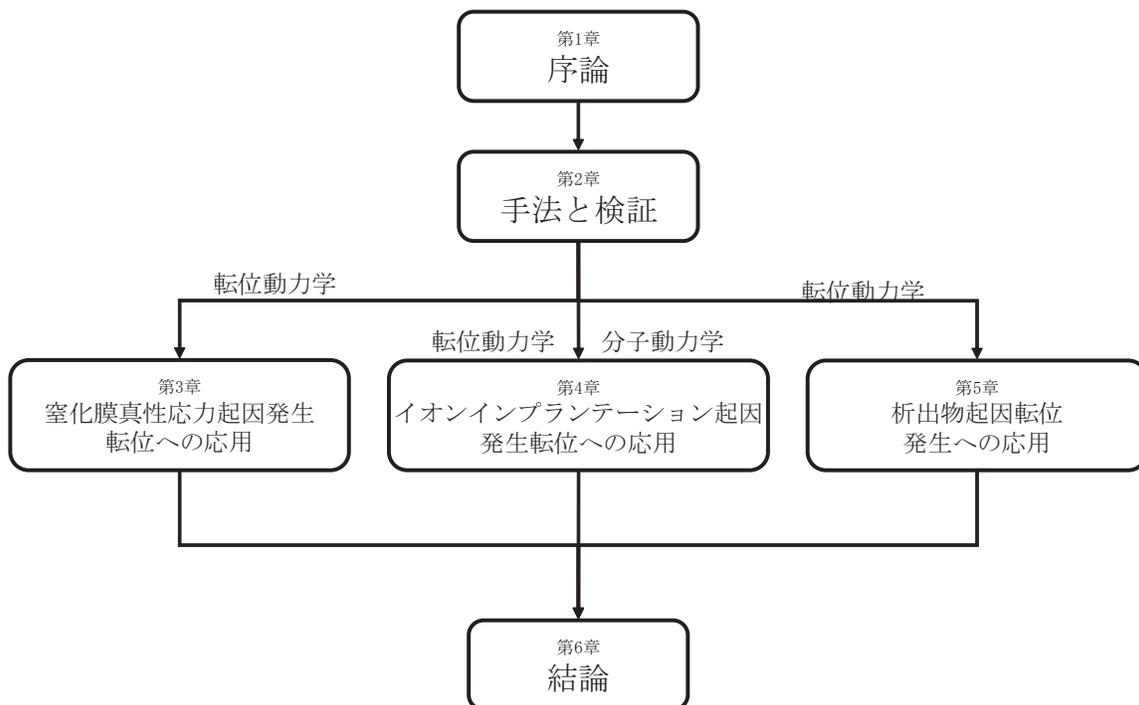


Fig. 1.4 Flowchart of the thesis.

第2章 手法と検証

2.1 緒言

今研究では、転位動力学法 (Dislocation Dynamics: DD) と分子動力学法 (Molecular Dynamics :MD) を数値計算手法として使用した。そこで本章では、使用した計算アルゴリズムについての簡略な説明と、計算精度についての考察を行なう。離散転位動力学 (Discrete Dislocation Dynamics:DDD) については、今研究では有限要素法 (Finite Element Method:FEM) 解析コードから出力される応力解析結果との連携を意識した半汎用的なシミュレータを作成した。ここでは特に転位の数値計算精度に影響する箇所、及びその数値精度について述べるにとどめる。分子動力学法についてはその枠組みはすでに完成しているため、今論文で用いた分子動力学法基本的アルゴリズムの紹介は、文献からの引用 [37] として付章に記述するにとどめる。本章では特に転位を表現するためのポテンシャルに対する検討と転位を可視化するために用いた技法について、簡潔に記述する。

2.2 転位動力学法

離散転位動力学において、転位ループを複数の素片に分割し、各線分にかかる力を計算し位置更新を随時行なうことで、転位の運動のシミュレーションを行なう。Lattice Methods(:LM) [25,26] においては領域を格子に分割し、格子に含まれる転位素片をらせん成分と刃状成分に成分分割をし、その寄与を計算することで転位に作用する応力場を計算する。長所として応力計算のアルゴリズムが単純であること、格子単位で転位を空間的に離散化するため転位的位置関係の把握が単純であることが挙げられる。転位の存在する空間全てを格子で分割するため、解析領域が広がると計算コストが飛躍的に増大すること、成分分解して転位論に基づいた各成分の理論解を用いて応力計算を行なうため計算精度が低いこと、格子を用いて表現しているため複雑な転位形状を取り扱うことが困難なことが挙げられる。

Parametric Dislocation Dynamics (:PDD) [29, 30] は転位ループを複数のスプライン曲線で分割して近似し、転位に作用する応力場を数値積分を用いて計算する。この手法の利点としては、Fast-sum Method を用いて各素片からの寄与を計算するため、直線近似を行ない転位論を用いて計算する場合に比べてより高度な数学的処理がよりに行なわれているため数値計算

のコストを下げるができること、スプライン補間を用い積分点で応力評価を行なうため、素片をつなぐ節点が特異点になるという問題を回避することが可能であり、転位ループ分割に制限がないという利点がある。一方で数学的処理が多い分実装が複雑となり高い数値精度が期待できる半面数値的安定性が下がること、線分の取り扱いがスプライン曲線を基本としているため各線分間の空間的位置の把握が難しいということが欠点として挙げられる。

本論文では Fig.2.1 にあるように転位を直線線分近似して離散化を行なう。利点としては定式化が比較的簡単であり実装も比較的容易であること、数値的安定性も期待できること、数値精度も素片数を適当に管理することで期待できること、直線近似のためループの空間配置の把握も比較的容易であることが挙げられる。その反面 PDD に比べて、計算コストが大きい、素片サイズ管理が煩雑であるという問題点も存在する。直線近似手法には隣接素片からの寄与の評価法が異なる 2 つの評価法が存在する。Force Methods [5,9] は隣接素片を折れ線転位として近似し、転位論を用いて作用する力の計算を行なう。この手法では、節点そのまま特異点になってしまうため、素片分割が転位芯オーダーに近づくると発散するという問題点が存在する。しかし素片が転位芯に比べて十分に大きい場合には適当な分割数管理をすることで比較的よい精度や数値的な安定性を持つ。Differential Stress Methods [6,28] は隣接素片の影響をコアスプリット及びブラウンの手法から導かれる曲率近似を用いて発散なく評価することが可能である。ただしその高精度の反面前述の Force Method に比べて近似が複雑なため数値的な安定性に劣ることがある。よって今論文では上記 2 つの手法を問題により使い分け解析を行なう。すなわち転位発生近傍の素片サイズが細かく精密な解析を必要とする領域では Differential Stress Methods を、転位の成長停止段階では Force Methods を使用する。計算アルゴリズムの大部分は文献 [5,6,9] によっている。

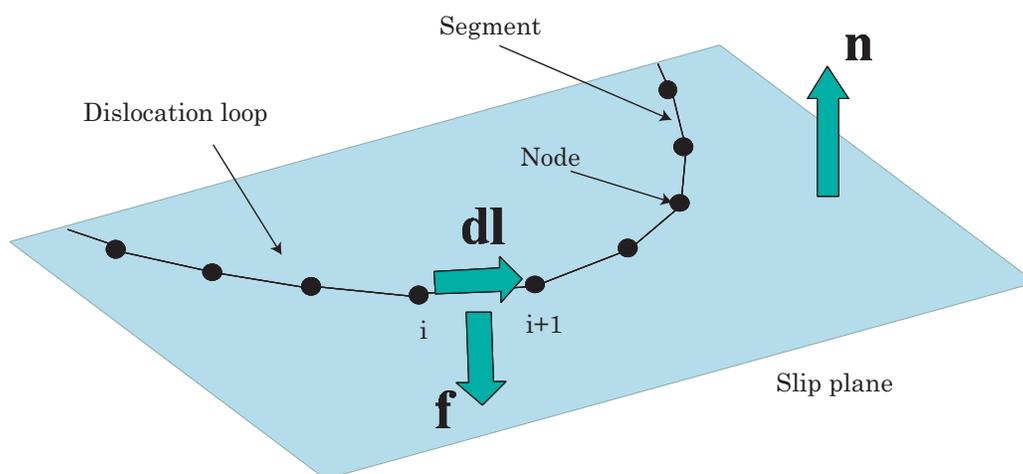


Fig. 2.1 Schematics of straight line approximation. Dislocation loops are divided into some straight lines and nodes.

2.2.1 転位に作用する力

転位に作用する力としては、3次元シミュレーションに取り入れる必要があると考えられるのは、外力、転位の相互作用力、自己張力、パイエルス力、障害力、鏡像力、浸透力、フォノン抵抗、電子抵抗、慣性力、交差滑り抵抗、熱的抵抗が考えられる [38]。ただし今論文では題材が単結晶シリコンであるため、実際問題として考える必要があるのは、外力、相互作用力、自己張力、パイエルス力、鏡像力であると考えられる。このうちパイエルス力は、転位の停止位置を議論する際に重要になると考えられるが、シミュレーション温度が900と高温であること、ダブルキンクを形成して運動を継続する効果は駆動力 → 速度変換式で実験式 [39] を取り込むことで間接的に評価できることから明示的に考慮していない。また相互作用力と自己張力は、転位を素片分割して考えることで隣接素片以外は同一の評価が可能である。よって今節では外力、素片間の相互作用力、鏡像力の評価法について記述する。

2.2.2 外力の評価

本論文では、真性応力や熱応力のような外力は有限要素法を用いて評価されるので、応力の形式で与えられる。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 [40] から求めることができる。

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

$$f_k = -\epsilon_{ijk} dl_i \sigma_{jl} b_l$$

ここで \mathbf{f} 、 \mathbf{b} はそれぞれ、作用する力及びバーガースベクトルである。式 2.2 の上式は作用力をベクトル表記したもの、下式は成分表記したもので ϵ_{ijk} はパーミュテーションテンソルである。

2.2.3 転位間相互作用の評価

今節では転位同士の相互作用の算出方法について説明する。前述したように転位の相互作用力と自己張力は、素片分割することで同一の扱いが可能である。しかし、素片間にはおよそ距離の逆数に比例する力が働くため着目している素片周囲の素片からの力を考慮する際には、数値計算上の安定性を得るためにコアスプリット [6] を用いる。また着目している素片の隣接素片については、上記の直線素片同士の相互作用を理論解を用いて取り扱うと無限大になり発散してしまうので別と考慮する必要がある。本論文では、問題と求められる精度と数値安定性に応じて、Force Methods [5, 9] と Differential Stress Methods [6, 28] 2つの手法を使

い分ける．以上まとめると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

以下に各手法と精度について順に記述する．

遠距離素片相互作用の定式化

等方完全弾性体において直線線分素片が作り出す応力場は転位論を用いて計算可能である [4]．しかし，Hirth ら [4] の記述は座標変換を伴い煩雑であるため，Schwarz ら [6] が数値計算に適した形に展開したものを利用する．

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}=P} = \sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}'=B} - \sigma_{ij}(\mathbf{r})_{\mathbf{r}'=A} \quad (2.2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = & -(1-\nu)[(\mathbf{b} \times \mathbf{F})_i s_j + (\mathbf{b} \times \mathbf{F})_j s_i] + (\mathbf{b} \times \mathbf{s})_\gamma (\delta_{i\gamma} F_j + \delta_{j\gamma} F_i) \\ & + G \left[\delta_{ij} s^2 + s_0 i s_0 j \left(\frac{s^2}{R^2} + \frac{2s^2}{s_0^2} \right) - (s_i s_0 j + s_j s_0 i) \frac{s_0^2}{R^2} + s_i s_j \left(1 - \frac{s_0^2}{R^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.3)$$

ここで各パラメーターは $\sigma_0 = \mu/4\pi(1-\nu)$, $\mathbf{F} = (\mathbf{s}_0 s^2 - s_0^2 \mathbf{s})/s^2 s_0^2 R$, $G = (\mathbf{s} \times \mathbf{b})_\gamma s_0 \gamma / s^2 s_0^2 R$ である．また μ は縦弾性係数であり， ν はポアソン比とした．ベクトル \mathbf{s} , \mathbf{s}_0 , \mathbf{R} の幾何関係は Fig.2.2 に示すとおりである．ここで求められる値は応力であるが，素片にかかる力に変換する際に前述のピーチ・ケラーの式 2.2 を用いる．

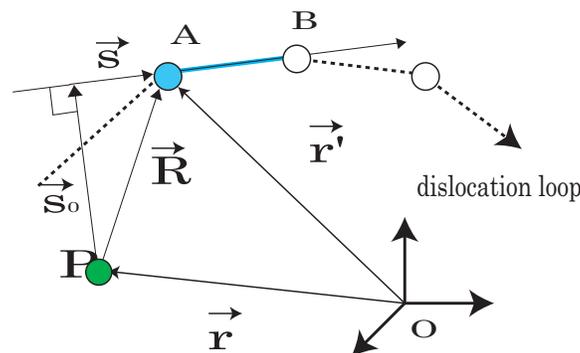


Fig. 2.2 Geometry for computing the stress field about a straight segment of dislocation.

遠距離素片相互作用の精度評価

今節では、前節で記述した遠距離相互作用からの寄与を転位論で厳密解を求めることが可能な単純な形状の転位ループに対して適用し、比較を行なう。

Fig. 2.3(a) にあるような無限らせん転位を仮定しライン l 上の応力の非ゼロ成分と厳密解 [4] を比較した。なおこの場合の厳密解は

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2+y^2} \\ 0 & 0 & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2+y^2} \\ -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2+y^2} & \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2+y^2} & 0 \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

であり、ここで物性値に依存する値は規格化してグラフ Fig.2.3(b)~(c) に表示した。なお l は $y = 1.0$ とし、転位の長さはこれに対して十分長い 100.0[nm] とする。縦軸に応力 σ_{xz} 成分 (b)、 σ_{yz} 成分 (c) を、横軸にライン l 上の x 座標値をプロットした。分割数を 6 から 30 まで変化させたが、結果は転位線長さが無限という近似が成り立つ $-10 \leq x \leq 10$ の範囲内でいずれも誤差 2% 以内と厳密解とほぼ完全に一致した。

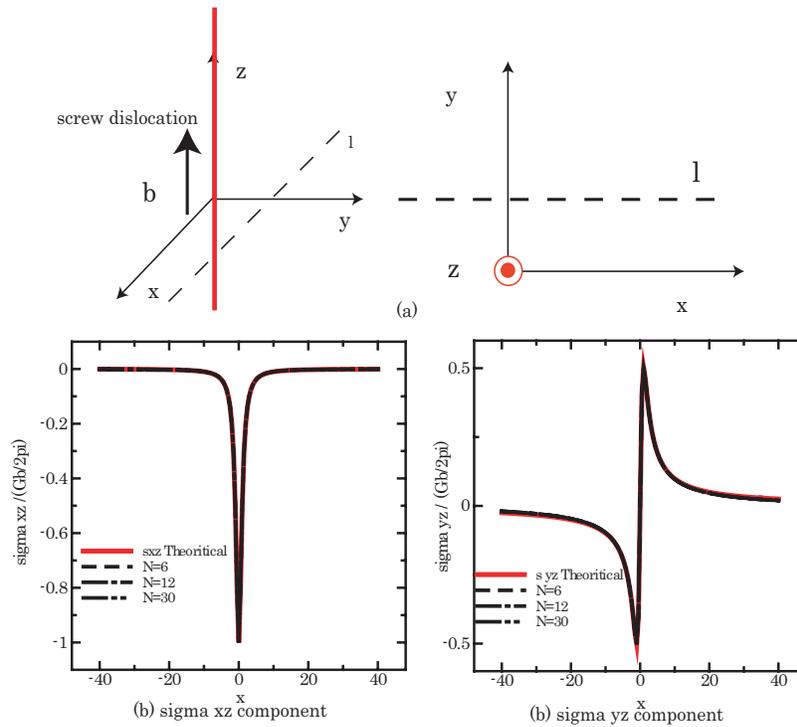


Fig. 2.3 (a) The geometry of a infinite screw dislocation. (b) (c)The stress distribution of a infinite screw dislocation. Comparison between the exact solution [4] and approximate solution for various segment size. (b) The σ_{xz} component and (c) the σ_{yz} component are shown, respectively.

続いて Fig. 2.4(a) にあるような無限刃状転位を仮定しライン l 上の応力の非ゼロ成分と厳密解 [4] を比較した．なおこの場合の厳密解は

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(3x^2+y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{x(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} \frac{y(x^2-y^2)}{(x^2+y^2)^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mu b \nu}{\pi(1-\nu)} \frac{y}{x^2+y^2} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

であり，物性値に依存する値は規格化してグラフ Fig.2.3(b)~(e) に表示した．なお l は $y = 1.0$ とし，転位の長さはこれに対して十分長い $100.0[\text{nm}]$ とした．縦軸に応力 σ_{xx} 成分 (b), σ_{xy} 成分 (c), σ_{yy} 成分 (d), σ_{zz} 成分 (e) を，横軸にライン l 上の x 座標値をプロットした．分割数を 6 から 30 まで変化させたが，結果らせん転位同様に $-10 \leq x \leq 10$ の範囲内でいずれも誤差 2%以内と厳密解とほぼ完全に一致した．

以上までは対象を無限直線転位としたため，直線線分近似であっても高い精度が期待できる．そこで最後に円形状ループが作り出す応力場と数値計算解を比較した．対象とする円ループは Fig. 2.5(a) にあるようなプリズマティックループであり，そのバーガースベクトルはすべり面に直交している．今回は文献 [41,42] で厳密解が導かれているライン l 上の応力のうち σ_{zz} 成分を比較する．なおこの場合の厳密解は，

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} &= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)} [C_1 \mathbf{E}(k) + C_2 \mathbf{K}(k)] \\ C_1 &= \frac{(a^2 - b^2)(a - 2R^2) + p^2(a^2 + 3b^2) - 8ap^2R^2}{(a-b)^2(a+b)^{3/2}} \\ C_2 &= \frac{-[(a^2 - b^2) + p^2(a - 2R^2)]}{(a-b)(a+b)^{3/2}} \end{aligned} \quad (2.6)$$

$$(2.7)$$

ここで $\rho = (x+y)^{1/2}$, $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$, $a = r^2 + R^2$, $b = 2\rho R$, $k = \left(\frac{2b}{a+b}\right)^{1/2}$ であり， $\mathbf{E}(k)$, $\mathbf{K}(k)$ はそれぞれ第 1 種楕円関数，第 2 種楕円関数である．今回半径は $100[\text{nm}]$ とし比較を行なった．Fig. 2.5(b) に比較結果を示す．縦軸に応力の σ_{zz} 成分を横軸にライン l 上の x 座標位置をプロットした．なお物性値に関する係数は規格化し，距離はループ半径で無次元化する．分割数を 6 としたのものには平均して 10~20%の誤差が存在した．しかし分割数が増え近似形状が，円に近づくにつれ誤差は減少し，分割数 12 では 10%以下，分割数 30 以上ではほぼ 1%程度と非常によい一致をみた．

以上の結果により遠距離相互作用力については対象とするループの幾何形状を充分再現可能な程度に細かく分割することで誤差を減らし必要な精度を確保可能であることを示した．

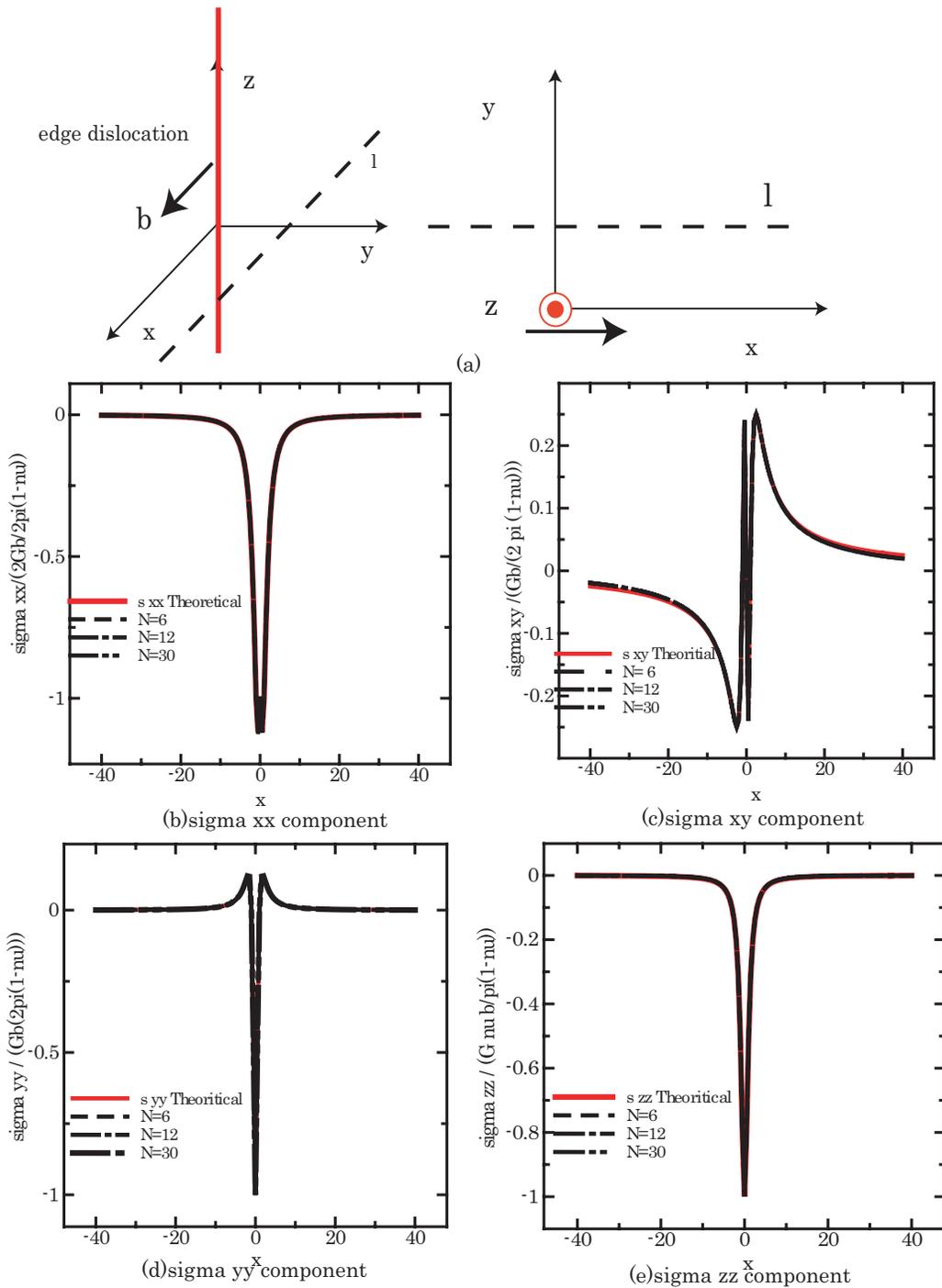


Fig. 2.4 (a) The geometry of a infinite edge dislocation. (b)~(e)The stress distribution of a infinite edge dislocation. Comparison between the exact solution [4] and approximate solution for various segment size. (b) The σ_{xx} component, (c) the σ_{xy} component, (d) the σ_{yy} component and (e) the σ_{zz} component of stress field are shown, respectively.

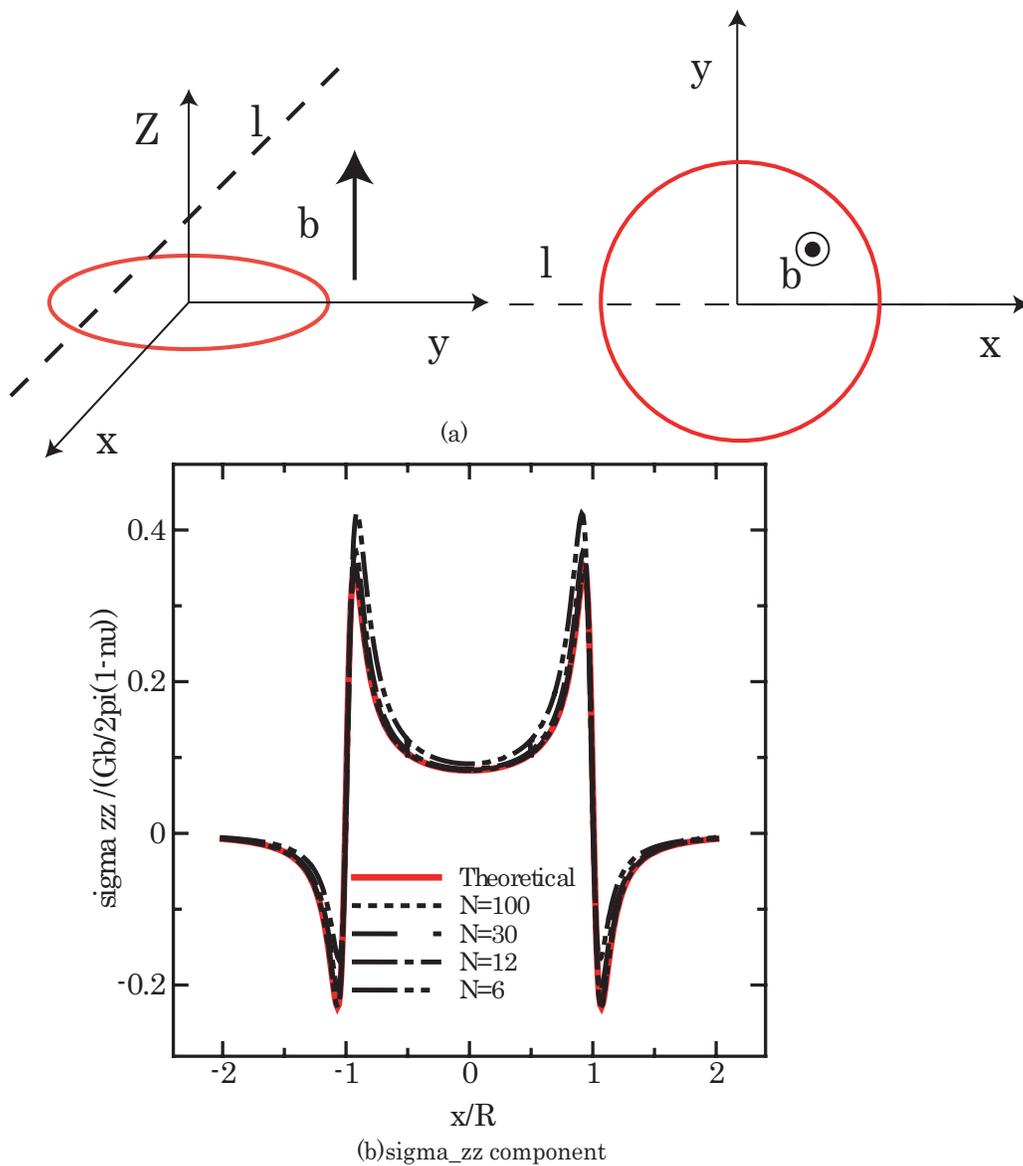


Fig. 2.5 (a) The geometry of a prismatic dislocation loop. (b) The stress distribution of a prismatic loop. Comparison between the exact analytical solution [?, ?] and approximate solution for various segment size.

近距離素片相互作用

素片が同一のループ上にある場合にも，相互の素片間が離れている場合には上と全く同様の扱いが可能である．一例とすれば，Fig. 2.6 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 s_0 が微小となり，式 (2.3) 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．よってこれを回避するための数値計算上の技巧 [6] を次に述べる．

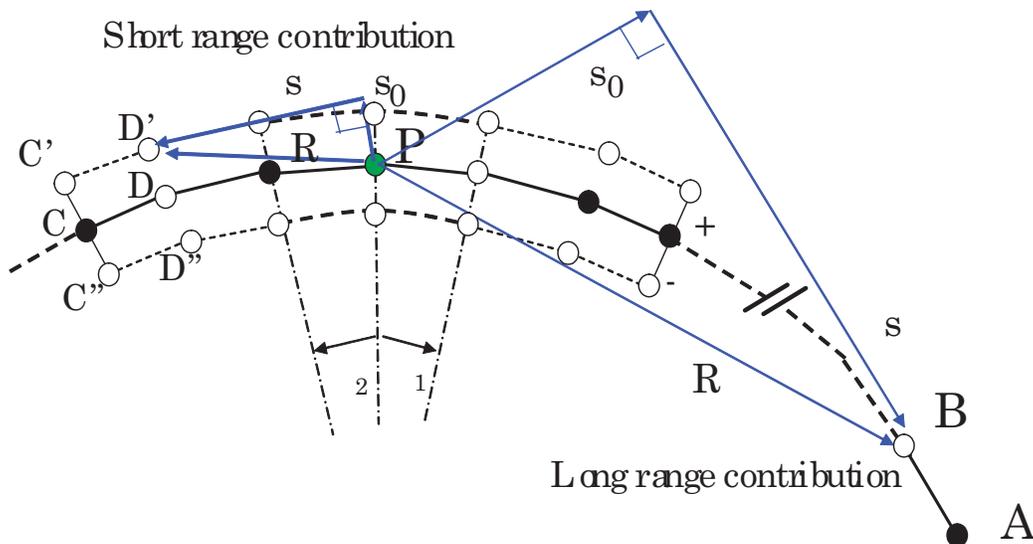


Fig. 2.6 Schematic of computation method of contribution from local or none local segment on the same dislocation loop.

Fig.2.6 上の節点 P 点における転位素片 CD からの寄与を考える．このとき遠距離相互作用と同じ手法を用いてしまうと， P に近い素片であればあるほど，対数的な発散を引き起こし数値的な不安定を引き起こす．そこで，存在する位置からある幅 δ だけすべり面上転位線を仮想的にずらし（素片 $CD \rightarrow$ 素片 $C'D', C''D''$ ），その分割された2素片からの相互作用の平均を取ることによって素片 CD からの相互作用とみなす．分割された素片からの寄与の計算法は上記の遠距離素片からの寄与の計算法と同様である．この手法をコアスプリットと呼ぶ [6]．

隣接素片相互作用の定式化

Fig.2.6 にあるように着目する素片に隣接する素片に対してはベクトル R, s, s_0 が0となってしまう，発散してしまう．ここではこの問題を回避するための2つの手法を順次述べる．

Force Methods [5] Zbib ら [5] によって定式化された Force Methods は, Fig.2.7(a) にあるように転位論を用いて計算される半無限無限折れ線転位の応力場 [4] から重ね合わせの原理より半無限部分を遠距離相互作用により計算して除くことで隣接素片間に作用する力を計算する. Fig.2.7(b) に F_s, F_n, θ の位置関係を図示する.

$$F_{core} = F_{bent} - F_{longrange}$$

$$F_{bent} = F_s + F_n$$

$$F_s = \frac{\mu}{4\pi L} f_1(\theta, b) \ln\left(\frac{L}{z_0}\right) \quad (2.8)$$

$$F_n = \frac{\mu}{4\pi L(1-\nu)} f_2(\theta, b) \ln\left(\frac{L}{z_0}\right) \quad (2.9)$$

$$f_1 = b_s^2 \left(\frac{\cos\theta - 1}{\sin\theta} - \frac{\nu \sin\theta \cos\theta}{1-\nu} \right) + b_s b_e \frac{2\nu \sin^2\theta}{1-\nu} + b_e^2 \frac{\cos\theta - 1 + \nu \sin^2\theta \cos\theta}{(1-\nu)\sin\theta} + b_n^2 \frac{\cos\theta - 1}{(1-\nu)\sin\theta}$$

$$f_2 = b_n b_s (1+\nu)(1-\cos\theta) + b_n b_e \left[\frac{-(1-\cos\theta)^2}{\sin\theta} + \nu \sin\theta \right]$$

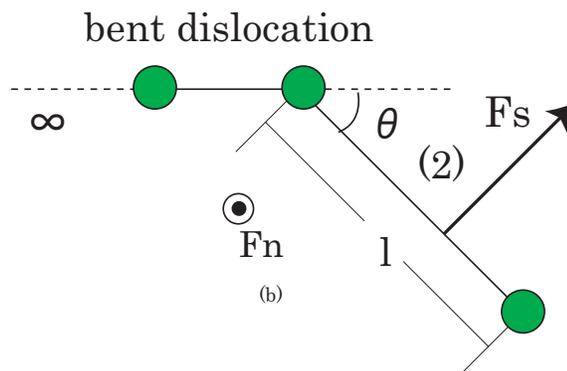
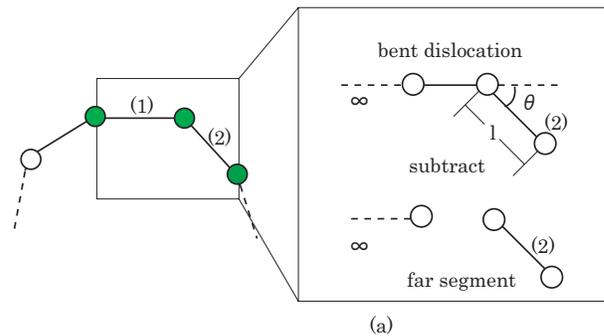


Fig. 2.7 (a)The geometry of two adjacent segments. The interaction between them is evaluated using Eqs. 2.8 (b)The geometry of a bent dislocation. Some symbols used in 2.8 are illustrated graphically.

ここで式中の b_s, b_e はそれぞれバーガスベクトルのらせん成分ならびに刃状成分である。また z_0 は転位芯カットオフパラメータである。つまりバーガスベクトルは、転位間の反応が生じない場合には常に一定であるので、式 2.8 に表されているように、変数は2つの転位素片のなす角 θ に依存する。この近似の特徴として後述する Differential Stress Methods の式 2.11 に比べて単純であり、数値的な安定性が高い反面、式の中に \ln が入っていることから明らかなように素片分割が細かくなり転位芯オーダーに近づくと値が発散する。

Differential Stress Methods [6] Schwarz ら [6] によって定式化された Differential Stress Methods は、転位ループ上のある点における応力場を曲率で近似するブラウンの式 [43](Brown formula) を用いて隣接素片の評価を行なう。すなわち、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。隣接節点からの影響は以下の式で表される [6]。

$$\sigma_{\text{core}} = \frac{\sigma_{ij}(\phi_2, +\delta) + \sigma_{ij}(\phi_2, -\delta)}{2} - \frac{\sigma_{ij}(\phi_1, +\delta) + \sigma_{ij}(\phi_1, -\delta)}{2} \quad (2.10)$$

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = [D1(s_{3i}s_{1j} + s_{3j}s_{1i}) + D2(s_{3i}s_{2j} + s_{3j}s_{2i})] \quad (2.11)$$

$$D1 = (1 - \nu)b_1\delta I_0 - \nu b_2\rho I_1 + \frac{1}{2}b_1[(1 + \nu)\rho - (1 - \nu)\delta]I_2 \\ - \frac{3\nu}{2}b_2\rho I_3 - \frac{b_1}{24}[(1 + 7\nu)\rho - (1 - \nu)\delta]I_4$$

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

ここで $\sigma_0 = \mu/4\pi(1 - \nu)$ 、また \mathbf{s}_1 は節点における単位接線ベクトル、 \mathbf{s}_2 は曲率半径方向の単位ベクトル、 $\mathbf{s}_3 = \mathbf{s}_1 \times \mathbf{s}_2$ であり節点における局所座標系を表す。また $b_1 = \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}_1$ 、 $b_2 = \mathbf{b} \cdot \mathbf{s}_2$ 、 $\rho = R_c + \delta$ 、 $I_0 = f\phi/as$ 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 (角度)、 δ (曲率) の関数となっている。式 2.11 で表されるようにこの式で求められるのは応力値であるため、ピーチケラーの式 2.2 を用いて力に変換する。この近似の特徴としてパラメータとして ϕ, δ などの角度と曲率による近似法であり、転位素片長さに依存しない解析を行なうことができ、非常に高い精度で張力を近似することが可能である。ただし前述の Force Methods [5] に比べ近似式中のパラメータが多く、近似式自体も複雑であるため、数値的な安定性が低い。

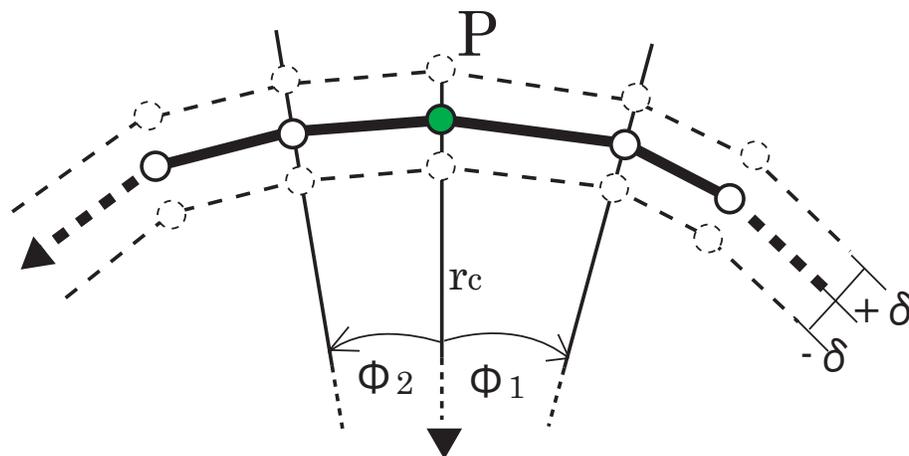


Fig. 2.8 The geometry of finite-core treatment. The contributions from the two displaced arcs shown as solid lines are evaluated using Eqs. 2.11

ハイブリット法 Force Methods [5], Differential Stress Methods [6] の2手法にはそれぞれ長所・短所が存在するため今論文で開発したシミュレータでは、両手法をハイブリットした。すなわち、平均素片長 l が L_{lower} , L_{upper} の間で線形補完することで L_{lower} 以下の転位発生近辺の現象は Differential Stress Methods を用い精密に形状の影響を見積もり、 L_{upper} 以上の転位の成長段階では Force Methods を用い時間刻みを大きくとることで高速に解析を行なう。

$$f_{core} = s f_{Schwarz} + (1 - s) f_{Zbib}$$

$$s = \begin{cases} 1.0 & l < L_{lower} \\ \frac{L_{upper} - l}{L_{upper} - L_{lower}} & L_{lower} \leq l \leq L_{upper} \\ 0.0 & L_{upper} < l \end{cases} \quad (2.12)$$

張力の精度検証

前項までに示した遠距離・近接・隣接相互寄与を全て用いて計算可能となる転位ループの張力についての精度検証を行なう。すなわち、転位論を用いて解析的に計算可能な単純円ループの張力と数値解析結果を比較する。Fig.2.9(a) に解析モデルを示す。すべり面に垂直なバーガスベクトルを持つ円ループとの比較である。転位論から導かれるこの場合の厳密解は次のようになる [4, 5]

$$\frac{F}{L} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)r} \ln \frac{8a}{z_0} \quad (2.13)$$

ここで右辺は単位長さあたりの張力である．また r は円ループの半径， z_0 は転位芯半径であり，今回は $5b$ として計算した．物理量が含まれる係数項はすべて規格化した．またこの例のようにバーガスベクトルが滑り面に直交するモデルでは Differential Stress Methods では式 2.11 から分かるようにその値が 0 になるために比較不能である．このため Force Methods を用いて厳密解と比較を行なう．結果を Fig.2.9 (b) (c) に示す．各グラフは，張力を縦軸に横軸に半径をプロットする．(b) ではループの分割数，(c) では素片の長さを変化させる (b) では分割数を 6~500 まで変化させた．分割数が 200，対応する素片長にすると $3b$ 程度までは誤差が 1~10% と比較的よく一致している．なおこの間においては素片を細かくすればするほど近似形状がより円に近づくので精度が上がる．それ以下ではやはり節点が特異点になるので値は発散する．(c) では素片の長さをパラメータにしているのによりこの傾向が顕著に現れている．従って Force Methods においては，分割がある程度粗い場合でも適当な精度は保障されるが，転位芯の影響が現われない適切な範囲においては，分割が細かい方が精度は上がる．しかし転位芯のスケールまで分割が細かくなると発散してしまうことが分かる．

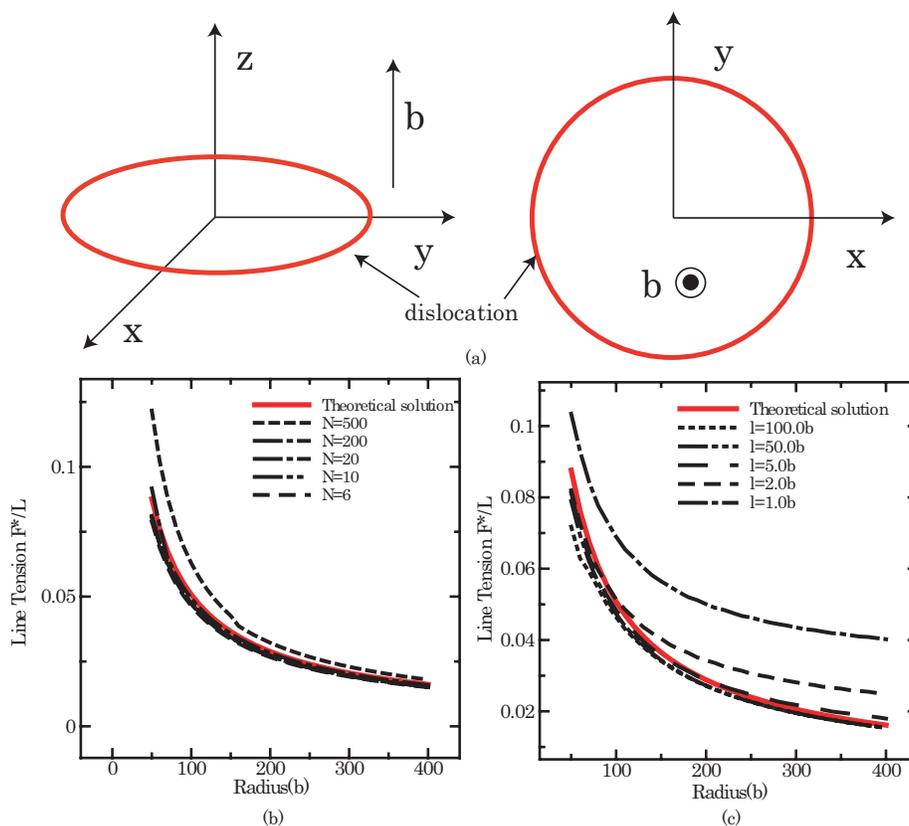


Fig. 2.9 (a) The geometry of a prismatic dislocation loop. (b) (c) The line tension of a prismatic loop. Comparison between the exact analytical solution [4, 5] and approximate solution by Force Methods for various division number (b), for various segment length(c).

続けてシェアーループに対する理論解との比較を行なう．Fig.2.10(a) に解析モデルとパラメータを示す．すべり面に平行なバーガスベクトルを持つ円ループの厳密解との比較である．便宜上，バーガスベクトルの方向を x 軸にとり，円ループ上の任意の位置 P の x 軸となす角を θ とする．転位論から導かれる張力の厳密解は次のようなものである [6, 7]

$$F(\theta) = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)r} \left((1-2\nu+3\nu\sin^2\theta) \ln \frac{4r}{z_0} + 4\nu\cos 2\theta \right) \quad (2.14)$$

ここで右辺 $F(\theta)$ 張力の絶対値である．また r は円ループの半径， z_0 は転位芯半径であり，今回は $\frac{1}{2}b$ として計算した．力は μb^2 で無次元化を行なった．またポアソン比 ν をここでは仮にシリコンの物性値である 0.28 とする．また半径はそれぞれ 100[nm] と 10[μ m] として，Differential Stress Methods 及び Force Methods を用いた数値解析解と厳密解と比較を行なう．結果を Fig.2.10(b)(c)(d)(e) に示す．各グラフは，張力を縦軸に横軸に θ をプロットする．(b)(c) は半径を 100[nm] とした場合の Differential Stress Methods 及び Force Methods の厳密解の比較であり，ループ分割数を 10~80 まで変化させた．両手法とも分割数を 10 とした場合には，ループの円形状を上手く近似できず Differential Stress Methods では 25%，Force Methods においては 35% 程度の誤差が存在した．しかしいずれの手法についても分割数が増え近似精度が上がるにつれ，値は収束した．Differential Stress Methods では分割数 20 で 5% 程度，分割数 40 以上ではほぼ 1% 以下となりほぼ一致した．Force Methods では収束値と若干厳密解との間に誤差が存在するものの 10% 程度はなれた値で収束した．(d)(e) は半径を 10[μ m] とした場合の同様の比較である．分割数は 10~160 まで変化させる．(d)(e) と傾向としてほぼ同様の結果が得られた．精度については Differential Stress Methods においては分割数を 160 とした時に厳密解の誤差は 0.6% まで減少した．Force Methods においても収束値と 10% 以下に減少した．Differential Stress Methods と Force Methods の解の収束値の間に差は存在するもの，その差は 10% 程度であり，近似手法の自体の精度として 5~10% 程度の誤差は存在する可能性があるため計算結果は妥当であると考えられる．この問題に対しては Differential Stress Methods の方が厳密解との誤差が少なく精密な手法であるといえる．

結論として実際の解析を行う際には幾何形状の近似が成立する程度にループを分割することで数値計算による張力の誤差をほぼ無視可能であると考えられることができる．ただし今回は非常に単純な形状に対して計算を行なっているため，どの程度の分割で幾何的形狀の近似が成立するのかが問題固有であり，事前に検証する必要がある．

今節の最後に Differential Stress Methods のコアスプリットパラメータの影響度を検証した．モデルは Fig.2.10 のシェアーループと同じものを仮定した．分割数は 80，半径は 100[nm] で固定し，コアスプリットの範囲とコアスプリットパラメータの δ (式 2.11) を変化させた．結果を Fig.2.11 に示す．(a) はコアスプリット範囲を両側 1~10 と変化させた場合の結果を示す．

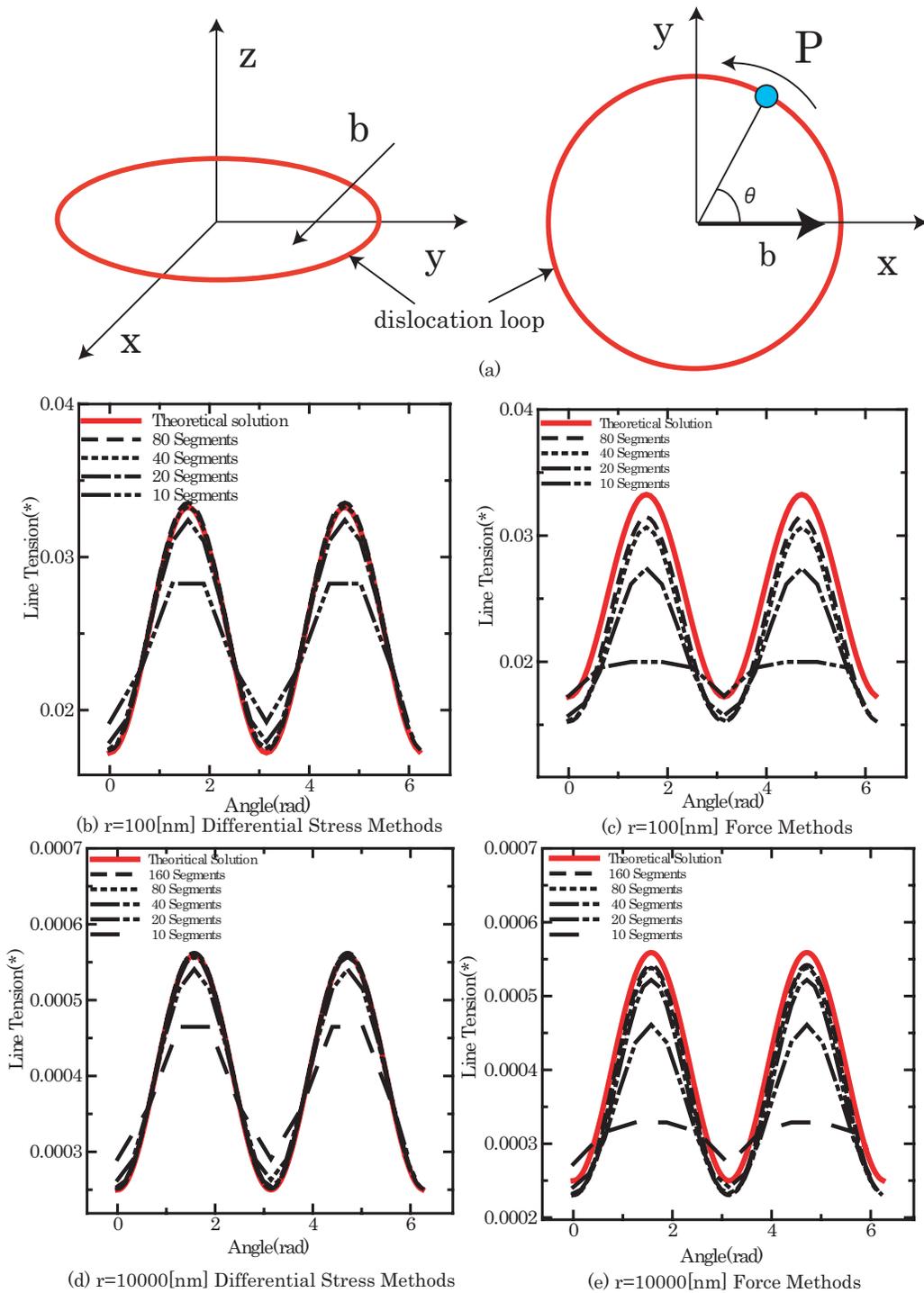


Fig. 2.10 (a) The geometry of a share dislocation loop. (b) (c) (d)(e) The line tension of a share loop. Comparison between the exact analytical solution [6, 7] and approximate solution by Force Methods (b) (d) or Differential Stress Methods (c) (e) for various division number. The radius of the loop is 100[nm] for (b)(c), 10[μm] for (d) (e).

グラフ (a) にあるように有意な差は見られない。(b) ではコアスプリットパラメータの δ を $0.1b \sim 5b$ まで変化させる。予想されるように δ の値が小さいときには、コアスプリットの意味がなくなるため、値が発散する。これに対してあまりにコアスプリットの値が大きい場合には幾何形状が保てなくなるため値が低下する。値を $1b$ とするとき厳密解にもっとも近づく。そこで今回文献 [6] の値にもあるように $1b$ として以降の解析を行なう。

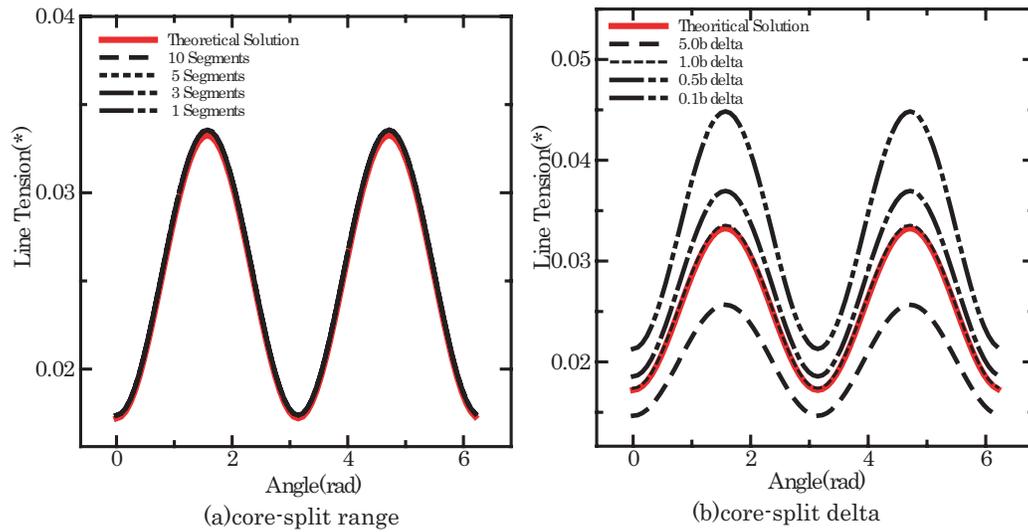


Fig. 2.11 (a) (b) The line tension of a share loop. Comparison between the exact analytical solution [6,7] and approximate solution by Differential Stress Methods for various core-slit parameters. (a) is for various core slit range and (b) is for the core slit offset δ used in eq.2.11.

2.2.4 鏡像力の評価

転位は界面からの影響を受ける．界面力の評価手法には重ね合わせの原理 (the principle of superposition, the Boussinesq problem) を用いて有限要素法を用いて評価する手法 [44,45] , 有限要素法などの数値計算による空間離散化を用いず弾性論に基づいて計算する手法 [46-48] , フェーズフィールド法の定式化に取り込む手法 [32] などが提案されている．しかしこれらの手法は計算コストが非常に大きいものであったり, 定式化が非常に複雑であるため, 今回は Schwarz らの文献 [6] にある簡便な手法を用いて評価を行なった．

鏡像力の簡易評価式 [4,6]

次に式を記述する．なお式中の $\lambda, \theta, \beta, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$ の幾何関係は Fig.2.12 に示す．

$$\mathbf{f} = \begin{cases} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{\mathbf{n}_2 |2\nu \cos\beta \sin\beta|\} & \theta < 10^\circ \\ \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{\mathbf{n}_1 |(1-\nu \cos^2\beta) \tan\theta| + \mathbf{n}_2 |2\nu \cos\beta \sin\beta|\} & 10^\circ \leq \theta \leq 80^\circ \\ \frac{\mu}{4\pi\lambda} \left(b_s^2 + \frac{b_e^2}{1-\nu} \right) & 80^\circ < \theta \end{cases} \quad (2.15)$$

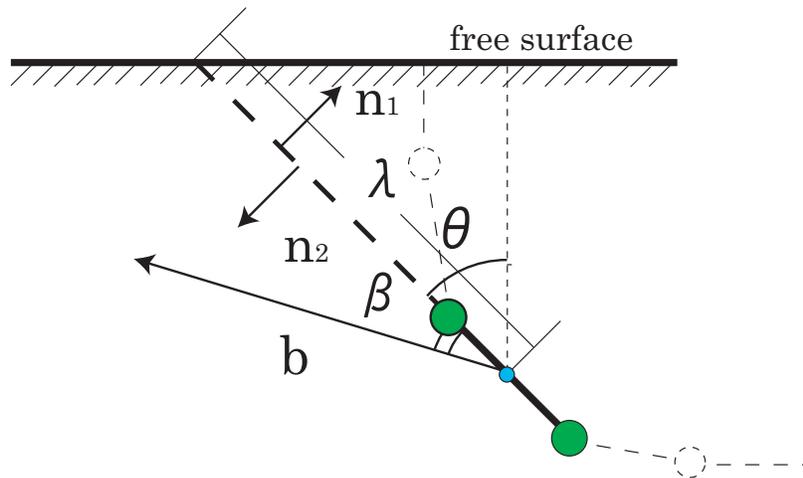


Fig. 2.12 The method of computing the image force. Some of the symbols used in eq(2.15) are shown.

ここで b_s, b_e はそれぞれバーガスベクトルの刃状成分ならびにらせん成分である．式 2.15 内右辺第 2 式の内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スベクトル方向に回転させようとする項である [4]. Schwarz ら [6] は発散を防ぐために右辺第 1 式を加えた．式 2.15 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（文献 [6] を参考に今回は $\lambda_c = 0.4 \times 10^{-3} [\mu\text{m}]$ 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．

鏡像力の簡易評価及び補間が解析に及ぼす影響

補間法 転位ループは転位の性質上結晶内で閉じているか，あるいは界面に端点を持つ．よって数値計算上は前述したように界面と接している場合には端点を界面に適宜補間する必要がある．補間法として Fig.2.13 にあるように (a) 界面に垂直に補間する方法，(b) 素片接線方向に延長線上に補完する方法の 2 つが考えられる．一見すると (b) の方が適しているように考えられるが，素片接線方向が界面と平行に近づく物理的に異常な挙動を示すことになる．今節では補間法の違いも含めて境界の影響を検証する．

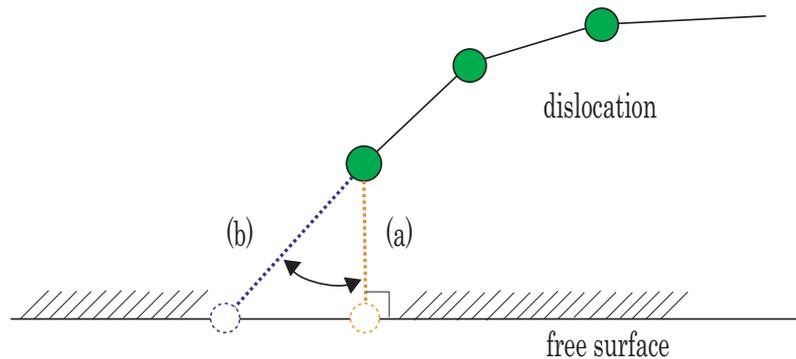


Fig. 2.13 Two interpolation methods against free surface.

検証題材 今研究では検査題材として文献 [6] にあるような基板上に一様応力をもつ薄膜が配置された構造中の転位の運動を解析する．構造の寸法及び座標系ならびに時間発展の様子を Fig.2.14 に示す．自由界面の方向は z 軸方向にとり，すべり系は $(1, \bar{1}, 1)_{\frac{1}{2}} [1, 1, 0]$ を仮定した．応力場は薄膜中のみ $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 2\varepsilon_0\mu(1+\nu)(1-\nu)$ としその他の成分は 0 とする．また各物性値はシリコンの物性値 ($\mu = 60.5 [\text{GPa}]$, $\nu = 0.28$) を仮定し，温度を 900 K として解析を行なう．結果は Fig.2.14 に示すように薄膜と基板の界面にミスフィット転位を残しながら threading arm と呼ばれる軌道で運動をする様子が再現された．

簡易評価力の有無による転位運形状の差 上記題材に対して鏡像力の有無が形状に与える差について比較する．Fig.2.15 に鏡像力を簡易評価して計算したもの (a)，及び考慮しないもの

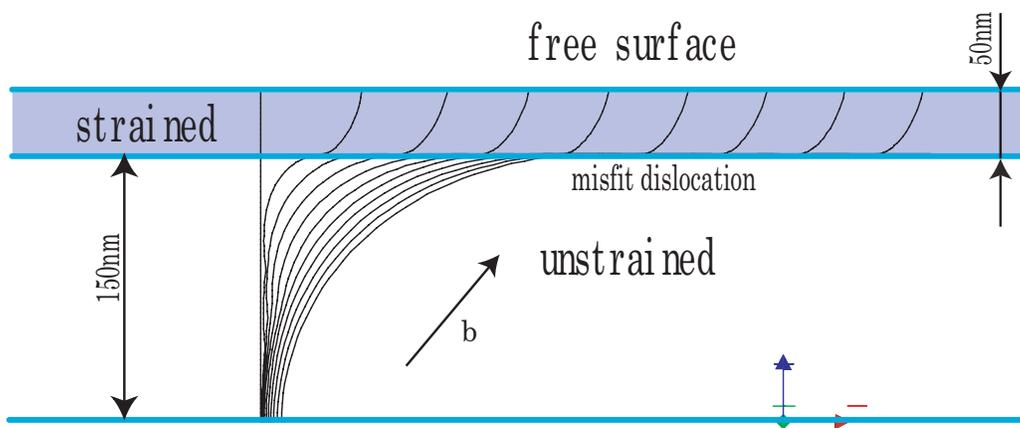


Fig. 2.14 Propagation of a misfit dislocation in a strained layer with a free surface on $(1, \bar{1}, 1)$ glide plane with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$.

(b) の初期状態から 10^{-4} [sec] 後の転位形状を示す．今回補完法は Fig.2.13(a) を適用した．鏡像力を評価したもののほうが前述したように自由界面境界方向に垂直に回転させようとする効果及びバーガースベクトル (Fig.2.14) の方向に回転させる効果が存在するため，今回の例では転位運動を促進させる．また自由界面に近い薄膜中では転位の形状には差が出ているものより内側の基板内における形状においては両者差がほとんど存在しない．よってこの検証により，着目する転位形状が自由界面に近い場合にはより高精度な手法の使用をふくめて界面力の考慮が不可欠であるもの着目する転位形状がある程度以上自由界面から離れた場合には，誤差は 10%~40%程度あるといわれる [6,35] 今回使用した手法で充分であると考えられる．

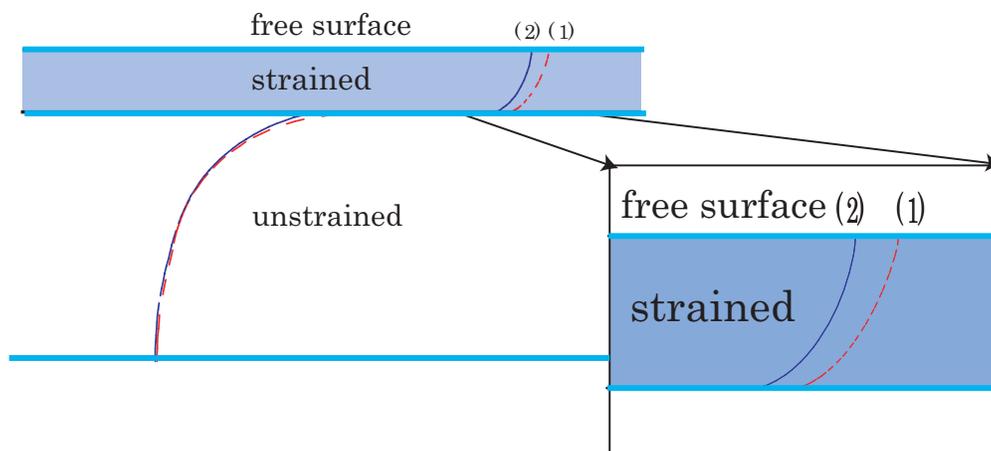


Fig. 2.15 Comparison of propagation of a misfit dislocation (a) considering free surface effect with (b) no free surface.

簡易評価力の有無および補間法の違いによる転位形状の差 上記題材に対して鏡像力の有無および補間法の違いが形状に与える差について比較する．解析条件を Table.2.1 に，解析結果を Fig.2.16 に示す．自由界面付近の形状に着目するために転位位置をそろえるため各サンプルの解析時間が異なっている．[1][2] と [3][4] は補完法が異なるがやはり予想されるように (b) のタイプの補間は今回のような題材においては転位の動きを加速させる方向に働く．[3][4] を比較すると鏡像力には界面に垂直に素片を回転効果が存在するため [3][4] のような界面に対してなだらかな傾斜をもつ形状に対しては，先ほどとは逆に転位運動を抑制する方向に働く．また自由界面に近い薄膜においては転位の形状には差が出ているものより内側の基板内における形状においては両者差がほとんど存在しないという傾向は先ほどと同じである．また今回の題材において文献 [6] の解析結果により近いのは [1][2] であり，その意味において今例においては補間法は (a) の方が適切であると考えられる．

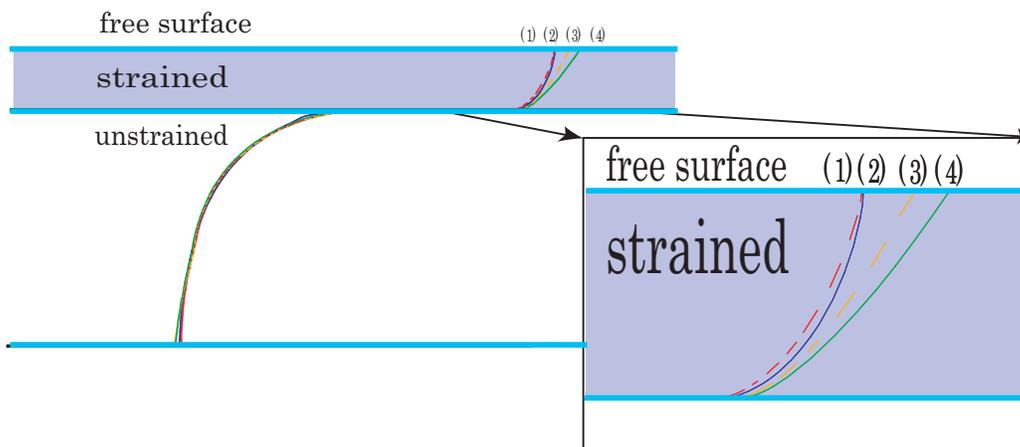


Fig. 2.16 Comparison of propagation under some conditions. (1),(3) Considering the free surface effect (2),(4) with no effect. (1) and (2) use (a) type interpolation (Fig.2.13) , and interpolation (B) for (3),(4)

Table 2.1 Analysis condition for Fig.2.16 .

	time(10^{-4} [sec])	interpolation type	image force
[1]	1.00	(a)	
[2]	1.04	(a)	×
[3]	0.97	(b)	
[4]	0.97	(b)	×

以上結論として鏡像力の有無や補完法によって界面近傍の転位形状は大きな影響を受ける。よって着目する現象が界面に近く定量的な議論が必要な場合には、必要なだけ近似の精度を上げる必要がある。しかし界面から転位形状がある程度以上自由界面から離れた場合や定性的な評価を加えるためには、今回使用した手法で充分であると考えられる。

2.2.5 転位位置更新手法

応力速度関係式

転位の慣性項は、通常の転位運動を考える上では充分小さく無視できる。このため一般に転位の移動速度 (v) とせん断応力 (τ) には、次の関係がある。

$$v = v_0 \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \quad (2.16)$$

ここで v_0, τ_0, m は温度・圧力一定化において定数である。通常 $m = 1$ として移動速度とせん断応力には線形関係があると見なし、その他の定数をモビリティ (Mobility) という運動の抵抗としてみなして定式化が行なわれる [5, 30]。

今回シミュレータの題材は半導体素子であり、材質は単結晶シリコンである。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 [49, 50]。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 [39] を使用する。すなわち移動速度とせん断応力の関係式に次の実験式を用いる。

$$v = \begin{cases} B \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \exp \left(-\frac{Q}{k_B T} \right) & \tau > \tau_{cr} \\ 0 & \tau \leq \tau_{cr} \end{cases} \quad (2.17)$$

ここで

$$\tau_{cr} = 2.2 \times 10^{-19} C_0 \exp \frac{0.215}{kT} \quad (2.18)$$

であり、 $B = 7.2 \times 10^{10} [\mu\text{m/s}]$, $m = 1.1$, $Q = 2.2 [\text{eV}]$, $\tau_0 = 10 [\text{MPa}]$, k_B はボルツマン定数, T は温度 [K], C_0 は酸素濃度 [cm^{-3}] である。つまり式 (2.17) 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 とみなすことで基板酸素濃度による固着の影響を取り込んでいる。

以上により転位にかかる力を速度に変換可能であり、速度を用いて転位の位置更新を行なう。位置の時間積分には差分法を用いればよく、今研究では準陰解法であるクランク - ニコルソン法を用いた。クランク - ニコルソン法の特徴としては、解の精度は陽解法や完全陰解法に比べてよいが、時間刻みが大きすぎると安定解付近で振動を起こすという問題があるため、現象に応じて適宜時間ステップを調整する必要がある。

単純応力場における検証

転位の運動の再現性について検証を行う．検証題材は円形シェアループのバルク中での運動での一様応力場線形傾斜応力場を仮定した．円形シェアループにかかる平均線張力は式 2.14 を積分し平均をとることで下式のように得られる．

$$\bar{F} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(\theta) d\theta = -\frac{\mu b^2(1-\nu)}{8\pi r(1-\nu)} \ln \frac{4\pi}{z_0} \quad (2.19)$$

各パラメータの意味は式 2.14 と同じである．今回のモデルでは，初期半径を $r = 200[\text{nm}]$ としたため，初期線張力は $\bar{F} = 0.0035338[\text{nN}]$ となる．一様外部応力としてすべり系に Fig.2.17(a)1[GPa]，(b)0.1[GPa]，(c)0.05[GPa] の分解せん断応力を作用させる．転位論によりせん断応力 (τ) と転位に作用する力 (f) には以下の関係がある．

$$f = \tau b \quad (2.20)$$

よって上記の応力場による転位の駆動力は (a)0.384[nN]，(b)0.0384[nN]，(c)0.0192[nN] となり，それぞれ円ループを縮小させる張力と拡張させる駆動力の関係は (a) 張力 < 駆動力，(b) 張力 \approx 駆動力，(c) 張力 < 駆動力となる．従って転位論によるならば，(a) 拡大 (b) ゆっくり拡大 (c) 収縮と予想ができる．Fig.2.17 に数値解析結果による時間発展の様子を示す．すべり系は $(1, \bar{1}, 1)1/2[1, 1, 0]$ と仮定して解析を行なった．転位ループは (a)(c)5.0[μsec]，(b)10.0[μsec] で等時間間隔でプロットされている．変化の方向は矢印で示されている．(a) では急速に拡大し，(b) ではゆっくり拡張するものの，あまり初期位置から運動はしない．(c) では収縮している．以上の結果は転位論からの考察を完全に裏付けるものであり，今研究で開発したシミュレーションコードは転位論の結果を忠実に再現できているものと考えられる．

Fig.2.17(d) は同様のすべり系をもつ転位ループに $-5 \sim 5[\text{GPa}]$ の線形応力場を作用させ転位ループの動きの数値解析結果をせん断応力の分布とともにプロットしたものである．初期配置において半径 100[nm] の円ループが時間発展し，最終的にはせん断応力が 0[GPa] の等高線に沿って停留する．今回は停止時において転位ループは直線となり張力が作用しないため，この結果は非常に妥当であると考えられる [1]．

続けて応用例として双極子 (dipole) の形成の時間発展の様子を Fig.2.18 に示す．共に外部応力場は 1[GPa] としすべり系は $(1, \bar{1}, 1)1/2[1, 1, 0]$ とし，相互の滑り面の間隔は $2b$ とし解析して (a) では半径 100[nm] の円形転位ループを相互に 40[nm] 隔てて解析を行なう．転位ループは (a)10.0[μsec]，(b)5.0[μsec] で等時間間隔でプロットされている．最終的には 1 本の双極子が中央に形成される．(b) では直線転位の中央に転位の張力程度では動かない強固なジョグ (ジョグ高さ $2b$) が存在することを仮定する．計算結果は直線転位は双極子を作成しながら移動し (矢印)，最終的に中央に双極子を残す．いずれのケースでも転位論の教科書など

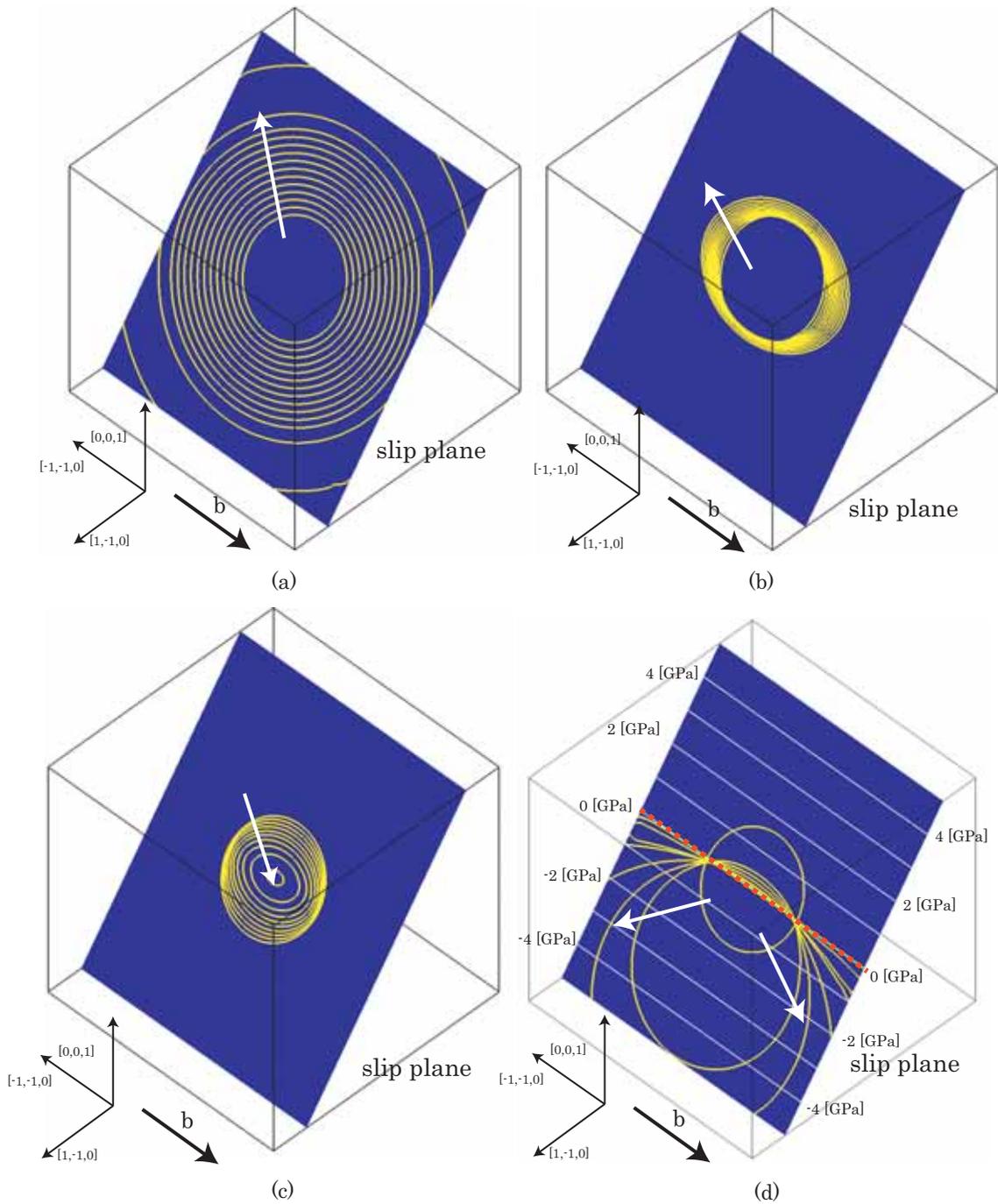


Fig. 2.17 Computational figures of the growth of loop on the $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$ under applied stress at subsequent equidistant time moments. (a) 11.0 [GPa] (b) 0.1 [GPa] (c) 0.05 [GPa] resolved share stress is applied. (d) is under stress changing linearly from z axis top 5 [GPa] to bottom -5 [GPa]. Dot line show 0 [GPa] stress contour line.

で説明されているような双極子が形成されることを示す．双極子は文献 [9] と同様に各素片同士の相互作用のみによって計算され近接反応として組み込んでいない．そのため (a)(b) とともに安定形状を求めて双極子は振動している．本来双極子の振動は時間刻みが細くなるため，数値計算上好ましくない．そのため転位間の相対速度や作用する力に基準値を定めて，その値以下では双極子を固着させる [9]．今回は解析サンプルとしてこのような基準値を用いずに転位の相互作用力と駆動力により自然に双極子が形成される様子を示した．

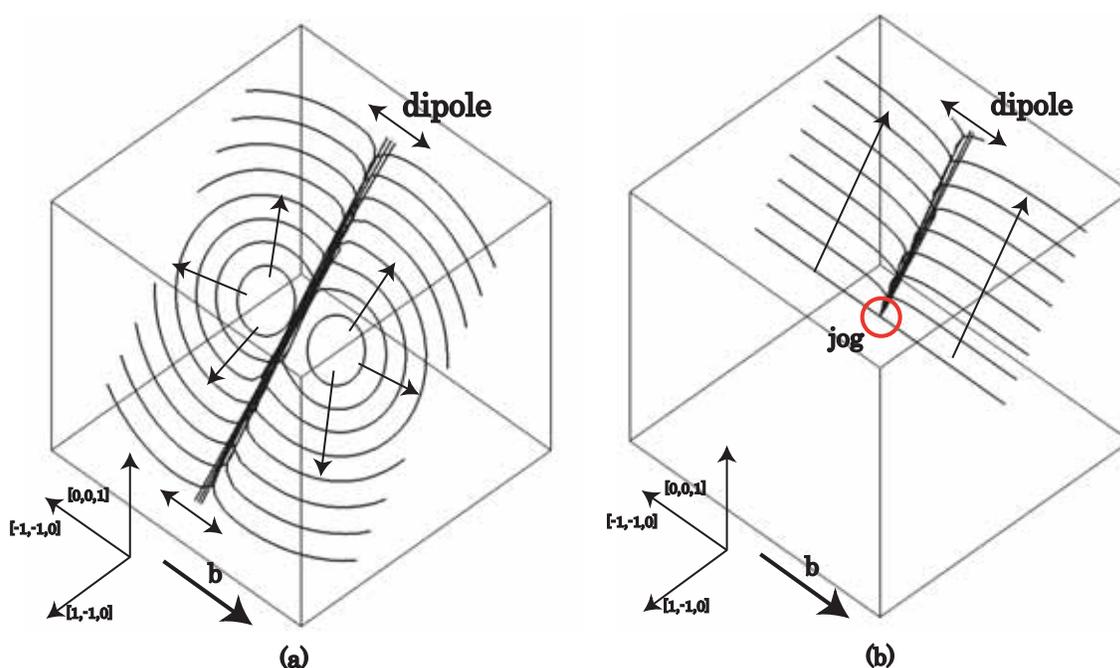


Fig. 2.18 Computational figures of the formation of a dipole on the $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$ under applied stress at subsequent equidistant time moments. (a)(b) 1.0[GPa] resolved share stress is applied. (a) Two circular share loops (radius 100[nm]) (b) a single staright line with a jog are initially arranged.

以上結論として研究で開発したシミュレータは転位論の結果を忠実に再現しうること示した．

2.2.6 数値計算的技巧

転位動的分割

本研究では，転位ループを複数の転位素片に分割して数値計算を行なっている．転位形状は時間積分により随時更新されるため，節点間隔にばらつきが生じる．節点間隔が平均に比べて

広すぎる場合には幾何形状を保てなくなり、線張力の検証の箇所で記述したような精度の大幅な低下を招く。また短すぎる場合には、Force Methods では前述したように発散が、Differential Stress Methods では発散という問題は起きないものの転位素片のなす角度 ϕ や曲率 R_c の値が振動し、結果として転位ループの振動を引き起こし好ましくない。従って適当な節点間隔を保つことが非常に重要である。

転位動力学においては、各素片の作り出す応力場が長距離場であるため、全ての素片間で相互作用を計算する必要がある。素片数を N とした場合 N^2 オーダーの計算負荷がかかる。このため素片数の抑制は数値計算上の非常に大きな問題である。また線張力の検証 (2.2.3) より $10[\mu\text{m}]$ とループ形状がバーガスベクトルと比較して非常に大きい場合についても分割が適当であるならば高い精度を維持できることが判明している。

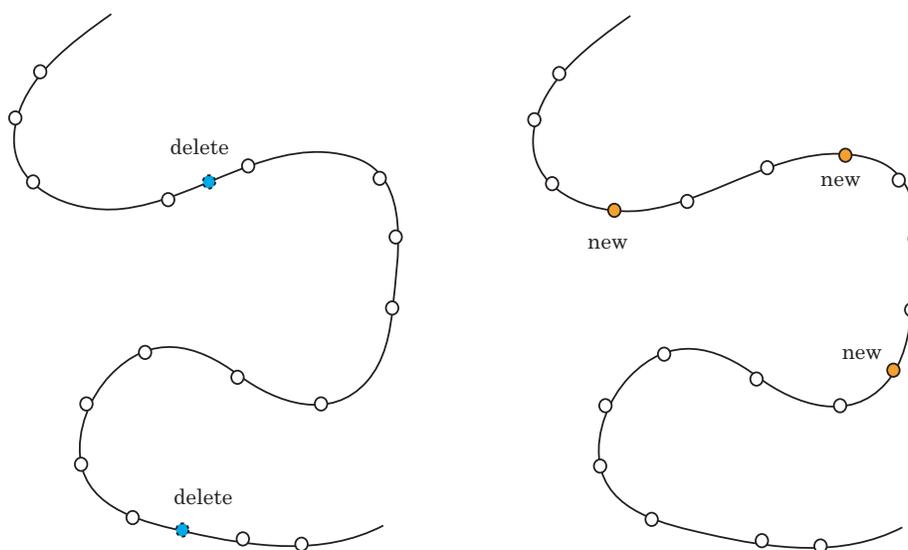


Fig. 2.19 (a)Deletion and (b)generation of the nodes on spline-interpolated line to maintain proper segment length.

以上より今研究では素片数の最大値、素片長の最小値を設定した上で、その範囲内で素片平均値に対してずれの大きい素片に対して補間線上で適宜節点の追加と削除を行なった (Fig.2.19)。補間にはにスプライン補間を用いることで滑らかに転位ループを表現することが可能である。この際張力は転位線形状の曲率に大きく依存するため文献 [6] を参考に極力次式の関係を満たすよう節点間・節点数を調整する。

$$\frac{\Delta l}{R_c} \approx 0.1 \sim 0.2 \quad (2.21)$$

ここで Δl は素片間隔であり、 R_c は素片における曲率である。

転位ループの素子化

前述したように転位力学は N^2 オーダーの計算時間を要する．計算時間の大半は素片の相互作用力の計算に費やされる．そこで今研究では計算の高速化ため，Fig.fig:coarse-mesh のような転位ループの素子化を行なう．概念的には有限要素法の全体モデル，サブモデルの考え方を応用したものがある．Fig.fig:coarse-mesh(a) のように着目している節点がある場合に，(b) のように節点 P の応力に与える影響の大きいコアスプリット範囲にある素片分割は変更せず，範囲外の素片分割をより粗いものに変更する．転位数が 1 の場合には，粗い素片数の最大値を N_{coarse} とするならば $N \times N_{coarse}$ ，すなわち N オーダーに計算数を減少させることが可能である．

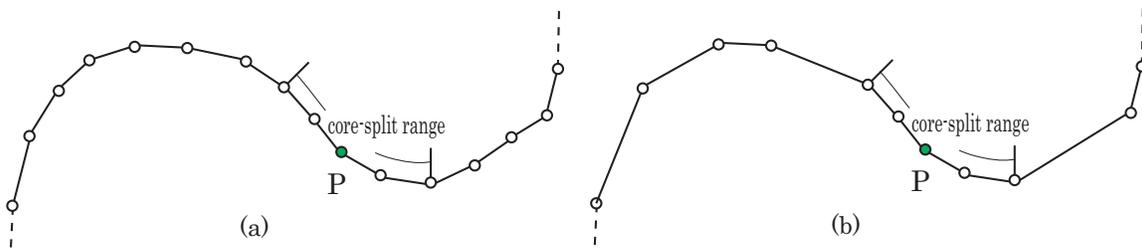


Fig. 2.20 Remesh methods for computing the long range contribution more effeciently. (a) is default division and (b) is more coarse division for stress calculation.

時間増分調整

また時間増分の調整も数値計算の高速化，計算精度の確保において非常に重要である．今研究では，時間増分の上限・下限を定めた上で 1 ステップ間の最大移動量が素片サイズの最小値の $\frac{1}{10}$ 以下になるように調整した．ただし，後述する転位間の近接反応近傍や転位線上に特異点となる固定点（一例を挙げれば jog など）が存在する場合には別と基準を設け従うこととする．

素片間距離のカットオフ

近接反応時においてなど互いの素片が重なったり，交差すると値が発散する．このため素片間の距離にカットオフ値を設け，それ以下の場合には作用する力を 0 とした．今研究ではこのカットオフ値をバーガスベクトルの絶対値 b とした．

2.2.7 近接反応

前述したように転位間の近接反応 (Short Range Interaction : SRI) は転位動力学の範疇を越えるものであるためローカルルールとして取り込まれる。今回扱う題材は半導体素子の単結晶シリコンであるため、その特性上金属の塑性変形などを扱う場合に比べて転位密度もはるかに低く、転位間反応が着目する現象の中心を占めているわけでもないため、近接反応についてはローカルルールを Zbib ら [9] を参考により簡略的に取り込んだ。以下にそのフローチャートを示す。

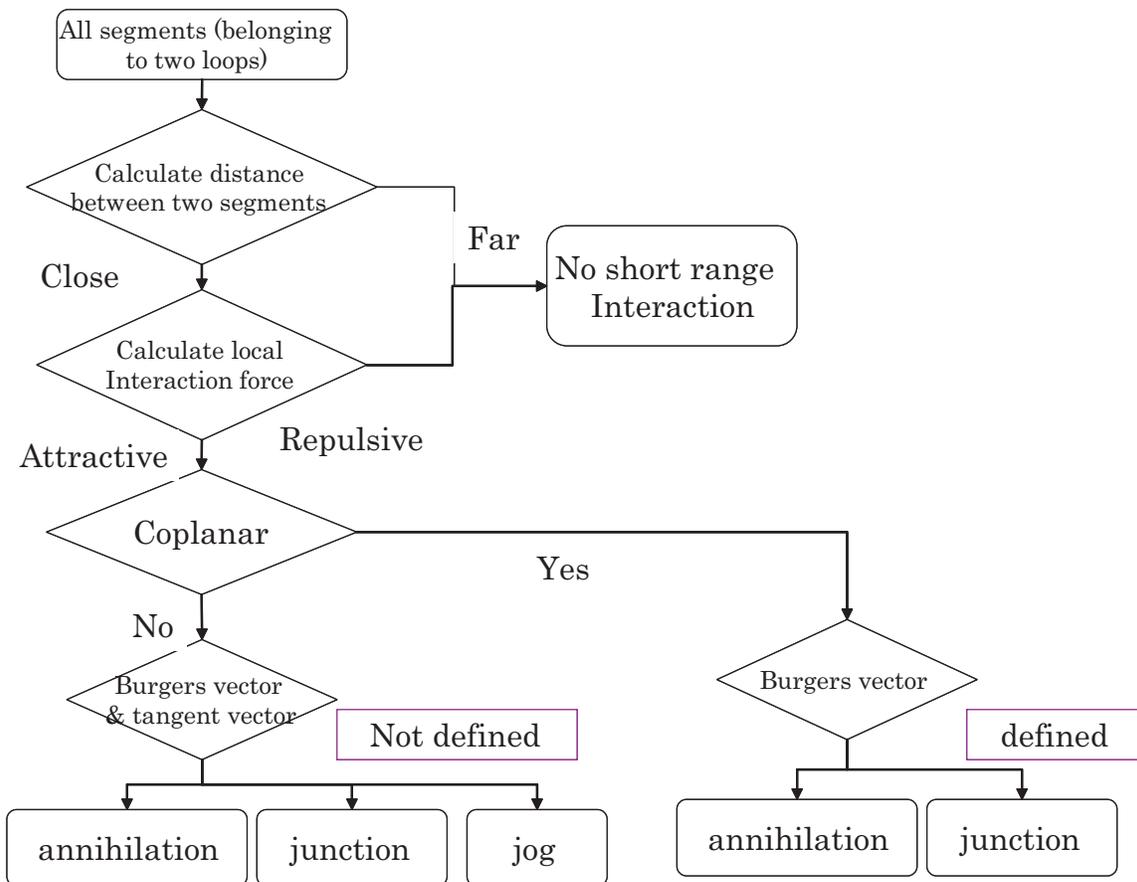


Fig. 2.21 A flowchar of numerical algorithm for short range interaction.

計算アルゴリズムの概略について以下に示す。まずある時刻において着目する素片に対してその周囲にコアスプリット範囲に含まれない他の素片が存在するかを調べる。存在する場合には、素片相互間距離 (d) が $0 \leq d \leq 10b$ を満たすときに反応距離に接近したと見なす。なお 2.2.6 で紹介したように遠距離素片相互間に働く力は $d < b$ の時にカットオフをかけているため発散することはない。この際接近する転位素片間に働く力を調べて引力である場合には何

らかの反応が起こることとした．取り扱う題材上，全て反応は近接反応を起こす素片同士が同一平面に属している場合のみを考え，対消滅(アニヒレーション)とジャンクションのみを解析コードに取り込む．

対消滅

対消滅(アニヒレーション)は着目する i 素片と j 素片間に以下の関係が満たされる際に反応が起こるものとする．

$$\begin{aligned}
 t_i = t_j \quad \text{and} \quad b_i = -b_j \\
 \text{or} \\
 t_i = -t_j \quad \text{and} \quad b_i = b_j
 \end{aligned}
 \tag{2.22}$$

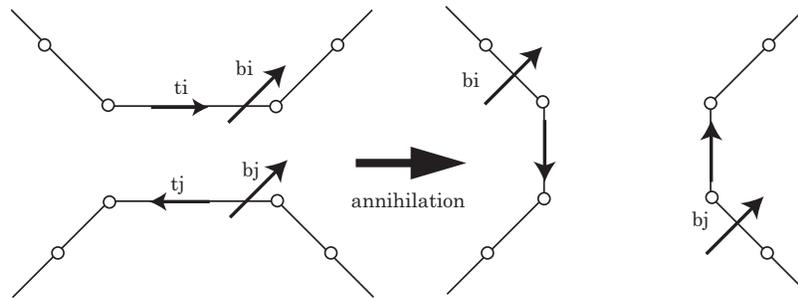


Fig. 2.22 Schematics of the local rule for the annihilation. Some symbols in eq.2.22 are shown.

ここで各パラメーターは Fig.2.22 に示す通りであり， t は着目転位素片の接線方向， b はバーガスベクトルの方向である．

対消滅のサンプルを Fig.2.23 に挙げる．全てすべり系は $(1, \bar{1}, 1)[1, 1, 0]$ であり，駆動力は分解せん断応力を $1[\text{GPa}]$ と与える．初期配置として (a) は半径 $100[\text{nm}]$ の円ループ2つを相互に $40[\text{nm}]$ 離して解析を行い，(b) では両端をピン固定された長さ $40[\text{nm}]$ 直線転位が転位の増幅機構であるフランクリード源として作用する様子を示す．今回は (a)(b) 共に等計算ステップ間隔で転位ループを出力した．それぞれ赤丸でマークされている箇所に対消滅が起こっている．対消滅を起こした箇所で接続情報が変わり，ループ形状が変わっている様子が分かる．

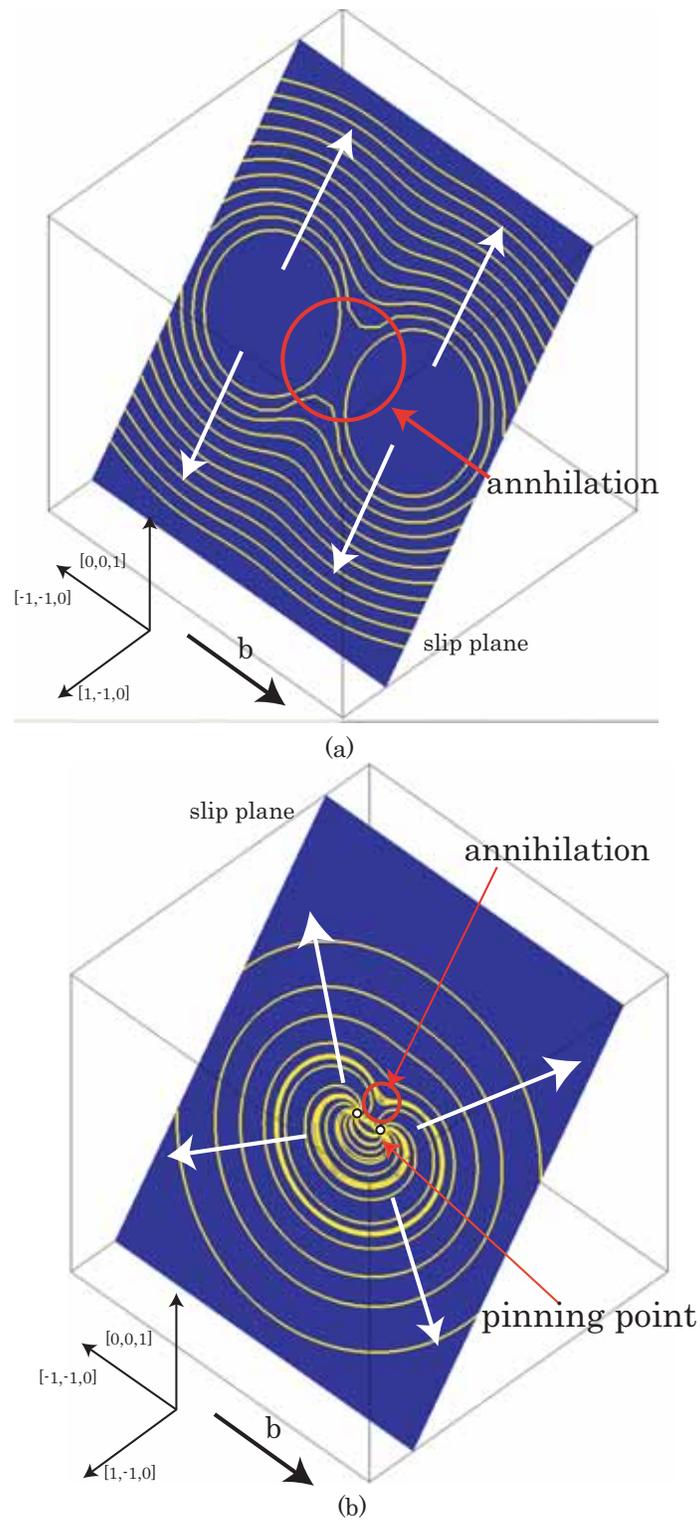


Fig. 2.23 Simulation of annihilation on $(1, \bar{1}, 1)$ slip plane with Burgers vector $[1, 1, 0]$ under 1[GPa] resolved share stress field. (a) Two circular loops are 40[nm] apart. (b) The pinning points are 40[nm] apart. (b) is operating as a Frank-Read source. Snapshots are plotted by the same number of computational step.

ジャンクション

ジャンクションは着目する i 素片と j 素片間に以下の関係が満たされる際に反応が起こるものとする。

$$|t_i \cdot t_j| \approx 1 \quad \text{and} \quad b_i \neq -b_j \quad (2.23)$$

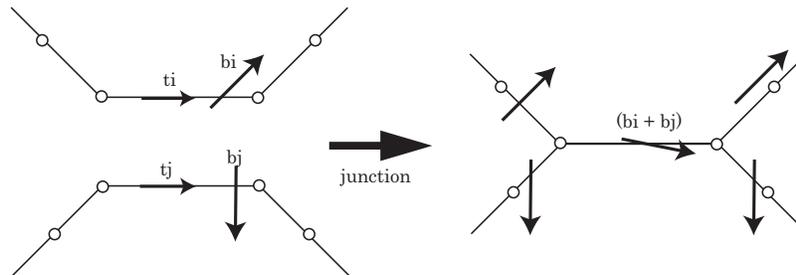


Fig. 2.24 Schematics of the local rule for the junction formation. Some symbols in eq.2.23 are shown.

ここで各パラメーターは Fig.2.25 に示す通りである。ベクトルの方向である。

ジャンクションのサンプルを Fig.2.25 に挙げる。駆動力は分解せん断応力を 1[GPa] 与える。初期配置として半径 100[nm] の円ループ 2 つを相互に 40[nm] 離して解析を行い、それぞれのすべり系は $(1, \bar{1}, 1)[0, 1, 1]$, $(1, \bar{1}, 1)[\bar{1}, 0, 1]$ であり、それぞれのバーガスベクトルの向きは図中に示す。等計算ステップ間隔で転位ループを出力した。それぞれ赤丸でマークされている箇所ではジャンクションが起こっている。ジャンクションを起こした位置で転位ループが不動化している様子が分かる。

2.2.8 交差滑り

転位の特性は接線ベクトルとバーガスベクトルによって定義することが可能である。刃状転位では、接線ベクトルとバーガスベクトルが垂直であるため、刃状転位の存在しうる滑り面は、完全転位と仮定するなら上記 2 つのベクトルで張られる面に限定できる。これに対してらせん転位は接線ベクトルとバーガスベクトルが平行であるため存在しうる面が一意に決定できず、Fig.2.26 に示すように異なる滑り面に障害物や応力場、熱活性によって乗り換えることができる。交差すべりとはらせん転位がすべり面を乗り換えることを示し、転位の挙動を考える上で非常に重要な現象である。特に、結晶構造が体心立方格子 (Body-Centered Cubic) をとる場合には、らせん転位の移動速度は刃状転位に対して非常に遅いため頻繁に起こり、材料の変形に大きく依存する。

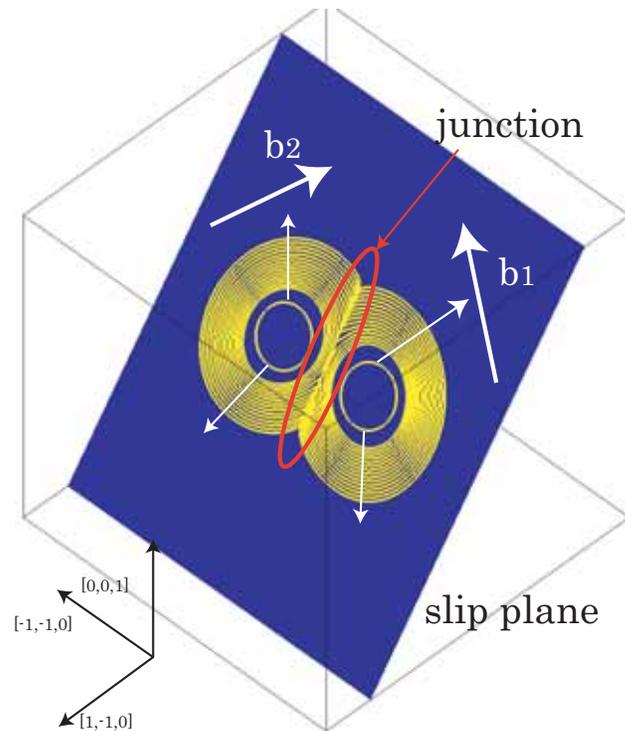


Fig. 2.25 Simulation of junction formation between two loops under 1[GPa] resolved share stress field. Both are on the same $(1, \bar{1}, 1)$ glide plane. One has Burgers vector $[0, 1, 1]$, the other with Burgers vector $[\bar{1}, 0, 1]$, which are shown with arrows in figure.

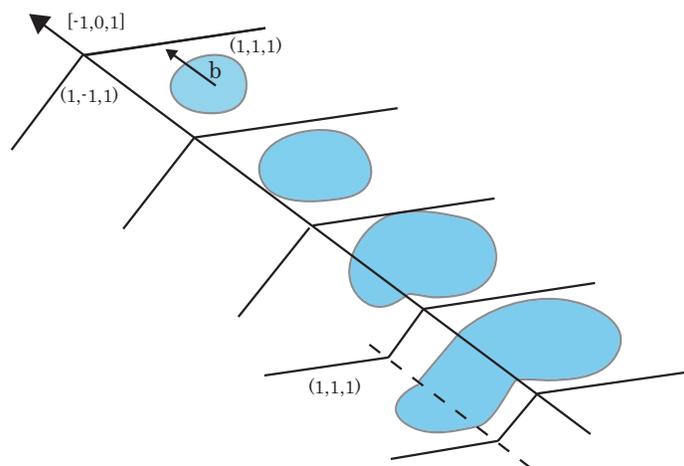


Fig. 2.26 Schematics of the cross-slip mechanism [8].

Zbib ら [9] は熱活性下仮定によるローカルルールとして交差滑りを取り入れ、確率論アプローチを取った。今研究で扱う題材はダイヤモンド構造をとるシリコンであり、BCC 金属に比べて格段に交差すべりの起こる確率は低い。よって今研究で開発したシミュレータでは確率論的な扱いはとらず、交差滑りの発生はオプションとし、交差滑り先の面がもと面のより分解せん断応力が高い場合か、あるいは手動で計算ステップ及び交差すべりの回数を直接指定することで、交差すべりの条件を満たす任意の素片に強制的に交差滑りを発生させるという手法で導入することとした。

交差滑りは上記の条件を満たした上で素片の接線 (Fig.2.27 中の滑り面 i 上の点線で描かれた素片 i) とバーガースベクトルのなす角度が 1.0° 以下になる時に起こるものとする。このとき Fig.2.27 に示すように素片 i の長さの半分だけ張り出したダブルキックを作成しこれを滑り面 j 上に移すことによって交差滑りを行なうものとする。

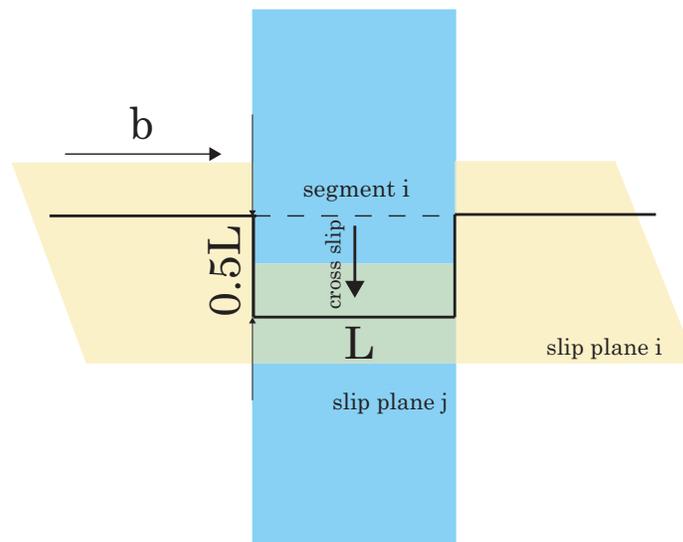


Fig. 2.27 A bow-out double kink model for cross slip [9].

交差滑りの例を Fig.2.28 に取り上げる。この解析例では、すべり系は $(1, \bar{1}, 1)[1, 1, 0]$ であり、駆動力は分解せん断応力を $1[\text{GPa}]$ 与えている。この場合の交差滑り面はバーガースベクトルにより $(\bar{1}, 1, 1)$ 面に限定される。初期配置として半径 $100[\text{nm}]$ の円ループ1つを領域中央に配置し、解析ステップと回数を指定して導入する。Fig.2.28(a),(b) は転位発展の時刻暦変化を計算ステップに対して等間隔に出力したものであり、今解析事例では時間刻みを一定としたため $5[\mu\text{sec}]$ ごとに転位ループが出力されている。Fig.2.28 の矢印でマークした箇所では $(1, \bar{1}, 1) \rightarrow (\bar{1}, 1, 1)$ および $(\bar{1}, 1, 1) \rightarrow (1, \bar{1}, 1)$ の交差滑りが、都合4回起きていることが分かる。起きている場所はいずれも円ループの上下端であり、転位形状により転位素片がらせん成分のみを持つ箇所である。転位ループ運動の様子から、交差滑り反応が適切に表現されていると考

えることができる。

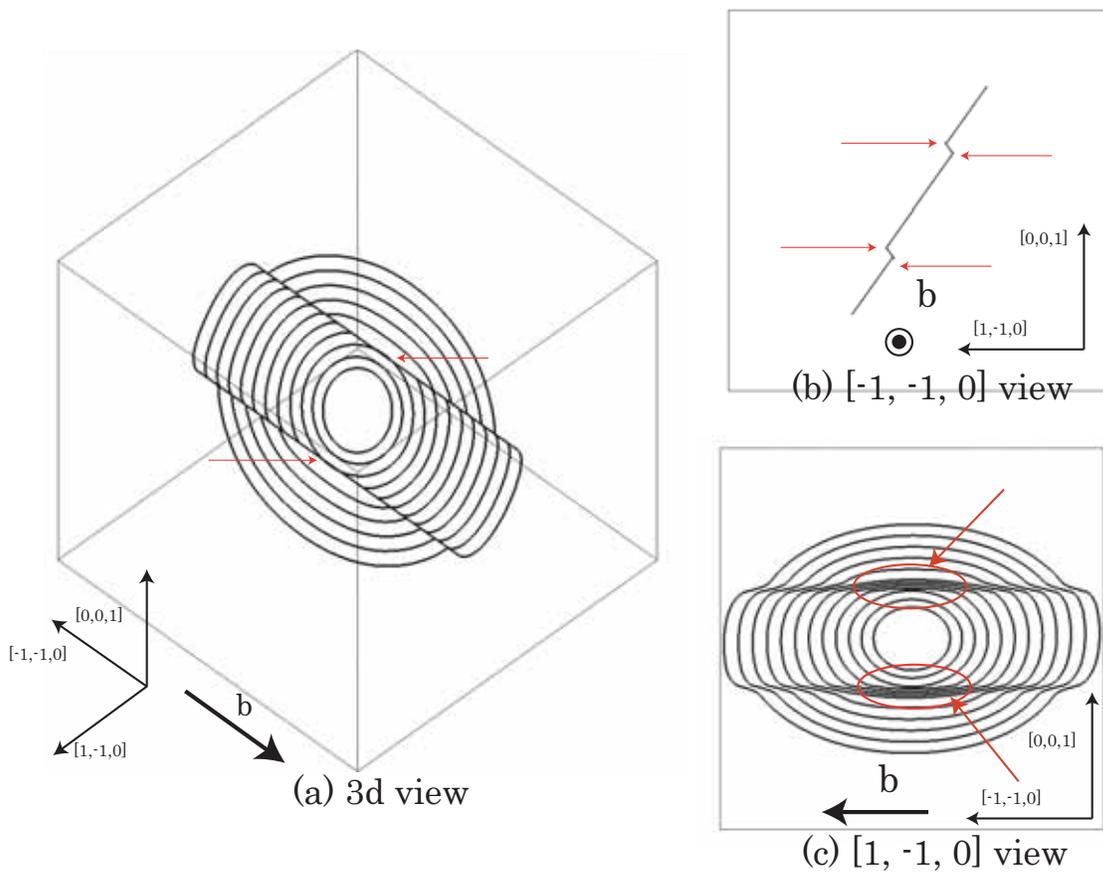


Fig. 2.28 Simulation of cross slip with an initial dislocation on $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $[1, 1, 0]$ under 1[GPa] resolved shear stress field. Cross slip happens at the place marked with 4 arrows. Snapshots are plotted by the same number of computational step. (a) 3d view (b) $[\bar{1}, \bar{1}, 0]$ view (c) $[1, \bar{1}, 0]$ view

2.3 分子動力学法

前述したように本節では分子動力学法における転位に関する部分だけを説明する．全般的な内容は附章に記述する．

2.3.1 スリップベクトル

今研究は転位の発生過程に対するシミュレーションを行なうため，得られた転位から転位の発生を調べるため可視化を行なう必要がある．今研究では転位の軌跡についての可視化を行なうためスリップベクトルを用いて可視化を行なう [51]．スリップベクトル (s^α) とは次式で定義される．

$$s^\alpha = -\frac{1}{n_s} \sum_{\beta \neq \alpha}^n (x^{\alpha\beta} - X^{\alpha\beta}) \quad (2.24)$$

ここで， n_s は滑った原子数であり， n は最近接原子数， $x^{\alpha\beta}$ ， $X^{\alpha\beta}$ は初期及び対象とする時刻での原子 α と β の相対位置を表すベクトルである．slip vector は滑りが隣接する2面で起こっている場合（つまり eq.2.24 で $n_s = 1$ の場合）には向きの正負の問題はあるがバーガースベクトルとほぼ同義である．

次に slip vector のアルゴリズムについて記述する．Fig.2.29(a) は初期における原子配置であるとする．ある時刻において刃状転位が移動し，原子に滑りが生じたとする (b)．着目する原子を α とするならば，この例において最近接原子は4つあり β, x, y, z である．転位が通過することによりすべりが生じ，最近接原子は β', x, y, z に変化する．このとき滑った原子は β である．よって (c) のように現時刻における原子 α, β の相対ベクトルから初期時刻における原子 α, β の相対ベクトルをひくことによってスリップベクトルが求められる．

2.3.2 転位の可視化

スリップベクトルを表示することにより転位の軌跡を表示することは可能であるが，現時刻の転位のみを表示させることはできない．比較的低い温度では近接原子の配位数が正常な原子構造から異なる原子や，エネルギーの高い原子を表示させることによって転位を表示させることはできるもの，高温状態においては外乱が大きくなりすぎ不適當である．そこで今研究では文献 [52] を参考に可視化を行なう．

1. 比較的高いエネルギーを持つ原子や配位数が正常でない原子を抽出する．
2. 抽出した原子に対して原子の隣接関係を利用した原子グループを作成する．
3. 原子グループに所属する原子数が多い場合には転位芯に属する原子と見なす．

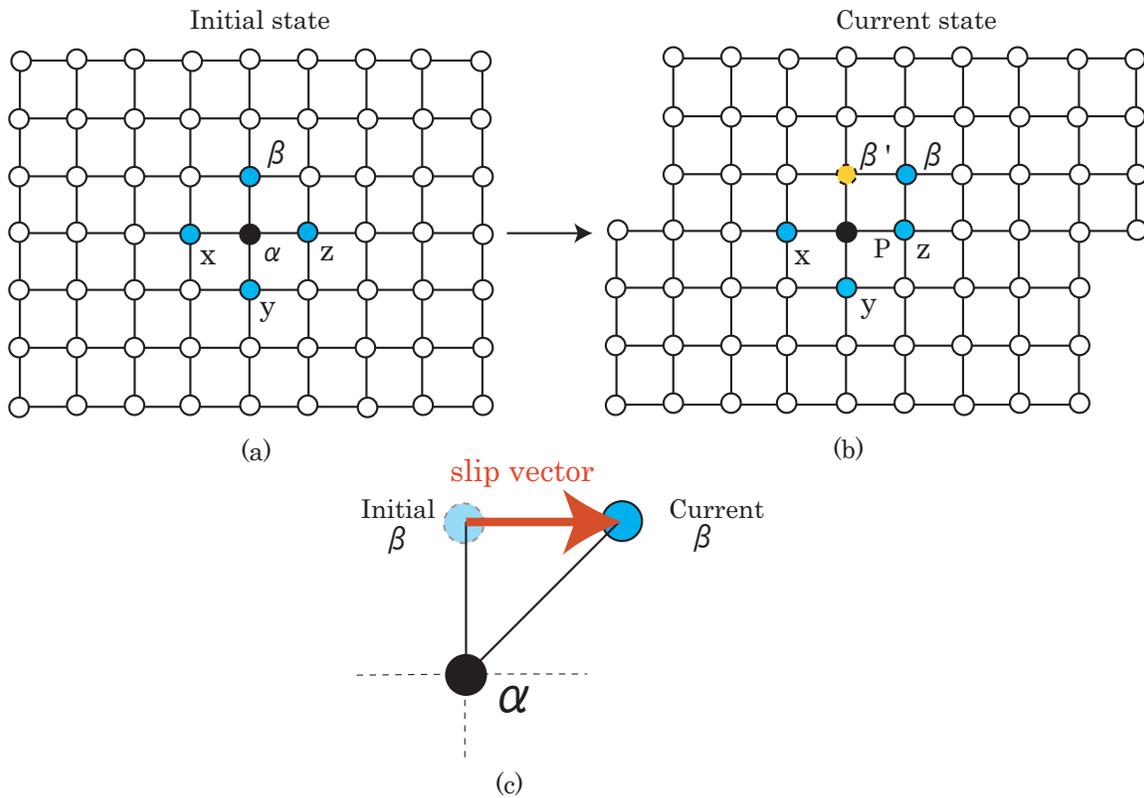


Fig. 2.29 Schematics of the algorithm of the slip vector.(a) The initial atomic arrangements. (b)The current atomic arrangement. (c)Schematics of the slip vector.

2.3.3 Tersoff ポテンシャルと Stillinger-Weber ポテンシャルに対する転位運動再現性についての検証

分子動力学法において用いる原子間ポテンシャルによって全てが決定されるため、着目する現象に対する再現性のよいポテンシャルの選定は非常に重要である。単結晶シリコンのポテンシャルとして主なものに、Stillinger-Waber (SW) ポテンシャル [53]、Tersoff ポテンシャル [54]、EDIP ポテンシャル [55] が挙げられる。各ポテンシャルの特徴は Balamane ら [56] の論文に詳しくレビューされている。一般に広く用いられるのは Tersoff ポテンシャルであるが、転位の動特性を解析する際には SW ポテンシャルがよく用いられる [36,57,58]。Godet らは文献 [59] でせん断変形場における各経験的ポテンシャルと *ab initio* の計算結果を比較し、SW ポテンシャルがせん断変形場において最も現象の再現性が良いことを示した。今研究において転位発生挙動に対する解析を行なうに当たって SW ポテンシャルと、弾性的性質を合わせるようにフィッティングさせた Tersoff ポテンシャル (T3 model) に対して Fig.2.30(a) や Fig.2.31(a) に示すようなせん断転位や刃状転位にせん断変形を作用させ各ポテンシャルの再現性について簡易的に検証を行なう。

らせん転位に対する検証

完全結晶にらせん転位の変位場 [4] を与えることで Fig.2.30(a) のようならせん転位を導入し、バーガーズベクトルの方向にせん断変形歪を 0 ~ 20%まで 0 ~ 10000[[step]] に線形に増大させながら解析を行なう。時刻刻みは 0.54[ps] としその他領域原子数等は Table.2.2 に示す。境界条件は x 軸方向のみ周期境界条件として、せん断変形を加える y 軸方向と z 軸方向は固定する。転位のすべり系は $(1, 1, 1)[1, \bar{1}, 0]$ 、温度を 0[K] とし解析を行なう。また結果の可視化はスリップベクトルを用いて行い、すべりの全くない部分は青、完全転位分滑っている箇所は赤、その他の部分転位ずれている部分はすべりに応じてその他の色で示されている。(b)(c) にそれぞれ 5.4[ps] 後の SW ポテンシャルの解析結果、T3 ポテンシャルの解析結果を示す。T3 ポテンシャルの方が若干進みが遅い以外大きな差はない。しかし SW ポテンシャルでは 1.62[ps] 時に約 6.0%のせん断歪がかかった段階でらせん転位は動きはじめるのに対して、T3 ポテンシャルでは 3.67[ps] 時に約 13.6%のせん断歪がかかった段階まで動かない。従って T3 ポテンシャルの方が SW ポテンシャルよりも転位に対して安定なポテンシャルである、すなわち転位が動きにくいポテンシャルであると考えることができる。これは T3 ポテンシャルにおいて不自然なカットオフ関数が採用されていることに起因し、脆性破壊のシミュレーションでも同様な不自然な現象が確認されている。

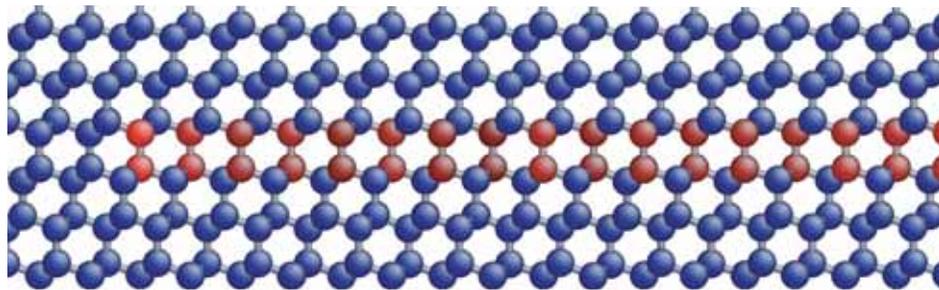
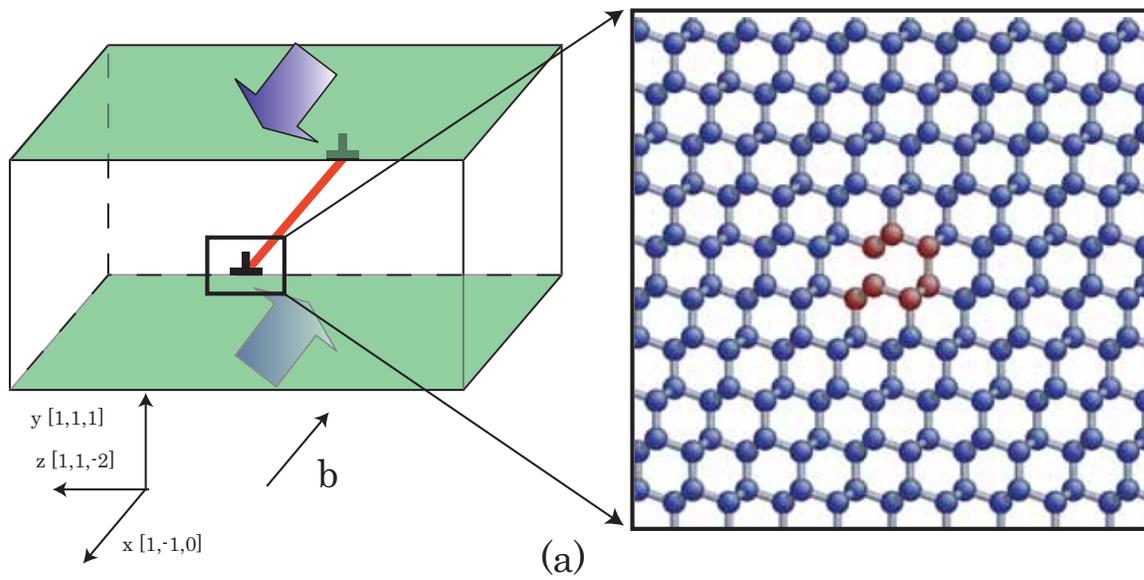
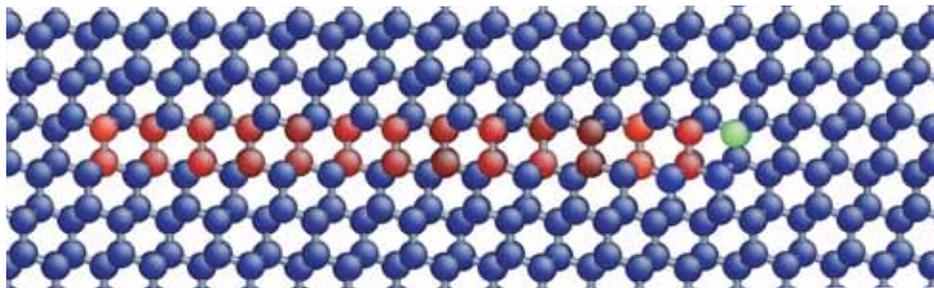
(b) $t=5.4[\text{ps}]$ (c) $t=5.4[\text{ps}]$

Fig. 2.30 Comparison of motion of the screw dislocation the SW potential with the T3 at $0[[K]]$ under share stress. (a)The screw dislocation model. Simulation result at $5.4[\text{ps}]$ with the SW(b) and T3(c).

Table 2.2 The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.2.30.

Number of Atoms	22026
Model Size	
x[nm]	2.3
y[nm]	14.1
z[nm]	13.3

刃状転位に対する検証

前節同様に完全結晶に刃状転位の変位場 [4] を与えることで Fig.2.31(a) のような刃状転位を導入し、バーガズベクトルの方向にせん断変形歪を 0 ~ 20%まで 0 ~ 10000[[step]] に線形に増大させながら解析を行なう。時刻刻みは 0.54[ps] としその他領域原子数等は Table.2.3 に示す。境界条件は z 軸方向のみ周期境界条件として、せん断変形を加える y 軸方向と x 軸方向は固定する。転位のすべり系は $(1, 1, 1)[1, \bar{1}, 0]$ であり、温度を 0[K] として解析を行なう。(b)(c) にそれぞれ 5.4[ps] 後の SW ポテンシャルの解析結果、T3 ポテンシャルの解析結果を示す。らせん転位の場合と異なり今回は大きな差が現われる。SW ポテンシャルでは刃状転位の通過した後は構造が回復し完全結晶になる。これに対し T3 では赤丸でマークされた部分が部分的に回復せずに乱れが乱れのまま残っている。これは SW ポテンシャルが安定構造として 4 配位しかとらないのに対し、Tersoff ポテンシャルが他配位を表現できるため乱れのまま安定な構造として存在できてしまうためと考えられる。また SW ポテンシャルでは 0.81[ps] 時に約 3.0%のせん断歪がかかった段階で刃状転位は動きはじめるのに対して、T3 ポテンシャルでは 2.81[ps] 時に約 10.4%のせん断歪がかかった段階まで動かない。らせん転位でも同様に見られた傾向はより拡大される。

よって以上結論として転位の動特性を検証するという目的に適しているのは SW ポテンシャルであると考えられる。そこで以降の議論は全て SW ポテンシャルを用いて行なうこととする。

Table 2.3 The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.2.31.

Number of Atoms	22113
Model Size	
x[nm]	15.3
y[nm]	14.1
z[nm]	1.99

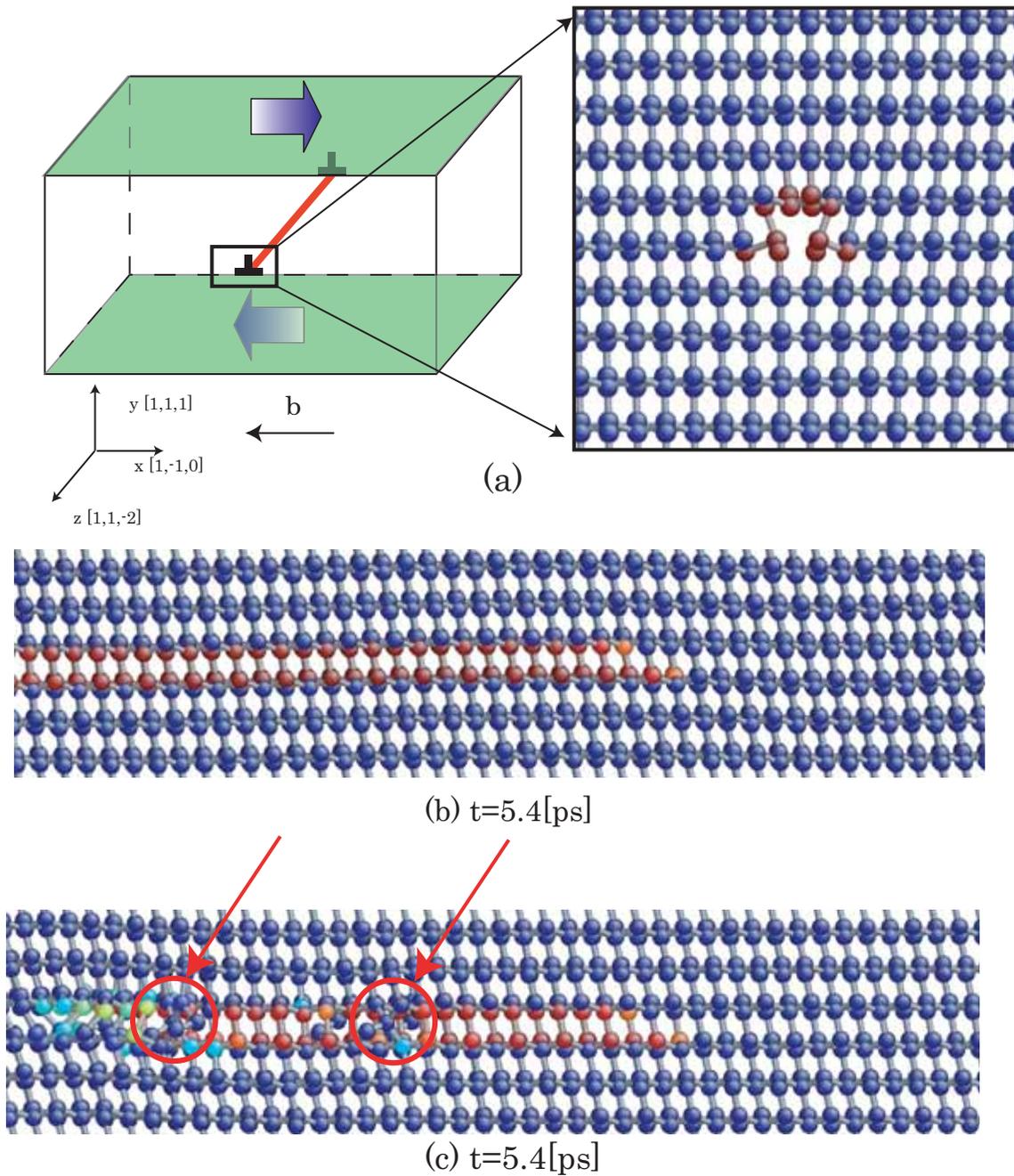


Fig. 2.31 Comparison of motion of the edge dislocation the SW potential with the T3 at $0[[K]]$ under share stress. (a)The edge dislocation model.Simulation result at 5.4[ps] with the SW(b) and T3(c).

第3章 SiN 薄膜真性応力起因転位への適応

3.1 緒言

SiN 薄膜は絶縁膜として半導体素子に幅広く利用されている．しかしながら Chemical vapor deposition (CVD) 法によって形成される SiN 薄膜は、成膜時に真性応力 [37] と呼ばれる 1[GPa] 程度の基板に対して引っ張り成分を持つ応力が発生し、膜の剥離や転位の発生といった問題を引き起こす．SiN 薄膜エッジに働く力は膜応力と膜厚に比例するため、膜エッジ部には強い力が作用し、800 °C 以上に昇温する過程をもつプロセスにおいてはシリコン内に転位を発生されることが確認されている [11, 35, 60–65] ．

三宅ら [1] は今研究に先立ち SiN 薄膜真性応力起因の転位発生の実験を行い、転位動力学解析を行なった．しかしながら計算機的な制限により扱えるタイムスケール、転位のモデルに制限が存在した．そこで本研究では高速化を行なった転位動力学コードを用いてより実現象に近づけたモデルで実時間に近づけた時間スケールで解析を行い、定量的な評価を行なうことを目的とする．

3.2 実験概要 [1]

解析対象とする三宅らが実施した実験 [1] の実験概要を示す．なお本節の大部分は三宅氏の修士論文 [1] から引用させていただいた．この場を借りてお礼を申し上げたい．

解析対象として Fig. 3.1 に示す正方形の SiN 薄膜 (Square Pad) が形成されたシリコンウエハとした．SiN 薄膜形状は厚さ 250 nm , 20 μ m 四方の形状となっている．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．

実験の概要は 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といものである．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]) が用意された．成膜されている SiN 薄膜のパターンを SEM で拡大したものを Fig. 3.1 に示す．上記試験片に加熱炉を用いて Fig. 3.3 に示すプロセスでアニールが行なわれた．アニール中は 900 °C において両ウエハとも 1 , 3 , 10 , 20 , 60 分間温度を保持された．シリコンは約

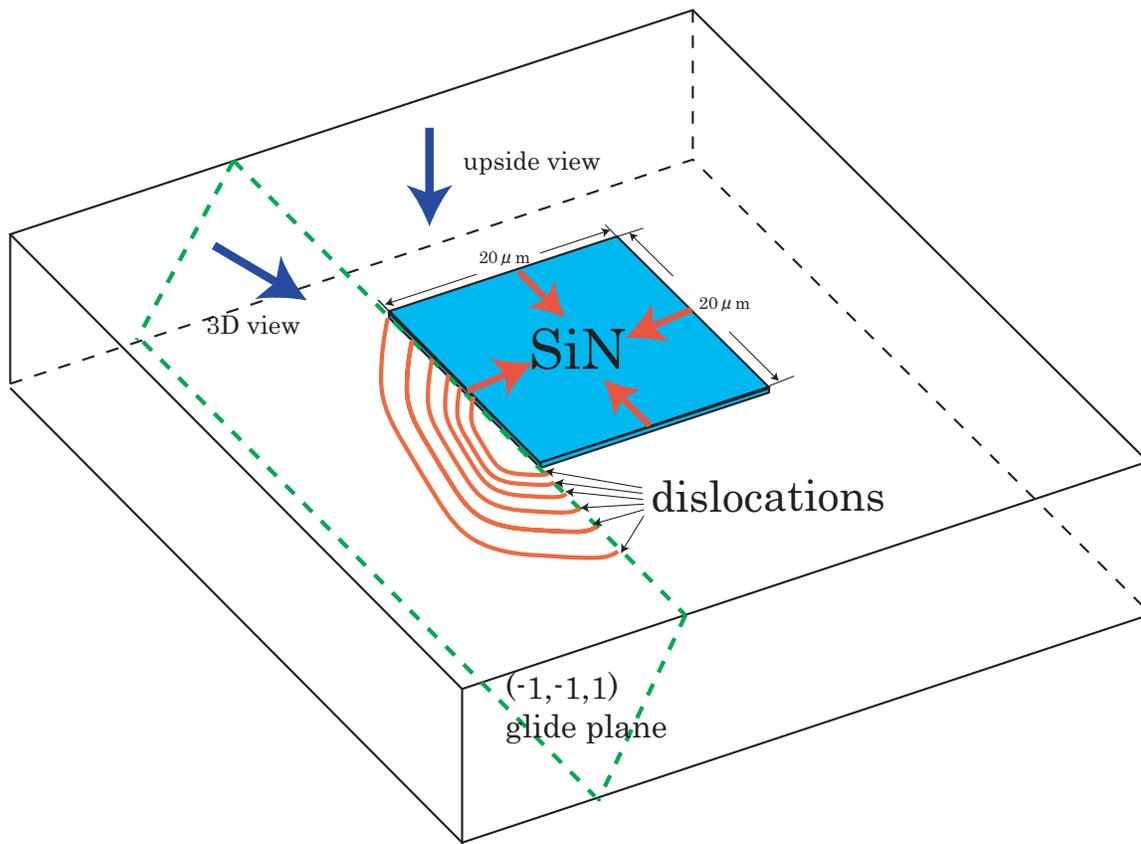


Fig. 3.1 Schematics of SiN thin film pattern and expected dislocation loop configurations.

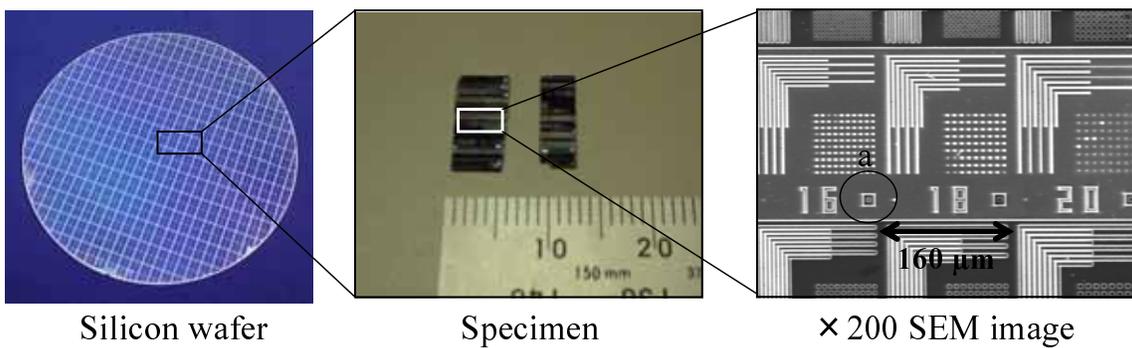


Fig. 3.2 Picture of specimen cutting from silicon wafer and SiN thin film pattern (×200, SEM).

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. 3.4 に示す。左側の

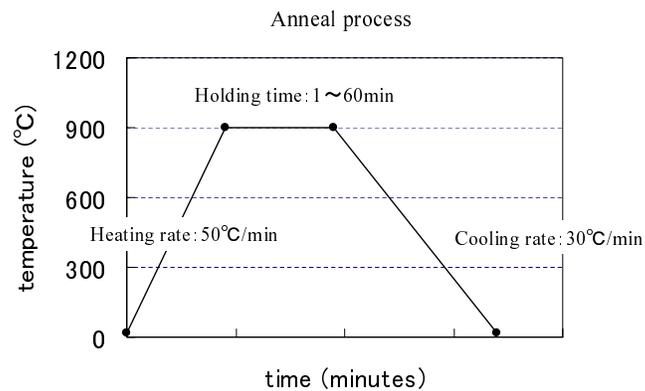


Fig. 3.3 Process of annealing specimen.

写真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。

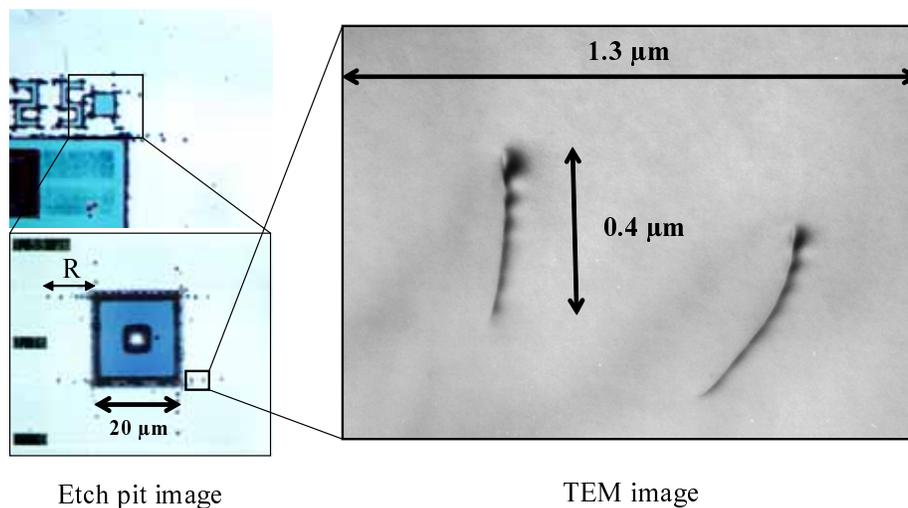


Fig. 3.4 Etch pit and TEM image of generated dislocations near the SiN square pad.

3.3 転位動力学解析と考察

転位動力学解析においては入力データとして外部荷重による空間の応力分布が必要となる。有限要素法を用いて応力解析は行なわれた。この過程は文献 [1] に詳しい。ここでは省略する。

転位動力学解析に当たって材料物性値はシリコンの物性値を用いる。すなわち縦弾性係数 $\mu = 60.5$ [GPa], ポアソン比 0.28 として解析を行なう。また CZ ウエハ, FZ ウエハの酸素濃度をそれぞれ 8.0×10^{17} , 1.0×10^{16} [atoms/cm³] として解析を行なう。また手法の高速化のため 2.2.3 で取り上げたハイブリット法を用いて計算を行なう。Force Methods と Differential Stress Methods は素片長 80 ~ 100 [nm] で滑らかに線形に補間される。Fig. 3.4 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, 発生位置は応力集中が起きている SiN 薄膜角部とする。実験で観測された発生転位の本数が 6 本であったため, 転位発生本数を 1, 3, 6 と変化させ解析を行なう。3 次元形状において転位発生条件の定量化については未だに不明の点が多いため今研究では初期に無視可能な程度の時間差を設けて全ての転位を発生地点に配置することで対応する。

3.3.1 転位形状

一例として CZ ウエハ中に 1 本の転位が発生した場合の時間発展の様子を Fig.3.5 に示す。転位線は等シミュレーションステップ間隔でプロットしてある。また上面図の方向が意味する視覚方向は, Fig.3.1 に図示している。SiN 薄膜と基板の接線には膜厚と真性応力に比例する強い力が作用するため, SiN 角部に発生した転位は初期運動において, 発生地点から SiN 薄膜と基板の接線方向に急激に進み, その後駆動力存在する方向にゆっくりと進行する様子が分かる。



Fig. 3.5 Propagation of a dislocation in the CZ wafer under large share stress caused by the SiN thin film. Snapshots are plotted by the same number of computational step with upside view.

発生転位数 1 の場合

Fig.3.6 に発生転位数を 1 とした場合のある時刻における転位のスナップショットを分解せん断応力の分布と共に示す。視点は Fig.3.1 の 3D-view にとる。(a)(b) はいずれも CZ ウエハを仮定した場合の初期の運動状態 (a)(21[msec]) の転位形状, 及び停止状態の (b)(0.16[sec]) 転位形状である。また (c)(d) はいずれも FZ ウエハを仮定した場合の解析結果である。(c) は 21[msec] 後の比較的初期の運動状態であり,(d) は 143[sec] 後における停止状態の転位形状である。(a)(c) を見比べると膜端の強い応力によって転位が駆動している間は酸素による基板固着の影響が全く現われていないことが分かる。酸素の基板固着は膜端から離れた弱い応力場中の運動には大きな影響を及ぼす。CZ ウエハ中での (b) では 0.16[sec] に酸素固着によって運動が完全に止まってしまうのに対して,(d) では酸素固着による影響は現われず, 分解せん断力が 0[MPa] の等高線付近で停止している。これは停止形状にほとんど曲率が現われていないため張力もほとんど作用していないためと考えられる [1]。(e) に CZ ウエハ (点線) と FZ ウエハ (実線) の停止形状の違いを示す。両者の形状は拡張の度合いがかなり異なっており, 基板の性質の違いがシミュレーションに反映されていることが分かる。

発生転位数 6 の場合

Fig.3.7 に実験と同じ発生転位数を 6 とした場合のある時刻における転位のスナップショットを分解せん断応力の分布と共に示す。視点は先ほど同様に Fig.3.1 の 3D-view にとる。(a)(b) はいずれも CZ ウエハを仮定した場合の初期の運動状態 (a)(27[msec]) の転位形状, 及び停止状態の (b)(4.7[sec]) 転位形状である。また (c)(d) はいずれも FZ ウエハを仮定した場合の解析結果である。(c) は 27[msec] 後の比較的初期の運動状態であり,(d) は 59.4[sec] 後における停止状態の転位形状である。(a)(c) を見比べると先ほど同様膜端の強い応力によって転位が駆動している間は酸素による基板固着の影響が全く現われていないことが分かる。酸素の基板固着は膜端から離れた弱い応力場中の運動には大きな影響を及ぼすことは先ほどと同様である。今回は転位本数が 6 本となることで転位間相互作用が働く。今回の (b)(d) と Fig.3.6 の (b)(d) を比較すると, 転位数 6 本とした場合にはより発生地点に近い内側から押し寄せる後続の転位に押し出される形で駆動力が負, つまり転位が縮む方向に作用する基板内部領域へと先頭の転位が移動している様子が分かる。

TEM 写真 [1] との比較

Fig.3.8 に実験の転位先端を捉えた TEM 写真 [1](b) と FZ ウエハにおいて転位数を 6 発生させた場合の停止形状の TEM 写真に対応する部位 (b) の比較を示す。両者は曲率をもつ形状が

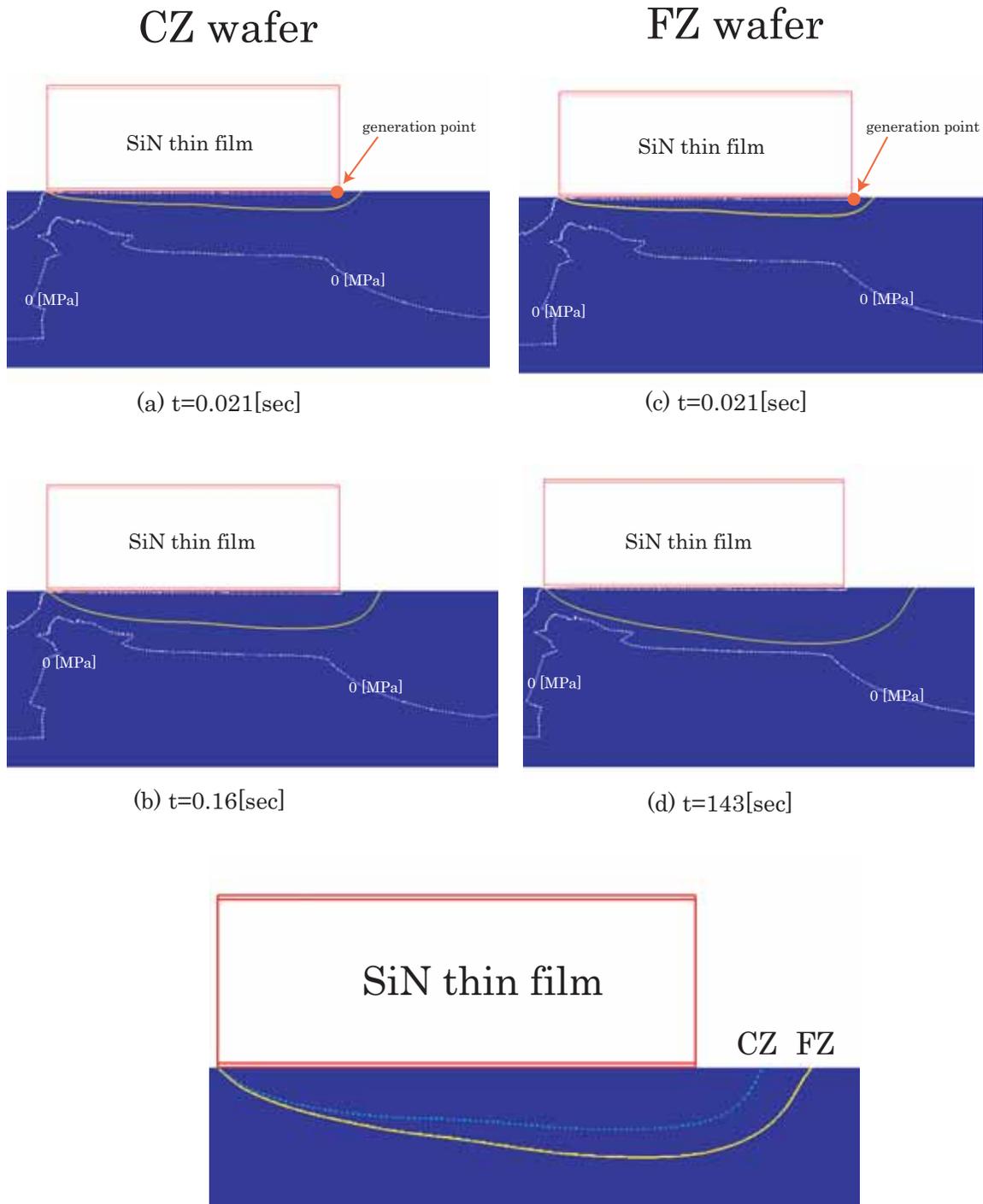


Fig. 3.6 (a)(b)(c)(d) Snapshots of simulation result of dislocation configuration (solid line) (a)(b) in CZ wafer and (c)(d) in FZ wafer from 3D view when only one dislocation generates at the generation point. Resolved shear stress iso-contours are plotted in dash line. (e) Comparison of the stationary configuration of the dislocation in CZ wafer with in FZ wafer.

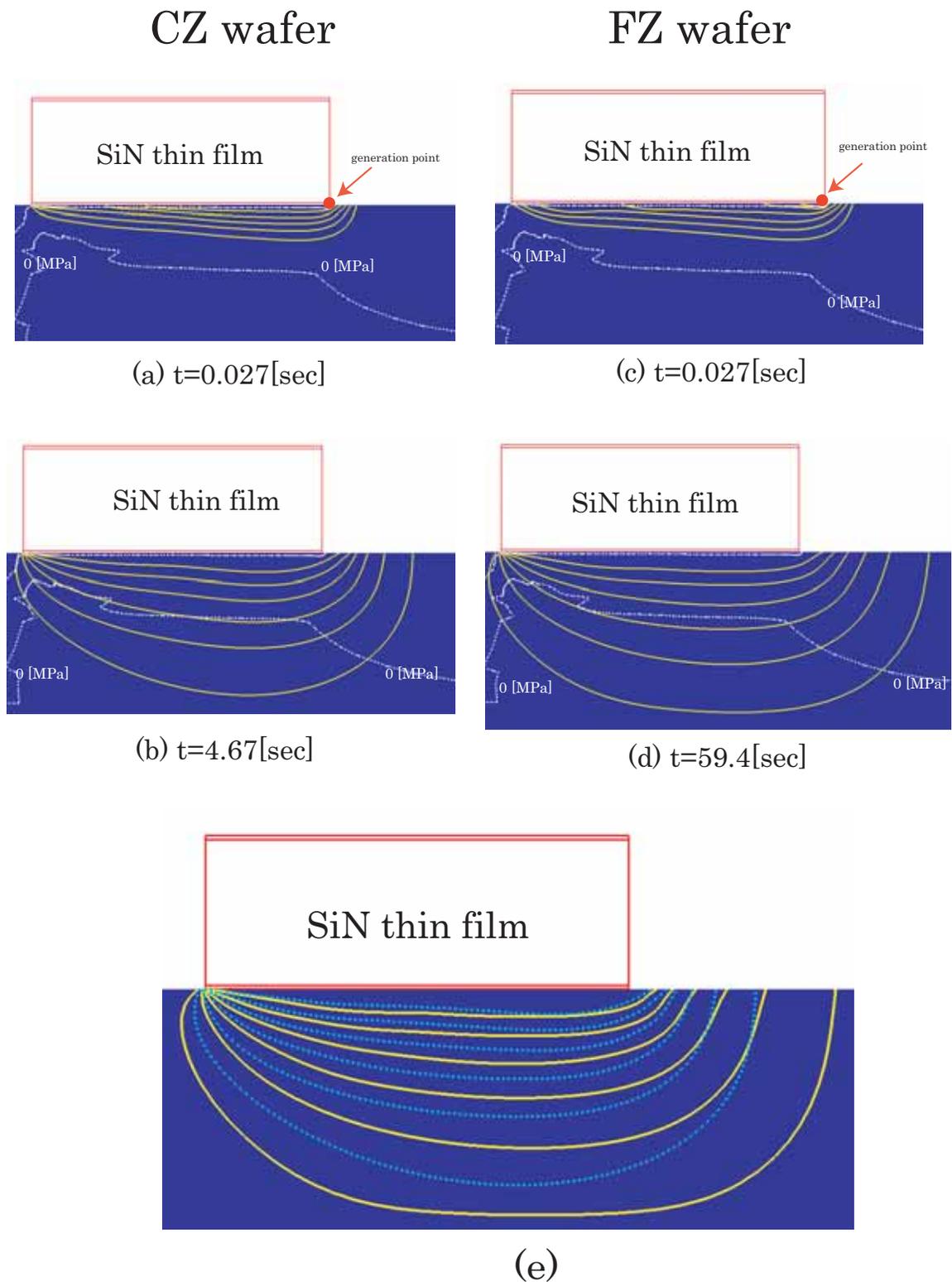


Fig. 3.7 (a)(b)(c)(d) Snapshots of simulation result of dislocation configuration (solid line) (a)(b) in CZ wafer and (c)(d) in FZ wafer from 3D view when 6 dislocations generate at the generation point. Resolved shear stress iso-contours are plotted in dot line. (e) Comparison of the stationary configuration of the dislocations in CZ wafer with in FZ wafer.

ほぼ一致している．この照合結果から転位のすべり系の仮定等が妥当であることが間接的に示されたと考えることができる．

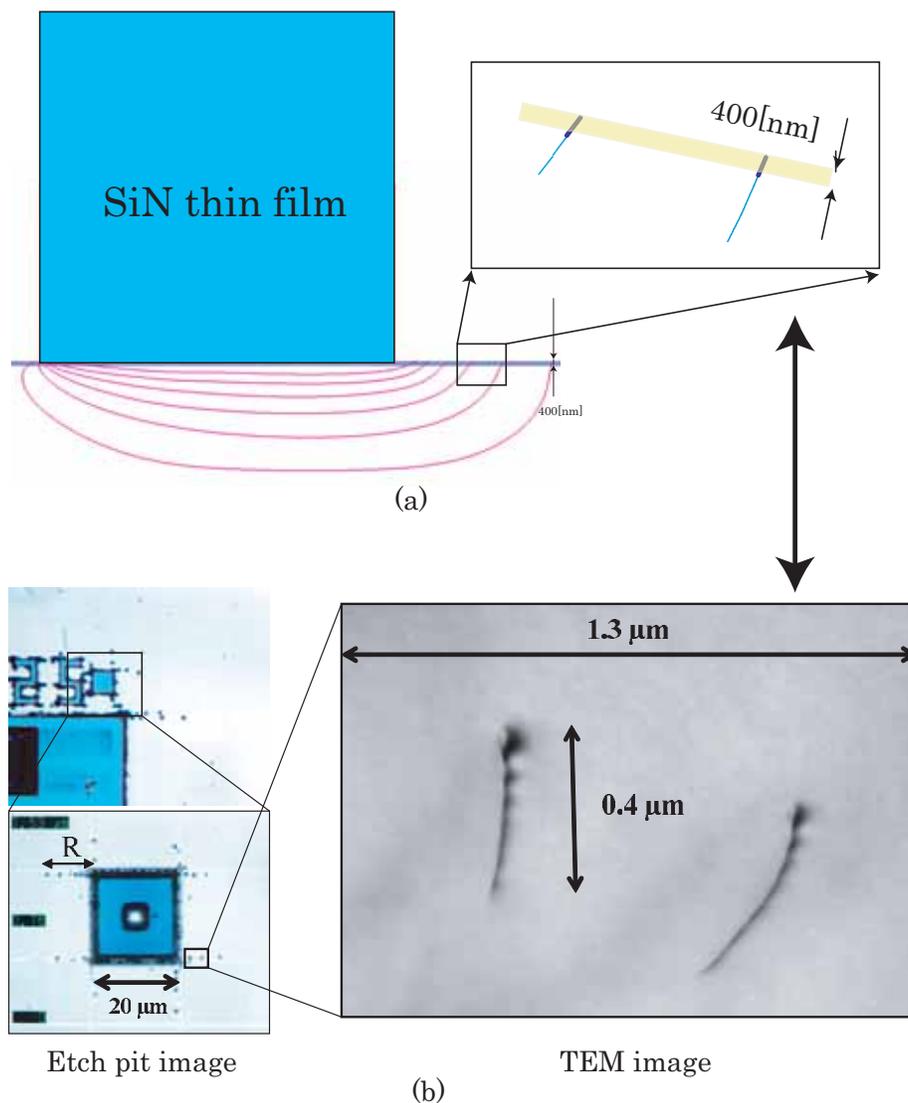


Fig. 3.8 Comparison of (a) the simulation result of 6 dislocations in FZ wafer with (b) the TEM image [1].

3.3.2 SiN 角部からの転位移動距離

両ウェーハにおける転位端の SiN 角部からの距離を実験結果とともに時刻暦に対してプロットしたものが Fig.3.9(a) である．FZ ウェーハの実験と転位数 6 の解析は $10^1 \sim 10^2$ [sec] 付近の値で完全に一致した．解析がこの近辺で完全に停止するのに対し，実験結果では移動距離はさらに増加する．この違いは，目視では観測できなかった微小の転位ループがさらに角部

付近に存在し存在し，外側のループを反発力で押し出すためであると考えられる．実際先に検討したように解析結果において転位数が1, 3, 6と増加し内側の転位からの反発力が強まるにつれ停止位置は角部からより離れるという傾向がグラフに明確に現われている．

今研究では転位の発生条件について定性的に初期条件として与えているが，転位動力学としてより厳密な定量的な評価を行なうには発生条件にも定量的な評価を加える必要がある．実験と解析のカーブが一致しないこともこの点に問題があると考えられる．すなわち解析では，初期値として全ての転位の発生を仮定しているのに対し，実験では発生条件によって時間差をもって転位が発生していると考えられる．

また酸素濃度のより高く摩擦力の強いCZ ウェーハの結果は実験に比べ解析では 10^0 [sec] 秒付近で完全に平衡に達し，実験と一致しない．この違いは，実験ではアニールの時間が長くなるにつれ，酸素が基板から外方拡散により抜けてしまうため基板の性質がFZに近づくためと考えられる．実験でも 10^4 [sec] 近辺ではCZとFZの転位位置はほぼ一致し，酸素の影響が消滅していると考えられる．

Fig.3.9(b) は先端移動速度を時間を横軸にプロットしたものである．解析結果においてはCZ ウェーハでは基板の酸素固着効果によりある速度以下になった場合に転位は強制的に停止してしまう．これに対してFZ ウェーハでは駆動力と張力が釣り合う形で進行停止状態に入るため，振動が現われる．また実験結果においては距離における議論にもあったようにCZ ウェーハの移動速度は低下せずにほぼFZ ウェーハと同様に移動し続ける．この結果もまた外方拡散の可能性を示唆していると考えられる．

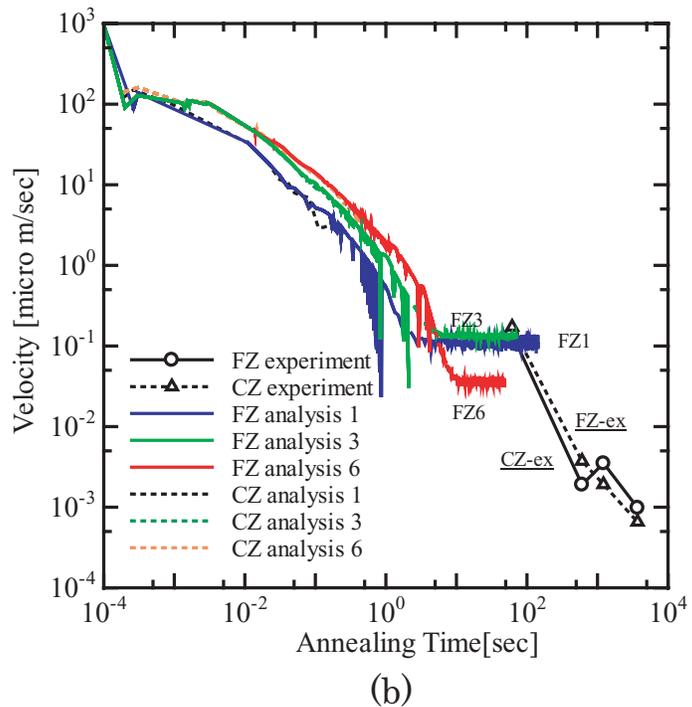
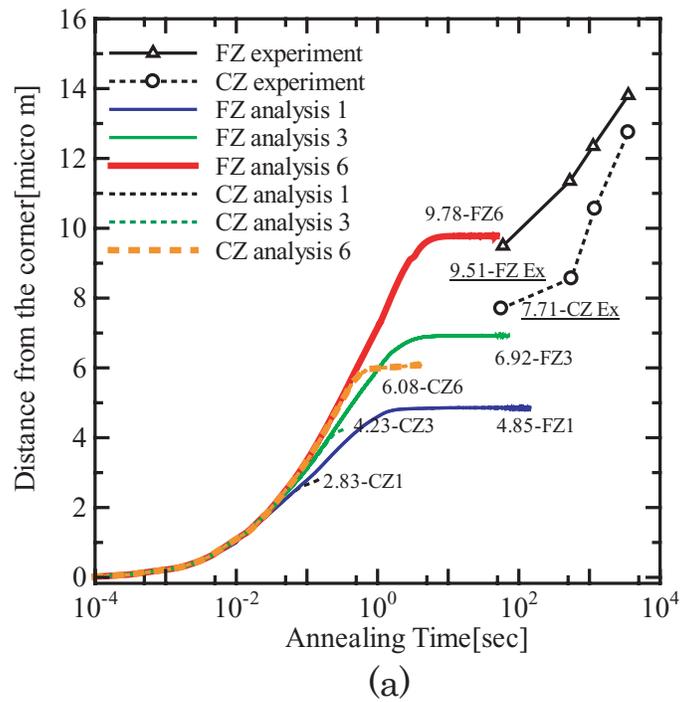


Fig. 3.9 Time history of (a)the coordination or (b)velocity of the first dislocation. Experiment results and simulation results involving 1, 3 and 6 dislocations are shown .

3.4 結言

転位動力学解析コードの高速化により 10^{-6} [sec] オーダーの転位の発生現象から 10^2 [sec] オーダーの転位の成長現象までを扱うことが可能となった。転位の発生条件の定量化については今後の課題である。

第4章 イオンインプラネーション起因転位への適用

4.1 緒言

前節では応力起因の転位発生について取り扱った．本節ではイオンインプラネーションが引き金となって発生する転位について議論を行なう．イオンインプラネーションは目的とする不純物イオンを 50 ~ 300[keV] 程度に加速して任意の領域に打ち込むことにより，デバイスの設計通りの不純物のプロファイルを正確に実現可能である．MOS トランジスタの閾値電圧の制御，ソースドレインの形成，アイソレーションなど半導体製造技術には不可欠の技術である．

しかしながら入射イオンのエネルギーはシリコン格子の結合エネルギー 13[eV] と比較してはるかに大きく，その結果として基板結晶の原子を格子点からはじき出して結晶欠陥を発生する．従ってイオン注入後結晶欠陥の回復と打ち込んだイオンの電気活性度を向上させるためにアニールを行なう．アニール中に転位が発生し，一度発生した基板内に存在する応力場に依存して運動し，不良素子を生みデバイスの歩留まりを下げる．

今論文では土屋ら [10] によって行なわれたイオンインプラネーション起因の転位発生実験に対して分子動力学 転位動力学を用いて転位の発生・運動に関する解析を行い，メカニズムを解明することを目的とする．

4.2 PED 発生に対する仮説

解析対象とする土屋らの実験の概略を Fig.4.1 [10] に示す．単結晶シリコン (c-Si) 基板に応力緩和用の熱酸化膜を引き，CVD 法によって SiN 薄膜が Line and Space と呼ばれる形状に形成される．このとき膜の真性応力により引っ張り応力が基板に作用する．後に真性応力が転位の駆動力として作用する．(a) では上記の基板に As^+ をイオンインプラネーションする．イオンインプラネーションによってアモルファス層 (a-Si) が形成される．イオンインプラネーション後構造緩和のためアニールを行なう．(b) アニール初期にアモルファスと結晶界面に End of Range (EOR) 転位 [20, 21] が生成する．EOR 転位は結晶欠陥回りに存在する転位であるため，不動転位である．(c) アニール中期において EOR 転位からすべり転位が発生する．

(d) 発生したすべり転位は成長しながら SiN エッジ端に堆積し, Pattern-edge dislocation (:PED) として成長を続ける. 今研究ではエッジ端に堆積する以前のすべり転位を Pre-PED と呼んで区別する. (e) ある程度の大きさに成長した PED はエッジ端から射出され, 基板内部に侵入する.

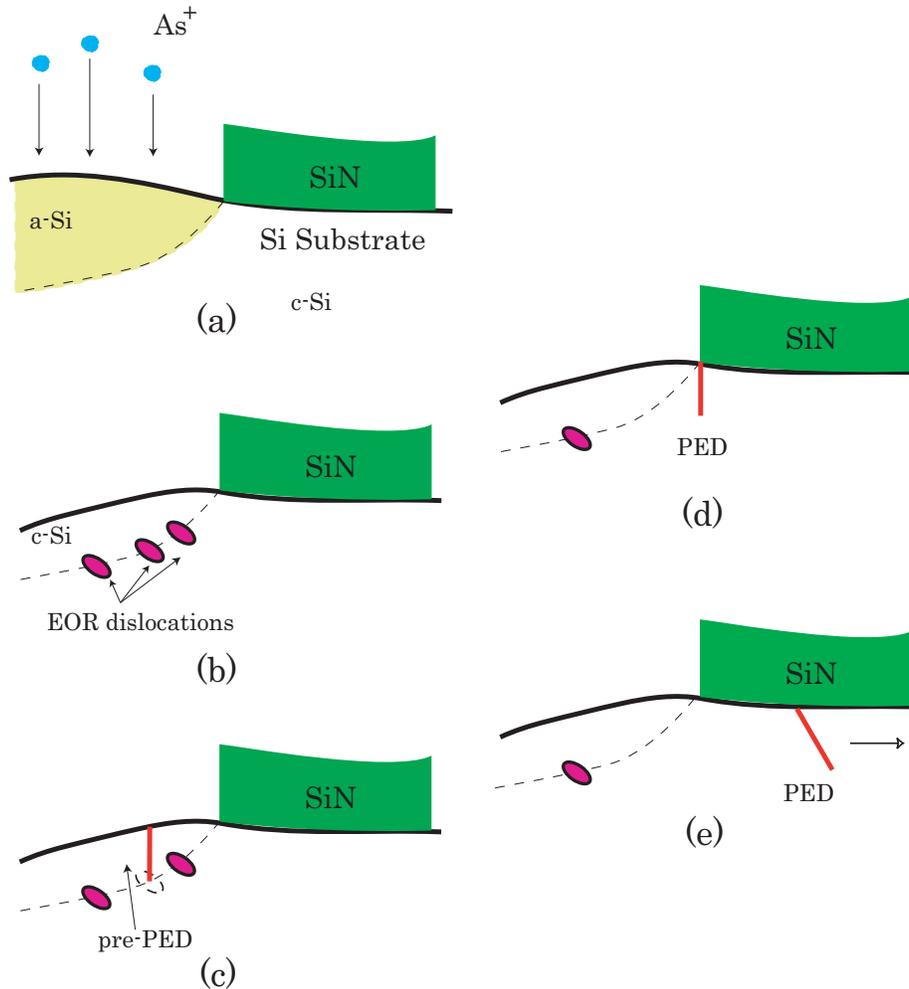


Fig. 4.1 Generation and growth mechanism of dislocations:(a)after implantation (b)during anneal(first stage),(d)during anneal(second stage) (d)during anneal(middle stage) (e)during anneal(final stage) [10].

実験結果の TEM 画像を Fig.4.2 に示す. Fig.4.2(a) は 900 °C アニールを 10 分行なった場合の試験片の上面 TEM 写真であり, Fig.4.1(b) の EOR 転位が生成した段階にあたる. Fig.4.2(b) はアニール時間を 60 分とした場合の実験結果である. これは Fig.4.1(e) の段階にあたり, エッジ端から $1[\mu m]$ 程度に成長した PED が射出される様子が示されている.

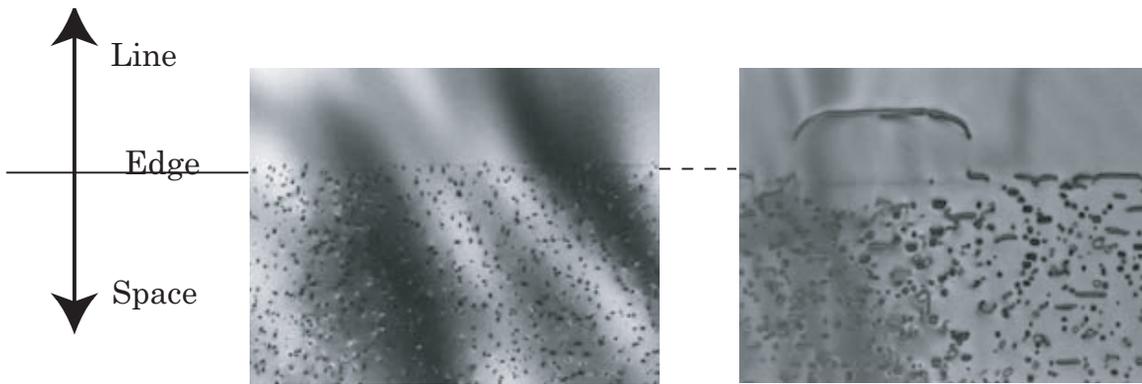
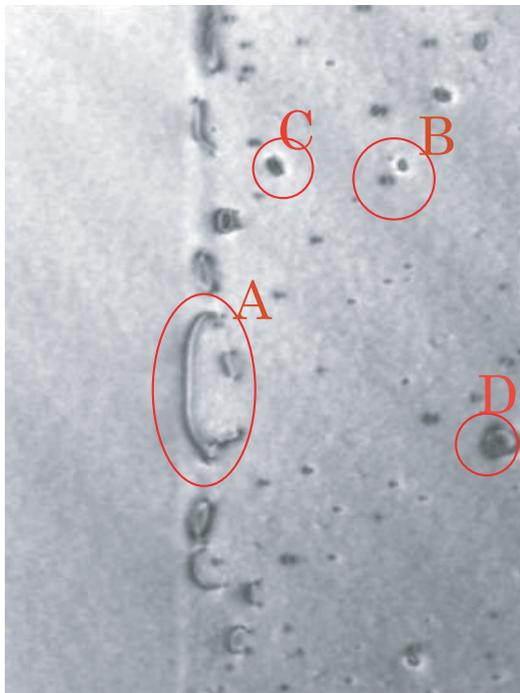


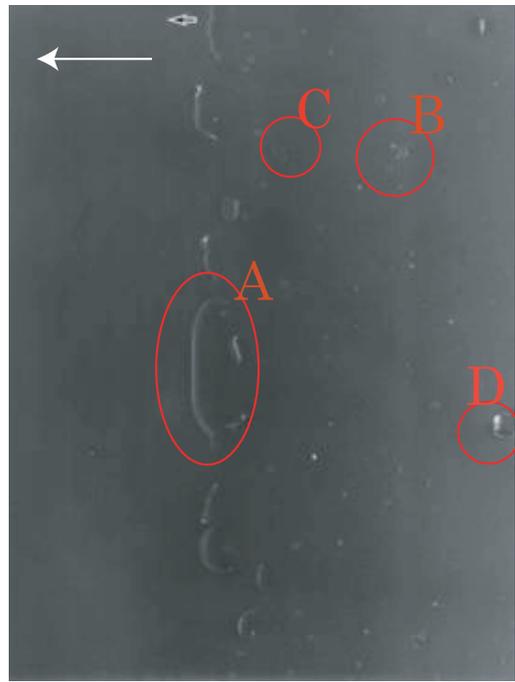
Fig. 4.2 TEM image of dislocation characteristics during annealing. Annealing condition is (a)10[min],900[$^{\circ}\text{C}$]; (b)60[min], 900[$^{\circ}\text{C}$] [10].

TEM 暗視野画像を用いて回折方向とブラッグの条件から、発生した転位のバーガーズベクトルの方向を定めた。Fig.4.3 に用いた (a)TEM の明視野画像と (b)~(d) のそれぞれ回折方向 $[2, 2, 0]$, $[\bar{2}, 2, 0]$, $[0, 4, 0]$ の TEM 暗視野画像を示す。回折方向は図中に矢印で示す。ブラッグの条件より回折方向とバーガーズベクトルの方向の内積が 0 になるとき転位は画像から消滅する。図中 A は PED であるが、これは回折方向 $[2, 2, 0]$, $[0, 4, 0]$ でははっきりと確認できるのに対して回折方向 $[\bar{2}, 2, 0]$ では消滅する。以上より PED のバーガーズベクトルは $[1, 1, 0]$ であると推測できる。エッジ端に堆積している比較的大きな転位には全て同様の傾向を示すため、PED に成長した転位のバーガーズベクトルは $1/2 \langle 1, 1, 0 \rangle$ と考えられる。それに対して EOR 転位と思われる転位のバーガーズベクトルは特定不可能である。例えば図中 B は回折方向 $[2, 2, 0]$ で比較的是っきりと確認できるのに対して回折方向 $[\bar{2}, 2, 0]$ では不明瞭である。このことからバーガーズベクトルの方向は $1/3[1, 1, 1]$, $1/2[1, 1, 0]$, $1/11[1, 1, 3]$ などが推測できる。図中 C は回折方向 $[\bar{2}, 2, 0]$, $[0, 4, 0]$ で比較的是っきりと確認できるのに対して回折方向 $[\bar{2}, 2, 0]$ では消滅する。このことからバーガーズベクトルの方向は $1/3[1, \bar{1}, 1]$, $1/2[1, \bar{1}, 0]$, $1/11[1, \bar{1}, 3]$ などが推測できる。図中 C は全ての回折方向で比較的是っきりと観察できる。このことから面上の析出物などではなく立体形状をしている可能性も存在する。

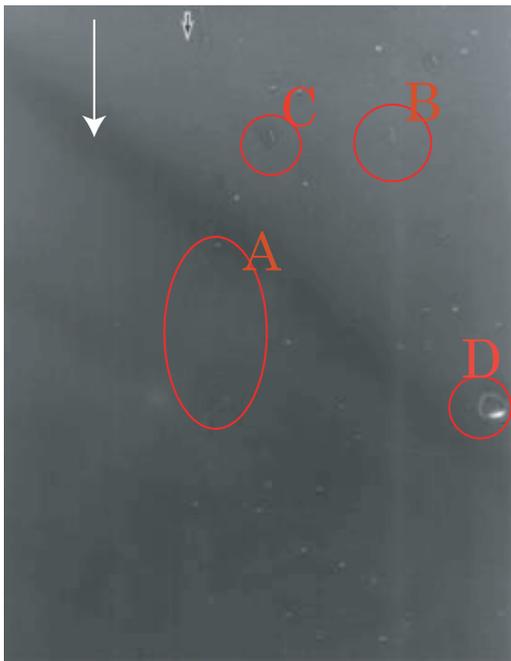
以上の TEM 暗視野解析及びイオン種は異なるものの同様な実験を行なった文献 [19, 20] を参考に、今研究では析出物である EOR 転位からの転位発生に対してフランク部分転位の unfaulting 反応を仮定した。unfaulting 反応とは概念的には Fig.4.4 に示す様に (a) 積層欠陥を囲むフランク部分転位中において、(b) 積層欠陥中にショックレー部分転位が発生し、ショックレー部分転位が拡張することで、(c) 最終的に積層欠陥縁でフランク部分転位とショックレー部分転位が反応することで完全転位が発生する反応である。なお以上の反応で発生する完全転位は滑り面に対してバーガーズベクトルが平行でないためプリズマテック転位ループの一種



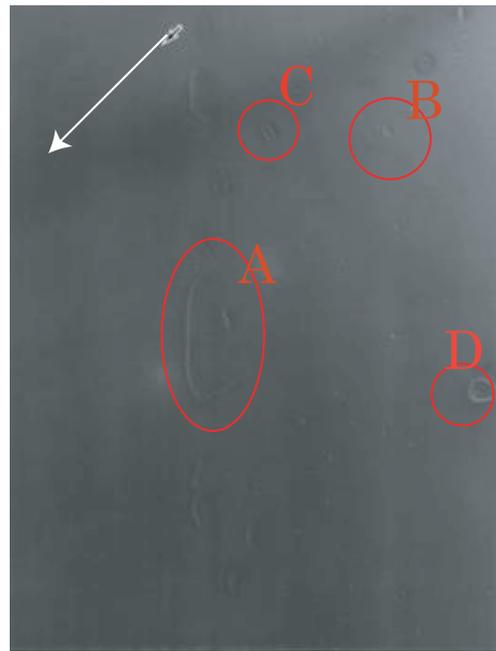
(a) Bright Field



(b) Dark Field $\langle 2, 2, 0 \rangle$



(c) Dark Field $\langle -2, 2, 0 \rangle$



(d) Dark Field $\langle 0, 4, 0 \rangle$

Fig. 4.3 (a)TEM bright field image. (b)(c)(d)TEM dark field image. (b) $\langle 2, 2, 0 \rangle$ (c) $\langle \bar{2}, 2, 0 \rangle$ (d) $\langle 0, 4, 0 \rangle$.

であり、すべり面内方向に”すべり (sliding/gliding)”によって拡張することはない。

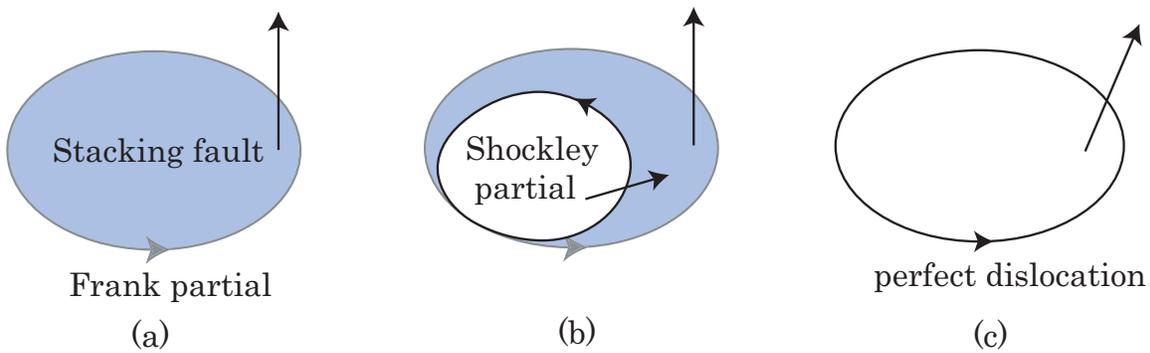


Fig. 4.4 Schematics of unfaulting of an intrinsic-type Frank partial. Nucleation and growth of a Shockley partial within a faulted Frank sessile loop. (a) initial state (b) middle stage (c) final stage.

イオンインプラントによって生成する格子間シリコンは、構造緩和用のアニール中に凝集して積層欠陥ループを内部に持つエクストリンシック型フランク部分転位を形成する。Panら [20] の論文にあるようにフランク部分転位はシリコンの4つの面全てで形成される可能性があるため、バーガースベクトルの方向として $1/3[1, 1, 1]$, $1/3[\bar{1}, \bar{1}, 1]$, $1/3[1, \bar{1}, 1]$, $1/3[\bar{1}, 1, 1]$ が想定され TEM 暗視野の観察結果と一致する。以後便宜的に $1/3[1, 1, 1]$ を例にとって説明する。熱振動や SiN 薄膜からの応力場が作用することによって、フランク部分転位は次式で定義される unfaulting 反応が起こる。この際に起こる unfaulting 反応は先の空孔が集まることによって形成される intrinsic 型フランク部分転位の unfaulting 概念図 Fig.4.4 とは若干異なり、積層欠陥中を2本のショックレー部分転位が移動することにより完全転位に変化する。この反応は次式で表現することが可能である。

$$\frac{1}{3}[1, 1, 1] + \frac{1}{6}[2, \bar{1}, \bar{1}] + \frac{1}{6}[\bar{1}, 2, \bar{1}] \rightarrow \frac{1}{2}[1, 1, 0] \quad (4.1)$$

完全転位は前述するようにプリズマテック転位ループであるが、上昇運動などを起こすことによって Fig.4.6 に示すようなすべり転位である Pre-PED を形成する。フランク不動転位は確率的に4つの滑り面すべてで発生しうるが、基板中に SiN 薄膜真性応力起因の応力場が存在することによって、(1, 1, 1) 面上での unfaulting 過程やその後の成長過程が他の3つのすべり面上よりも高い確率で起きた結果として TEM 写真 Fig.4.2 に見られるような PED が構成されると考えられる。またすべり転位である Pre-PED および PED の形状であるが、次に列挙する理由により、Fig.4.6 のような2つのすべり面にまたがる V 字形状を仮定することとする。

1. TEM 暗視野での観察からバーガースベクトルの方向は $\frac{1}{2}[1, 1, 0]$ と決定できること

2. Fig.4.2(b) より PED はすべり転位でありその運動方向が $[1, 1, 0]$ であること
3. すべり転位であるためには滑り面に対してバーガースベクトルが平行である必要があり, その要求を満たす滑り面は $(\bar{1}, 1, 1), (1, \bar{1}, 1)$ であること
4. Fig.4.5(a) は断面 TEM 写真であるが, PED (Pre-PED) は深さ方向に変化することなしに平行に移動する. このことから第3章の SiN 薄膜真性応力起因転位のように滑り面1つの単純な形状の転位ではないこと

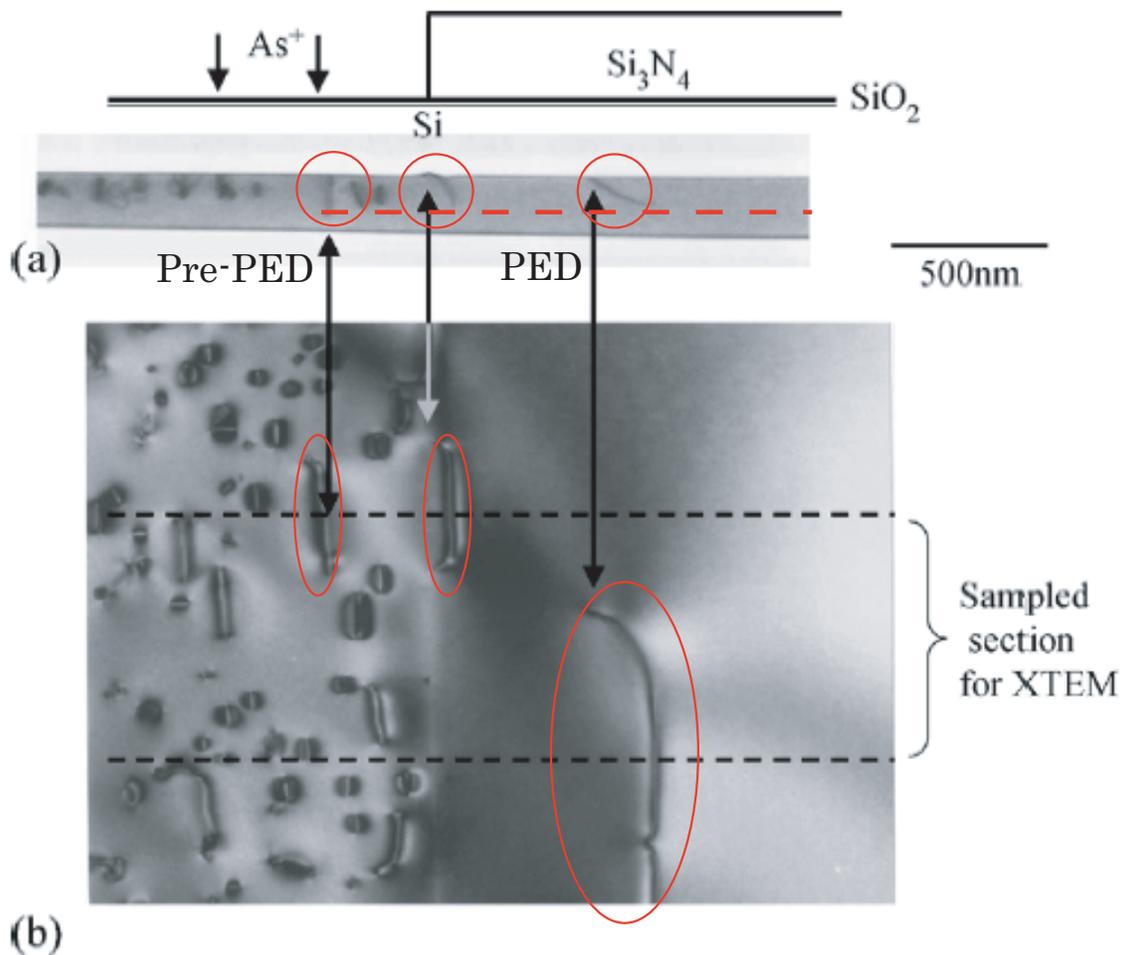


Fig. 4.5 TEM image of PED. (a)cross sectional view (b)plane view.

以上をまとめ, 本節の結論として以下のような土屋らの実験 [10] における転位発生過程に対して次に示すような仮説を立てる.

1. SiN(Si₃N₄) 薄膜が形成されていない Space 部に As⁺ がイオンインプラネーションさ

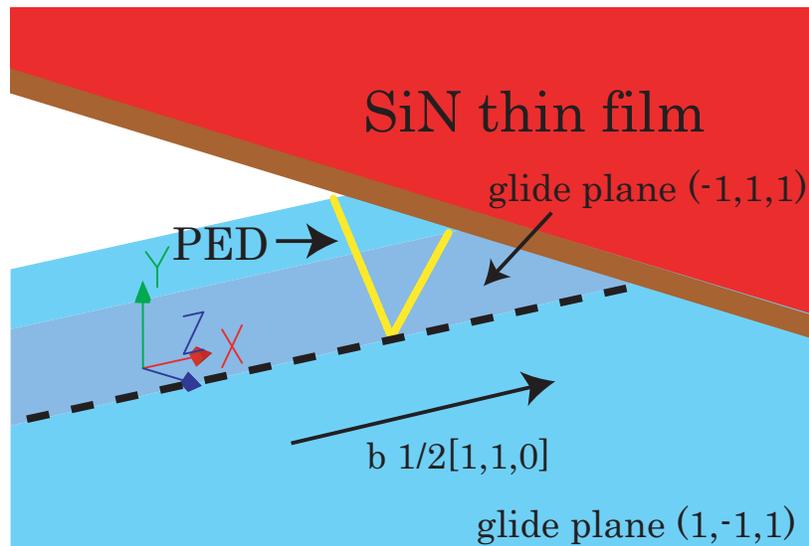


Fig. 4.6 Schematics of a PED with its slip system.

れ, As^+ によって弾き出された格子間シリコンによりアニール初期において EOR 転位が生成する.

2. EOR 転位は, 滑り方向 $[1,1,1]$ のフランク部分転位であり, EOR 転位が unfaulting することにより, 滑り方向をもつ $1/2[1,1,0]$ Pre-PED が生成する.
3. Pre-PED 同士の相互反応や EOR 転位との相互反応により, Pre-PED は成長し SiN エッジ端に集積して PED となる.
4. PED は SiN の応力場により射出されることで Si 基板内部に進む.

項目 1 の積層欠陥生成は興味深い内容であるが, 転位生成に直結するものでないため, 今回は解析対象としない. 項目 2 についてはフランク部分転位の unfaulting 反応を分子動力学法を用いて再現する. 項目 3 については転位動力学を用いて相互反応を調べる. 項目 4 については転位動力学を用いて SiN 膜端に置かれた PED 転位運動についての解析を行なう.

4.3 EOR 転位の unfaulting

前節示したように EOR 転位としてフランク部分転位を仮定して解析を行なう．式 4.1 でしめす unfaulting 反応は連続体仮定に基づく転位動力学法では再現することはできない．本研究では連続体的な過程を必要としない分子動力学法を用いて解析を行なう．

4.3.1 積層欠陥モデル

今解析で取り扱う対象はエキストリンシック型の積層欠陥である．エキストリンシック型の積層欠陥は Fig.4.7 に示すものである．ABC はそれぞれ $(1, 1, 1)$ 方向のボンドの占める位置であり，シリコン結晶の正しい積み重ねにおいてはボンドの順序は $\cdots ABCABCABC \cdots$ となる．エキストリンシック型の積層欠陥では順序に乱れが生じ $\cdots ABC|B|ABCAB \cdots$ となる．積層欠陥においてはシリコン原子の 4 面体配位は保たれているものの，ボンドの相対的な配置に乱れが生じる．結晶が完全な部分では 1 本の $[1, 1, 1]$ ボンドで結び付けられた 2 原子の相対配置が Fig.4.8(a) のように $[1, 1, 1]$ ボンド中心に対して点対称の関係にあるのに対して，積層欠陥の部分では (b) のように鏡像対称の関係になっている．

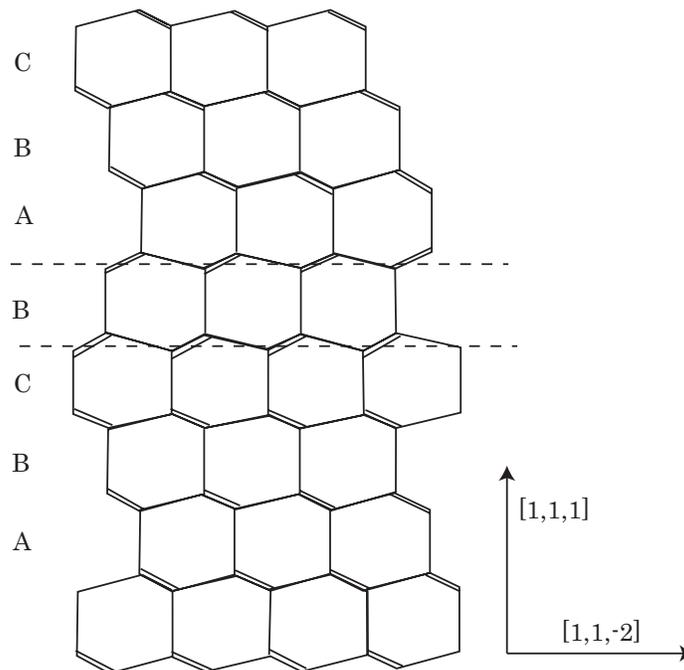


Fig. 4.7 Extrinsic-type stacking fault projected on $(\bar{1}, 1, 0)$ plane [11].

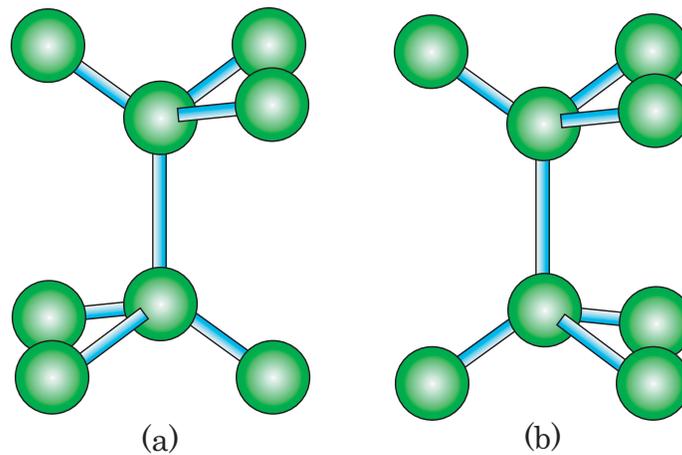


Fig. 4.8 Bonding pattern in crystal silicon. (a)Perfect crystal; (b)stacking fault

Table 4.1 The region size and the number of the atoms in the simulation cell .

Number of Atoms	98308
Model Size	
x[nm]	15.3
y[nm]	9.41
z[nm]	13.3

4.3.2 解析条件

今回対象となる実験環境ではフランク部分転位に作用する外的作用は、主として熱振動や SiN 薄膜からの応力場であり、分子動力学計算においても可能であれば、外力を作用させずに熱振動のみで反応を起こすことが望ましい。また文献 [19] によるならば、シリコンにおいて完全転位の状態の方がフランク部分転位よりも安定に存在するのは析出物半径が 57.3[nm] 以上になった場合である。実験 [10] の EOR 転位の半径平均が 45[nm] 程度であったことを考えるなら unfauling が実際に起きている可能性が高い。しかしながら分子動力学法を用いて以上のような転位ループサイズをモデル化して計算するのは計算機的な負荷がかかりすぎるため難しい。そこで今研究では、文献 [66,67] にあるように外部応力を作用させることで unfauling のシミュレーションを行なう。ただし文献 [66,67] では対象が金属であるのに対して、シリコンはパイエルス応力が金属に比べ大きく転位が動きにくいいため、文献 [57] 参考に 10 ~ 20% ひずみを与えて解析をおこなう。2.3.3 で検証を行なった結果から原子間ポテンシャルは SW ポテンシャルを用いる。Fig.4.9 に解析モデルを図示する。

積層欠陥を構成する格子間シリコンの数は 715 であり、析出物半径は $7a_0 = 3.8[\text{nm}]$ であり、その他領域サイズ等は Table.4.1 に示す。境界条件は力を作用させる y 方向のみを固定境界条

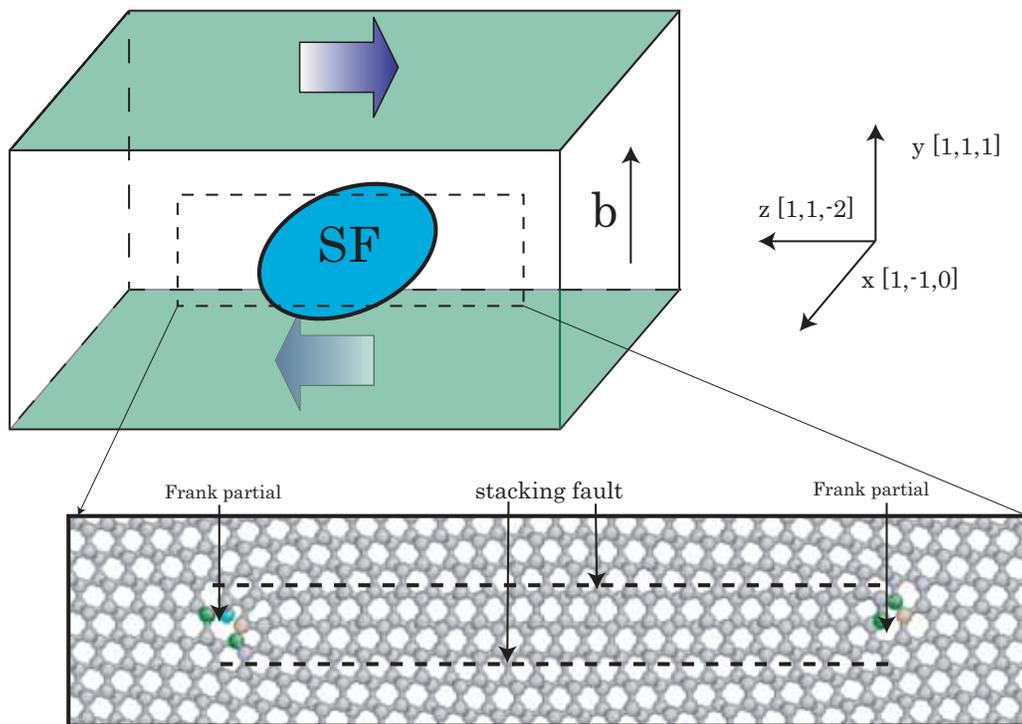


Fig. 4.9 Extrinsic-type stacking fault simulation model. Cross-sectional view of the the stacking fault(two dash lines) is shown.

件とし, x,z 方向を周期境界条件として解析をおこなう。また温度は $0 \sim 900[\text{K}]$ まで変化させて解析をおこなう。

4.3.3 解析結果

unfaulting 反応

解析結果の一例として $300[\text{K}]$, 15% ひずみを与えた解析例を Fig.4.10, Fig.4.11 に示す。なお今解析において初期 $5.4[\text{ps}]$ で $300[\text{K}]$ 昇温させ, 次の $5.4[\text{ps}]$ で 15% ひずみを与えることで解析条件を作り出している。Fig.4.10 は部分転位のバーガスベクトル分滑った原子のみを抽出して描いている。すなわち部分転位が通過した領域の原子が表示されていることになる。Fig.4.11 は Fig.4.10(a) 中の AB 断面を $[1, \bar{1}, 0]$ 方向に投影したものである。エクストリンシック型積層欠陥において存在する2本の積層欠陥は上側, 下側の層をそれぞれ異なる点線で示している。以下に反応の進行を述べる。

1. (a) は初期状態であり, フランク部分転位が示されている。
2. (b) は時刻 $15.1[\text{ps}]$ において $\frac{1}{6}[\bar{1}, 2, \bar{1}]$ ショックレー部分転位の発生を示すものである。

Fig.4.11 下段積層欠陥にショックレー部分転位が発生しているのがわかる．なお Fig.4.11 において上側の積層欠陥上を完全転位が通過しているがこの完全転位は完全に積層欠陥上を通過しきってしまうため、今回着目しているショックレー部分転位の運動には影響はないものと考えられる．

3. (c) は時刻 17.0[ps] において $\frac{1}{6}[\bar{1}, 2, \bar{1}]$ ショックレー部分転位の移動の停止を示す．領域のかなりの部分を掃きだすものの Fig.4.10 に示されているとおり積層欠陥の面積のおよそ半分ほどを移動した時点で停止してしまう．
4. (d) は時刻 22.4[ps] において $\frac{1}{6}[2, \bar{1}, \bar{1}]$ ショックレー部分転位の発生を示すものである．Fig.4.11 上側積層欠陥にショックレー部分転位が発生しているのがわかる．
5. (e) は時刻 24.3[ps] において $\frac{1}{6}[2, \bar{1}, \bar{1}]$ ショックレー部分転位の移動の停止を示す．領域の一部を掃きだすものの Fig.4.10 に示されているとおり積層欠陥の面積のおよそ 1/4 ほどを移動した時点で停止してしまう．Fig.4.11 の積層欠陥右側は完全に unfaulting が起こり、初期状態 (a) にあった上下点線で示された 2 本の積層欠陥が完全に解消され、正常な結晶に戻っていることが分かる．

以上の (a)~(e) により今回着目しているシリコンにおける積層欠陥の unfaulting をシミュレーションにより一部再現することができた．シリコンはパイエルス応力が大きいために、転位を運動させるために今回の例で応力に換算して 9[GPa] 程度の非常に大きな応力を作用させる必要がある．この応力は後述するようにフランク部分転位の半径が大きくなるほど小さくなると考えられる．

Kawado ら [19] はエネルギー的な見地から unfaulting 反応を議論している．円形のフランク部分転位と完全転位の持つエネルギーはそれぞれ次式 [19] のようになる．

$$E_{FL} = \frac{1}{2} \frac{\mu}{1-\nu} b_{FL} r \left[\ln \left(\frac{r}{b_{FL}} + Z \right) \right] + \pi r^2 \gamma_{SF} \quad (4.2)$$

$$E_{PL} \approx 0.95 \frac{1}{2} \frac{\mu}{1-\nu} b_{PL} r \left[\ln \left(\frac{r}{b_{PL}} + Z \right) \right] \quad (4.3)$$

ここで r, Z, γ_{SF} はそれぞれ転位半径、転位芯エネルギーに関するパラメータ、積層欠陥エネルギーであり、 $\mu = 64.1$ [GPa], $Z = 1.8, \nu = 0.215, \gamma_{SF} = 0.06$ [J/m], $b_{FL} = 0.313$ [nm], $b_{PL} = 0.384$ [nm] として値を代入する． $\Delta E = E_{FL} - E_{PL}$ として、さらに $\bar{\Delta E} = \frac{\Delta E}{\pi r^2}$ として単位面積当りのエネルギーを求める．このとき、分子動力学計算で使用した半径 $r = 3.8$ [nm]、及び実験の平均値 $r = 45$ [nm] を代入して計算すると $\Delta \bar{E}_{MD} = -5.5 \times 10^{-3}$ [J/m²], $\Delta \bar{E}_{EX} = -2.1 \times 10^{-4}$ [J/m²] となる．すなわち実験における EOR 転位の半径は解析に用いた半径値よりも 10 倍程度大きく、その結果として単位面積当り $\frac{1}{25}$ 程度のエネルギーでも反応が起こりうることを示している．解

析で与えたせん断応力値が約9.0[GPa]程度であることや実験のアニール温度が900[]と解析条件300[K]に比べ高温であることを考えると、SiN 薄膜真性応力による応力場でも十分に反応が起こりえると考えられる。

4.3.4 すべり転位の射出

今解析では unfaulting を起こすために、外的作用として9[GPa]程度の強い応力を作用させている。このため応力起因で次章で説明するパンチアウト転位のような析出物周りの転位が発生する。Fig.4.12(a)に時刻13.7[ps]において発生するこのような転位を図示する。Fig.4.12はスリップベクトルを用いて転位が通過した原子を表示したもので、赤が完全転位が通過した箇所であり、青が部分転位のバーガースベクトル分滑っている箇所である。13.7[ps]においては、記号A,B,Cで示された3つの滑り転位が発生する。これらのバーガースベクトルはスリップベクトルから $\pm 1/2[1, \bar{1}, 0]$ と判断される。よって発生源が球状析出物と面欠陥という違いこそはあるものの、幾何的にはパンチアウト転位とまさに同一の機構によるものである。今解析では結晶欠陥を仮に面欠陥として仮説を立て議論を行なっているが、TEM 暗視野が示すようにEOR 転位が $1/11[3, 1, 1]$ rodlike defect [21,68]のような立体形状析出物である可能性も捨て切れずパンチアウト転位のような機構でPEDが発生する可能性も否定はできないと思われる。

(b)はバルク原子のエネルギー平均を時間に対してプロットしたものである。0~5.4[ps]において系の温度制御を加えながら0~300[K]まで線形に上昇させているため、系のエネルギーもまた上昇する。5.4~10.8[ps]間は変位制御でせん断ひずみを0~15%まで与えているためやはりエネルギーは上昇する。13[ps]近辺で上記のような完全転位が発生し系に蓄えられたひずみエネルギーを開放するため系のエネルギーは減少している。17[ps]近辺において転位が滑り面全体にいきわたり滑り面全体をバーガースベクトル分だけひずみ方向($[1, \bar{1}, 0]$)にずらすことでひずみエネルギーも解放し系のエネルギーも定常状態になることが分かる。

次に完全転位がショックレー転位の運動に及ぼす影響についてであるが、Fig.4.11の積層欠陥断面図にあらわているように完全転位は積層欠陥中を運動してはいない。一例を挙げれば、Fig.4.12中完全転位BはFig.4.11(b)中の上側の積層欠陥の一層上の原子層を通過しているため通過時を除いては転位相互作用による影響を積層欠陥中に存在するショックレー転位に及ぼさない。完全転位A,Cもまた積層欠陥中に侵入することはない。従って着目しているunfaultingには大きな影響を及ぼしてはいないと考えられる。

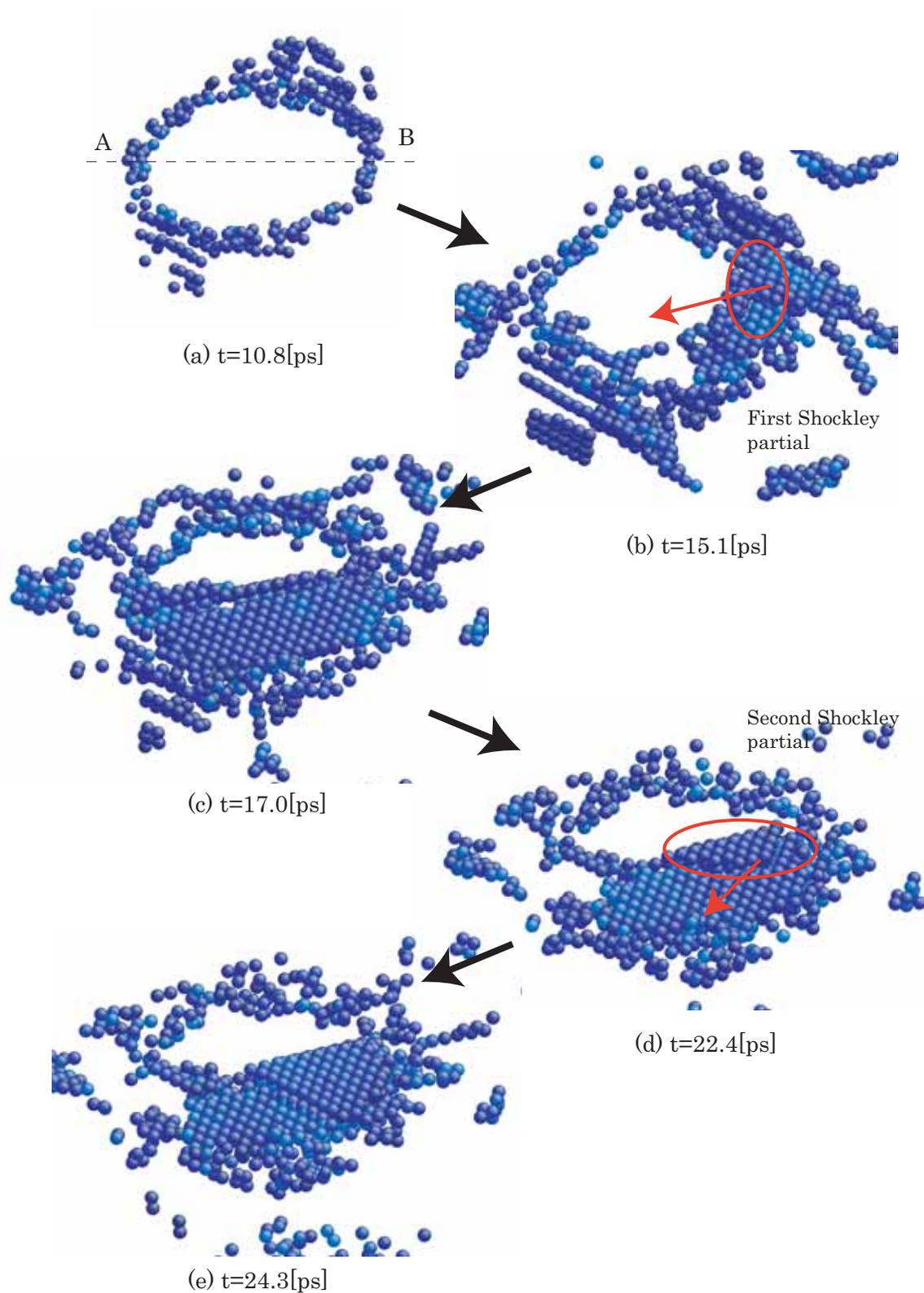


Fig. 4.10 Snapshots of the simulation result. Atoms which have slipped by the norm of the partials' Burgers vector are shown from 3D view point. (a) $t = 10.8[\text{ps}]$: (b) $t = 15.1[\text{ps}]$: (c) $t = 17.0[\text{ps}]$: (d) $t = 22.4[\text{ps}]$: (e) $t = 24.3[\text{ps}]$

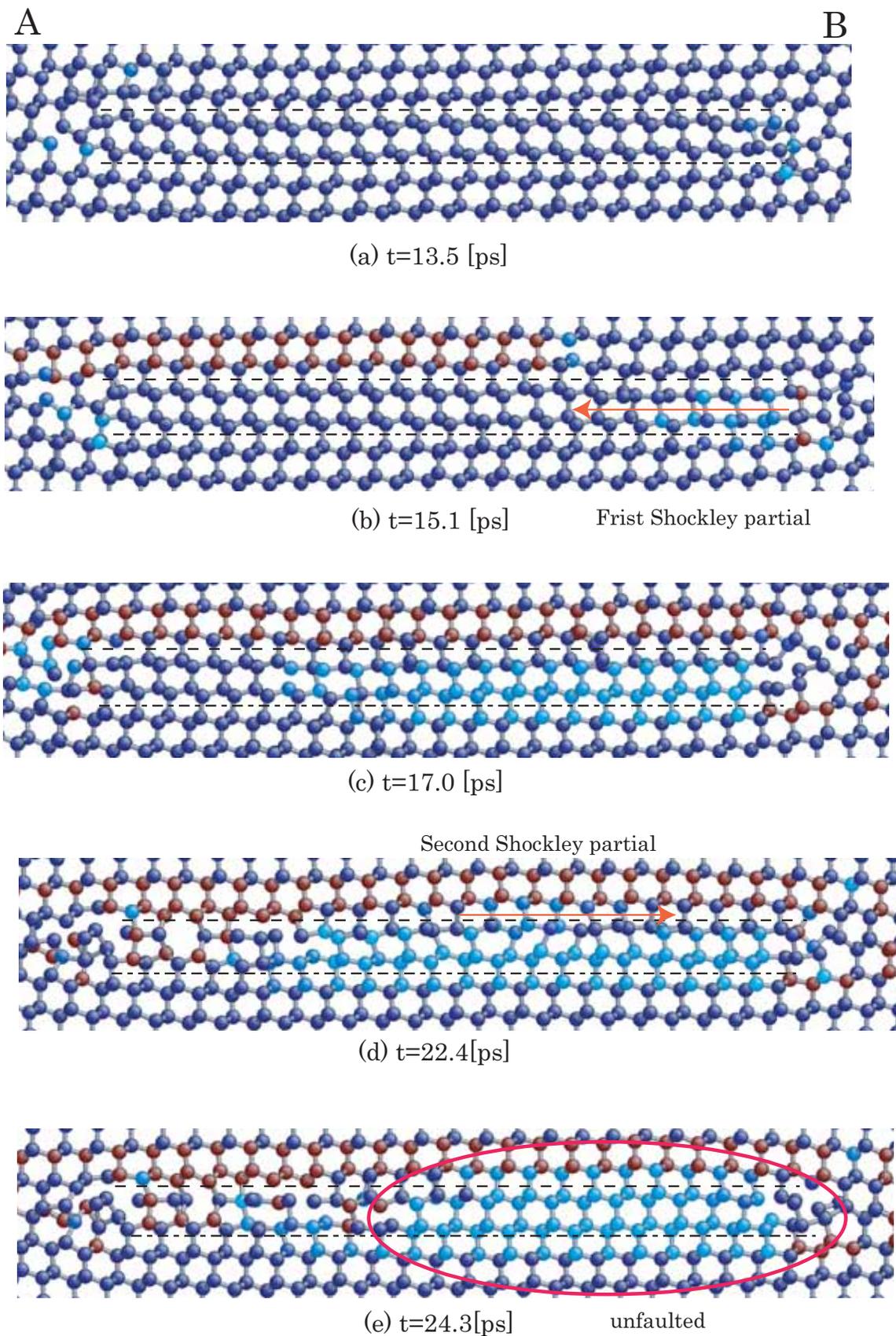


Fig. 4.11 Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector from cross-sectional view (Fig.4.10). (a) $t = 10.8$ [ps]: (b) $t = 15.1$ [ps]: (c) $t = 17.0$ [ps]: (d) $t = 22.4$ [ps]: (e) $t = 24.3$ [ps]

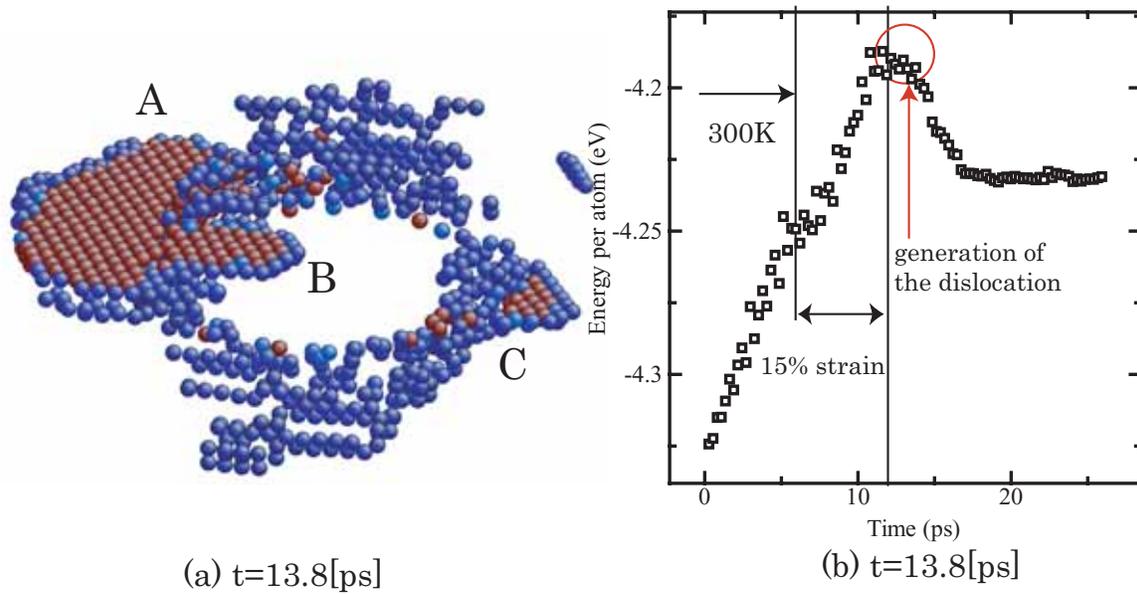


Fig. 4.12 (a) A snapshot of punched-out perfect dislocations at 13.7[ps]. (b) Dependence of the energy per atom on time.

4.3.5 熱的振動の影響

熱的揺らぎの影響を見るために温度を 900[K] とした場合の解析結果を示す．今例では先ほどまでの例と比較して高温であるため 0 ~ 900[K] までの昇温に 10.8[ps] を要した．そのこれまで同様に 10.8 ~ 16.2[ps] まで 5.4[ps] をかけて 12%ひずみを変位制御で与えた．高温による熱活性によって反応が加速化されているため途中過程は 300[K] ほどはっきりしないため始状態と終状態のみを Fig.4.13(a)(b) 示す．部分転位分の滑りをもつ原子のみを描画する．Fig.4.13(b) と Fig.4.10(e) を比較すると明らかなように 900[K] の Fig.4.13(b) では活性化エネルギーの上昇によって領域至るところにすべりをもつ原子が存在する．また (c) の断面図を見ると丸がついている箇所に示されているように確かに $\frac{1}{6}[2, \bar{1}, \bar{1}]$ ショックレー転位が移動することでボンドの組み換えが起こっている．しかし 300[K] の場合とは異なり今回は 2 本目のショックレー部分転位が発生することはなく unfaulting 反応は起きない．また 300[K] の場合とは異なり 2 本の積層欠陥の層の間の層を熱活性によっては発生した完全転位が移動してしまう．

結論としてショックレー転位が生成することは 900[K] においても確認された．そのため条件させ整えば 300[K] と同様の unfaulting 反応が起こる可能性は高いと考えられる．しかし熱活性が高いために例えば今回の例で言えば完全転位の発生のように、注目している現象以外の現象もまた容易に起こり、それによって注目している現象が乱される可能性もある．

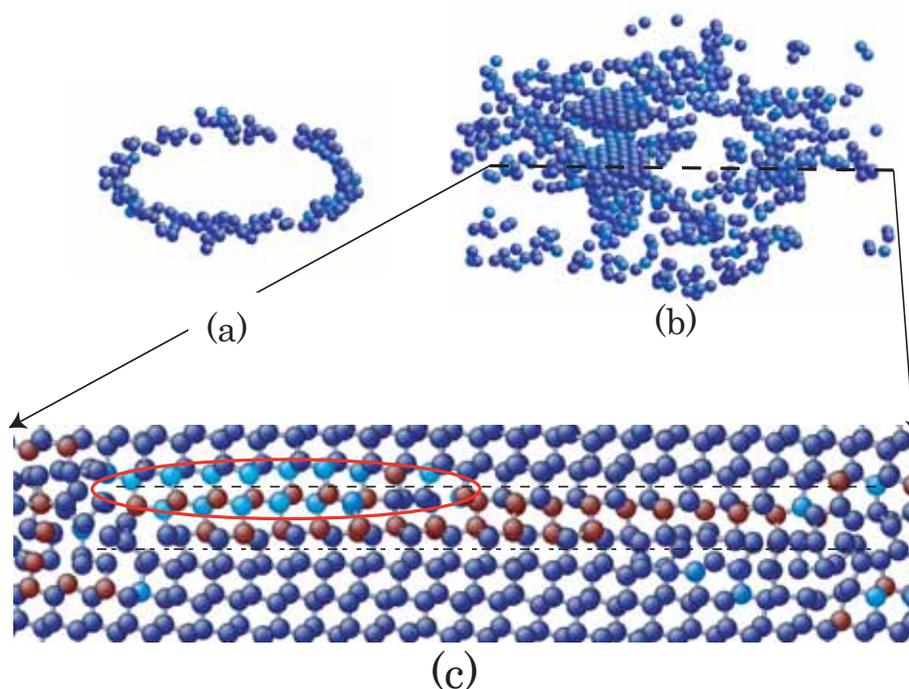


Fig. 4.13 (a)(b)Snapshots of the initial and stationary configuration of the simulation result. Atoms which have slipped by the norm of the partials' Burgers vector are shown from 3D view point. (c) Cross-sectional view of (b).

4.3.6 析出物半径の影響

析出物の大きさが unfaulting 反応に及ぼす影響を見積もるために析出物半径を $5a_0, 3a_0$ (a_0 は格子定数) と変化させて反応を比較する. Fig.4.14(a) に析出物半径を $7a_0, 5a_0, 3a_0$ と変化させたときのバルク原子のエネルギー時間変化を示す. 半径 $7a_0, 5a_0$ の場合は同様の履歴を示し, 実際 unfaulting もほぼ同様に起こる. しかし $3a_0$ の場合は上記 2 例と異なりひずみエネルギーは全く開放されない. 4.4.1 で議論したように結晶欠陥半径が小さければ小さいほどフランク部分転位のまま存在する方がエネルギー的に安定であり, unfaulting などの反応を起こしにくくなる. 今回の結果は上記のエネルギー的な議論の結論と一致するものである.

4.3.7 完全転位から PED への成長

前述したようにフランク部分転位が unfaulting した後の完全転位はすべり系 $(1, 1, 1)[1, 1, 0]$ のプリズマテック転位ループであり, 滑り面上でのすべり運動は行なわない. 完全転位が何らかの反応を経て, Fig.4.6 にあるような V 字型のすべり転位に発展する. 今研究ではこの発展過程に対して仮説を立てて, 実験結果 TEM 写真と照合することで仮説に対する検証を行なう. 仮説の概要を Fig.4.15 に示す. Fig.4.15(a) は初期状態におけるすべり面 $(1, 1, 1)$ 上の完全転位

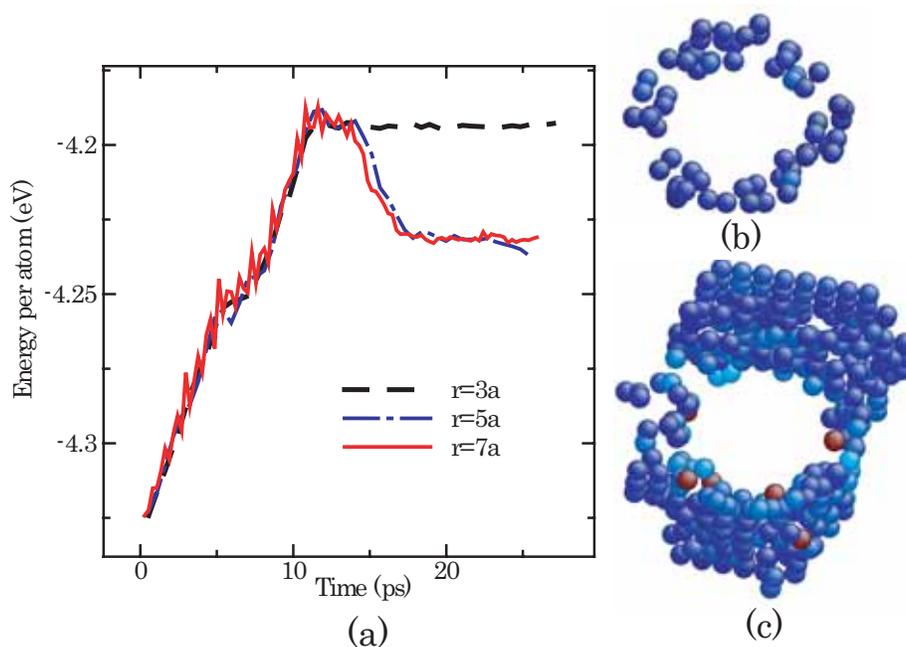


Fig. 4.14 (a)Time history of the energy per atom for various radius.(b)(c)Snapshots of the initial and stationary configuration of the defect.($r = 3a_0$)

を示している．これを上面 $(0, 0, 1)$ から見たものが (d) に対応する．前述したようにイオンインプラネーションにより発生した大量の格子間シリコンが存在する．格子間シリコンを吸収・放出することで滑り面を乗り越える上昇 (Climb) 運動が発生する．この上昇運動により完全転位は滑り面内方向に拡張していく (Fig.4.15(b)(e))．EOR 転位が存在するシリコン基板アモルファス-クリスタル界面 (以後 a-c 界面と呼ぶ) は基板表面から $50 \sim 60$ [nm] 離れた位置に存在するため, 拡張した完全転位は比較的容易に界面と接し, 開ループとなる．この後更に上昇運動により拡張しながら $(1, \bar{1}, 1)$, $(\bar{1}, 1, 1)$ 面に乗り移ることにより, Fig.4.15(c)(f) に示すような V 字型のすべり転位を形成する．仮説に対する裏付けを実験結果 TEM 明視野 (weak beam) 画像 [10] を用いて行なう．Fig.4.16A ~ E が前述の成長プロセスを示す TEM 画像である．A は初期状態である結晶欠陥 EOR 転位を示している．これが unfaulting することで B となる．更に上昇運動で拡張することで C になる．D ではさらに拡張し界面と接して開ループとなる．更に成長することで PED である E となる．一般に上昇運動は滑り (gliding) に比べて極めて時間がかかるため, このように一枚の TEM 写真に反応の各段階が存在するものと考えられる．また反応は TEM 写真に現われている通り応力集中部である SiN エッジ近傍に存在している．このことから SiN 薄膜真性応力場が反応の引き金となっていることと考えられる．

Fig.4.17 は半径 45 [nm], すべり系 $(1, 1, 1)[1, 1, 0]$ の転位ループを表面界面から中心まで 50 nm 離して配置した場合の円ループに作用する力の分布を転位動力学法を用いて計算したものを示したものである．緑実線矢印が鏡像力の分布を, 赤点線矢印が比較対象のため張力の分布を

示したものである．(a) は立体図 (b) 上面図 (c) 側面図である．なお SiN 端から $1[\mu\text{m}]$ 離れた地点を仮定しているため, SiN 薄膜からの応力場の影響はほとんど受けない．ループ上端は界面から $13[\text{nm}]$ 非常に近い箇所にあるため非常に強い鏡像力の影響下にあることが分かる．このことから前述した上昇運動はより自由界面に近い側で起こる確率が高くなっていると考えられる．

以上のように仮説に対応する TEM 写真が実験結果として得られているため, 仮説に述べたような反応が起こっている可能性がある．

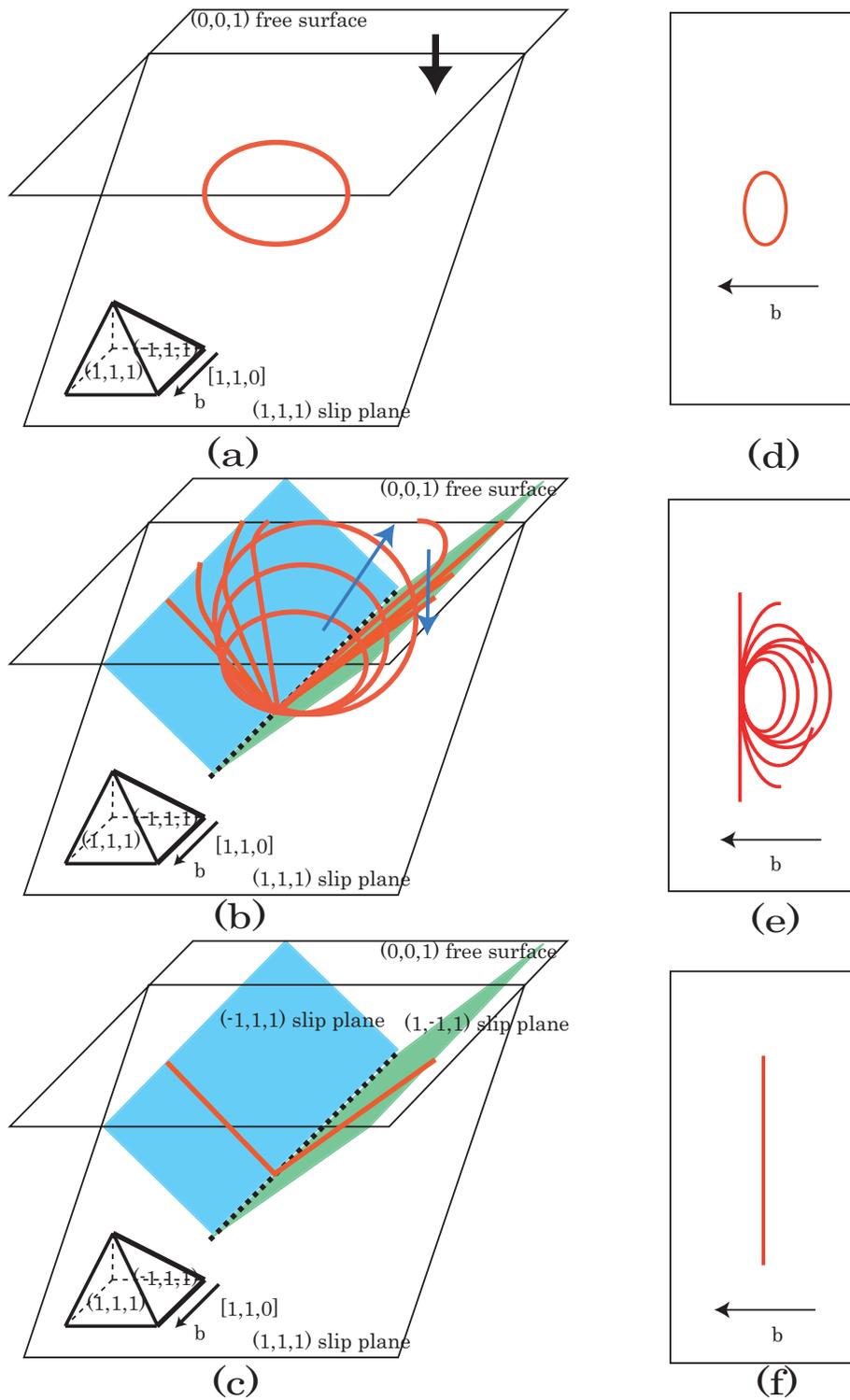


Fig. 4.15 Schematics of the growth of a perfect loop to a PED.

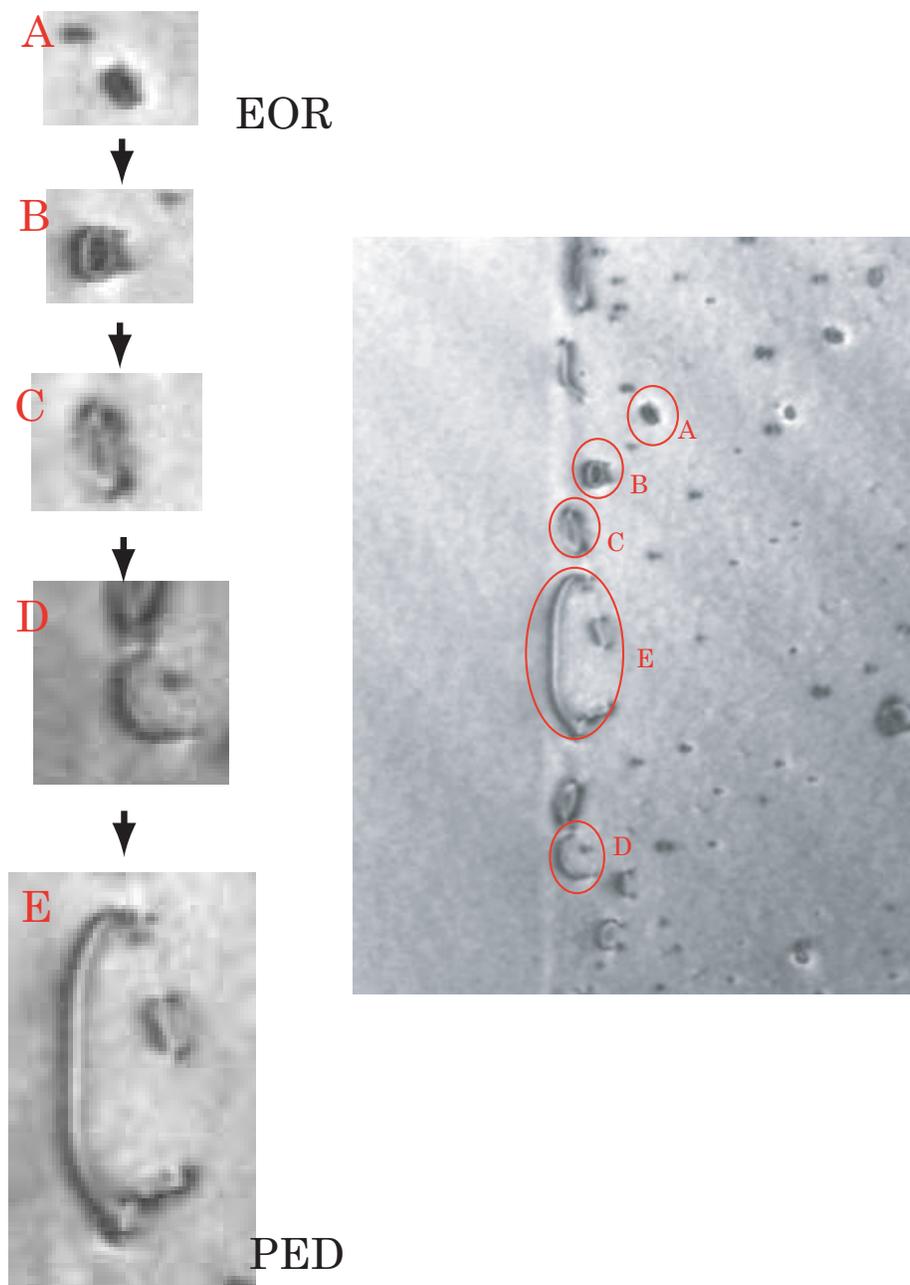


Fig. 4.16 Bright field TEM images [10] corresponding to Fig.4.15.

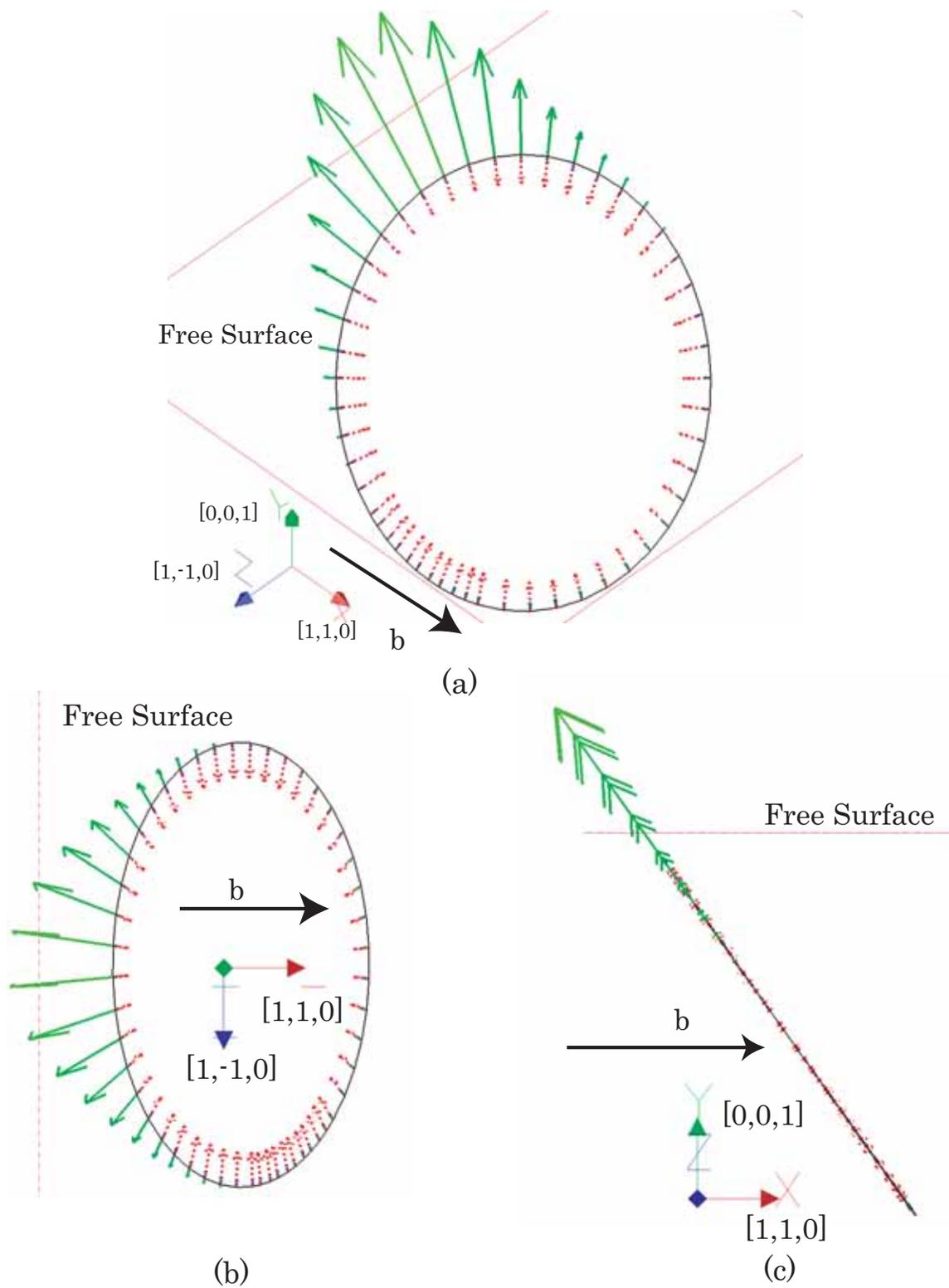


Fig. 4.17 Image force distribution (green solid arrows) and self-force distribution (red dot arrows) on circular loop with $(1, 1, 1)[1, 1, 0]$ slip system. The loop is 50[nm] from free surface, 1000[nm] from the SiN edge, and its radius is 45[nm]. (a) 3d view (b) top view (c) side view.

4.4 Pre-PED から PED への成長過程

本節では前節で議論を行なったような unfauling のような反応の結果生じるすべり転位 (以降 Pre-PED と呼ぶこととする) が周囲の Pre-PED や EOR 転位と反応しながら成長する様子を転位間に作用する相互作用力を中心に議論を展開することとする。

4.4.1 分子動力的アプローチ

結晶欠陥の一種である転位は他種の結晶欠陥と相互作用を行なう。しかしながら、結晶欠陥と転位の反応は、連続体仮定に基づく転位動力学によっては、直接扱えるものではない。そのため一度原子間のポテンシャルさせ決定してしまえば他の仮定を一切必要としない分子動力学法を用いて、析出物による転位のピン止め効果などを測定し、転位動力学のローカルルール作成などに利用研究が広く行なわれている [52, 69–72]。

今研究で EOR 転位と仮定しているフランク部分転位は転位動力学のみを用いて近似的にループ間の相互作用のみに着目して取り扱うこともできるが、積層欠陥の取り扱いなどの問題も存在する。そこで本研究では MD で容易に取り扱うことのできる刃状転位ならびにらせん転位とフランク部分転位の相互作用について取り扱うこととする。

フランク部分転位とらせん転位の相互作用

解析モデル 解析モデルを Fig.4.18 に示す。積層欠陥を中央に配置し、積層欠陥とらせん転位の相互距離は 13.3[nm] 相互に離れた。積層欠陥を構成する格子間シリコンの数は 715 であり、析出物半径は $7a_0 = 3.8$ [nm] であり、その他領域サイズ等は Table.4.2 に示す。境界条件は力を作用させる y 方向を固定境界条件と z 方向を固定境界条件とし、x 方向を周期境界条件として解析をおこなう。温度は 0 及び 900[K] で解析をおこなう。転位の駆動力となるせん断変形は Fig.4.18 矢印方向に -10% ひずみが作用するように変位制御で与えることとする。

Table 4.2 The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.4.18.

Number of Atoms	294348
Model Size	
x[nm]	15.4
y[nm]	9.4
z[nm]	39.9

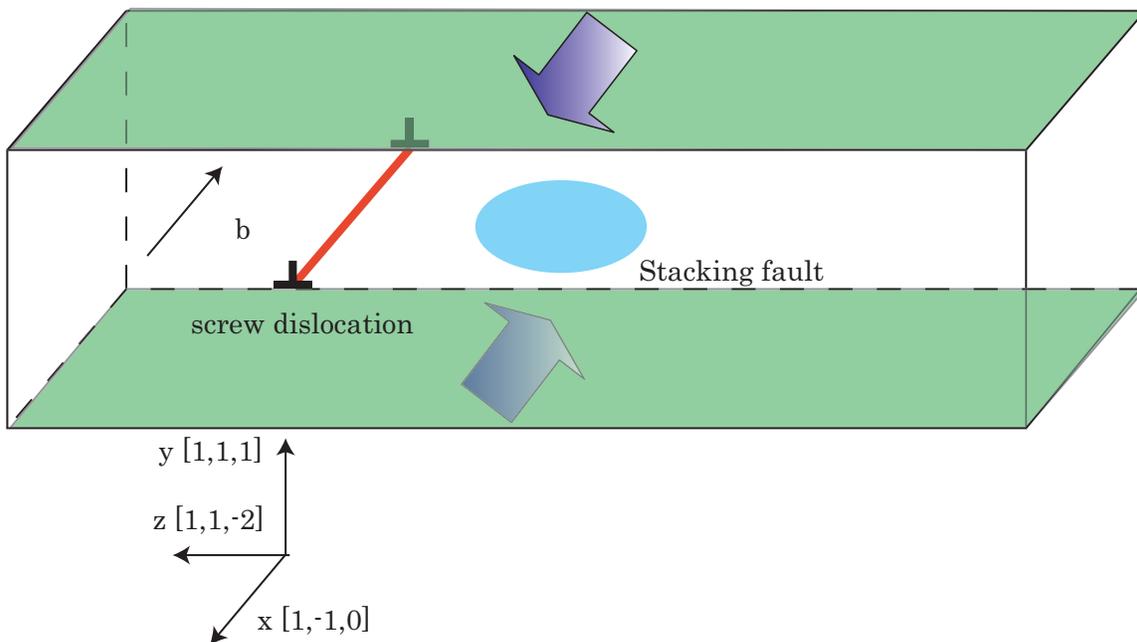


Fig. 4.18 Simulation model for computation of the interaction between a stacking fault and a screw dislocation .

解析結果 0[K] の場合の解析結果を以下に示す . Fig.4.19 は配位数が 4 以外の原子を転位位置をを示すために表示したものであり, Fig.4.20 は転位の軌跡を示すためにスリップベクトルの絶対値で原子を色分けしたものである . なお今解析において 0 ~ 5.4[ps] において線形に 0 ~ 10%ひずみを作用させている . (a) は初期位置である . (b) においてらせん転位とフランク部分転位は接触位置にいたる . この時相互の素片間には斥力が働く . そのため (c) に至るまで転位はフランク転位の内部の積層欠陥には侵入できない . いわゆる転位動力学で言うところの双極子のような反応が起こりフランク部分転位の外周で固着する . (d) においてひずみによる駆動力 + らせん転位の張力が合わさって初めて, 双極子の固着力に駆動力が勝り, 外周部から積層欠陥内部に転位が侵入する . (e) においては今度は素片間に引力が働き転位線は再び内部から外部に出る点で固着する . しかし先ほど同様に転位線が大きく張り出す形で張力が駆動力に加わることで (f) でらせん転位は再びフランク部分転位外部に抜けだし, 張力によりもとの直線形状を取り戻す .

フランク部分転位とらせん転位間には相互作用力が働き, フランク部分転位は転位の運動に対してシリコン基板中の酸素析出物と同じように転位運動をピン止めする効果がある . ピン止めされることによって長時間にわたって基板中でこのような相互反応が加わることで, たとえ今回の解析結果のよう unfaulting のような反応や転位へのフランク転位の吸収といった反応の直接の引き金にはならないにしても, こうした外的作用が加わることで反応を促進する効

果は少なくとも期待できると考えられる。

続いて 900[K] の場合の解析結果を以下に示す。Fig.4.21 は 2.3.2 において示したような可視化手法を用いた。なお前回のらせん転位 0[K] の場合にはエネルギーが全体に低すぎて 2.3.2 の手法ではらせん転位の可視化が上手くいかなかったために配位数による可視化を行なった。Fig.4.22 は先同様の可視化手法を用いた。今解析においても 0 ~ 16.2[ps] において線形に 0 ~ 900[K] まで昇温させその後、5.4[ps] かけて 10%ひずみを作用させている。基本的には先ほどと相互反応の機構は変化しない。しかし、熱活性による揺らぎが存在することで多少相互反応が変わっている。まず第一にらせん転位の運動であるが (a)→(b) へと移動する際に境界面付近で転位に何らかの異変がためらせん転位は部分転位 (Fig.4.22(b) の青いライン) を引きずりながら運動をしている運動を行なっている。このため移動速度の関係が逆転し、らせん転位がフランク部分転位外周に張り出すことなしに中央部から一気に内部に侵入する (c)。これは熱活性により転位運動が活性化されより高速に運動することが可能になっているためであると考えられる。しかし (e) に見られる積層欠陥から転位が抜け出る際にドラックされる反応は先ほどと全く同様であり、フランク部分転位とらせん転位の反応の本質は全く変わっていないと思われる。

今回 900[K] での反応を取り扱うにあたって熱活性によってフランク部分転位の unfaulting のような反応が誘発されることを期待して解析を行なったのであるが、こうした反応は全く起きることがなかった。しかしながら高温での熱的に活性化された状態にあっても、フランク部分転位はらせん転位の運動に対して転位をピン止めする効果がある。先ほどの議論同様反応の促進作用も熱活性が加わるためより期待できると考えられる。

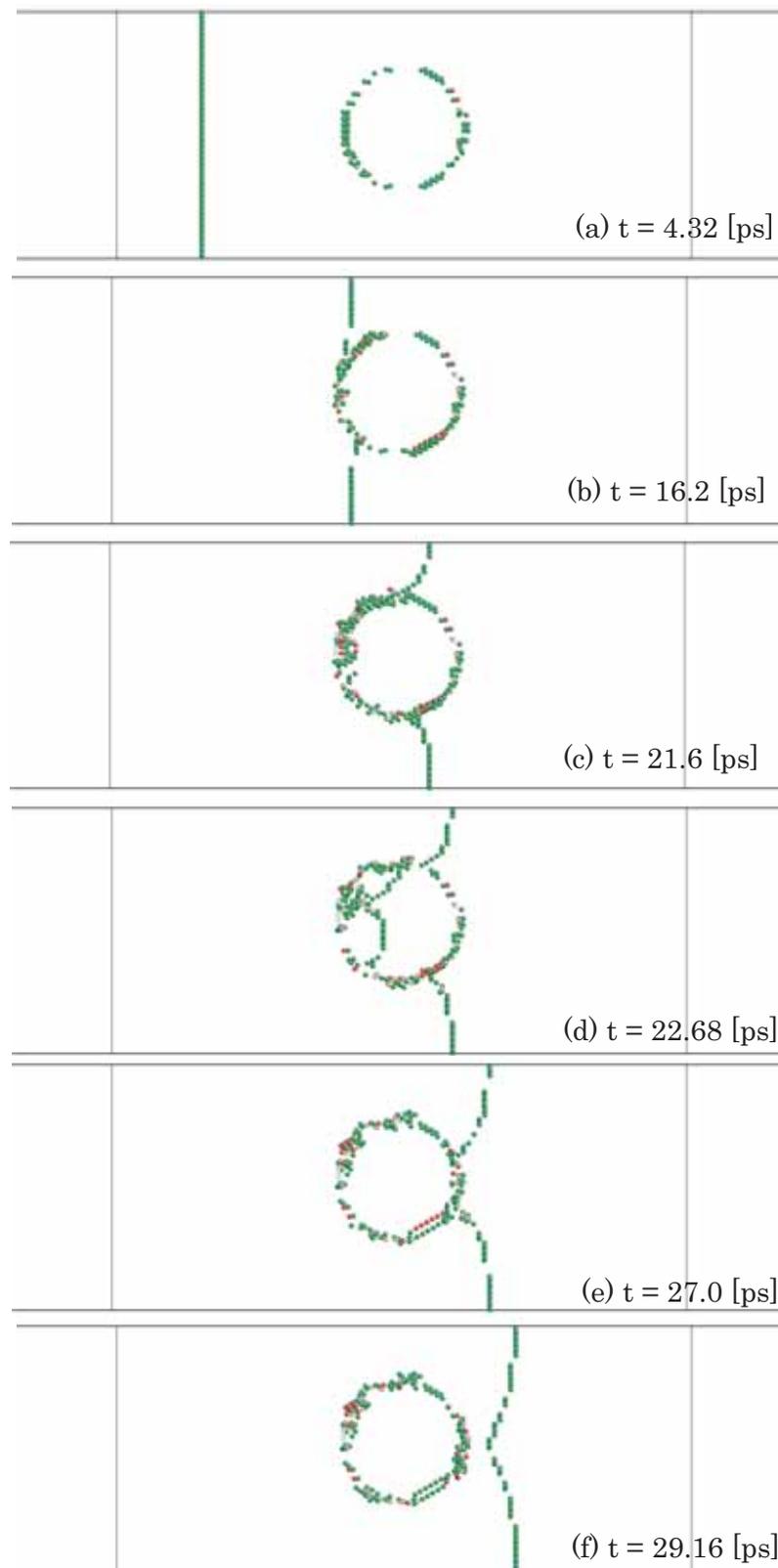


Fig. 4.19 Snapshots of the simulation result. Not 4-coordinate-numbered atoms are displayed to show the dislocation figure. (a) $t = 4.32$ [ps]:(b) $t = 16.2$ [ps]:(c) $t = 21.6$ [ps]:(d) $t = 22.68$ [ps]:(e) $t = 27.0$ [ps]:(f) $t = 29.16$ [ps]

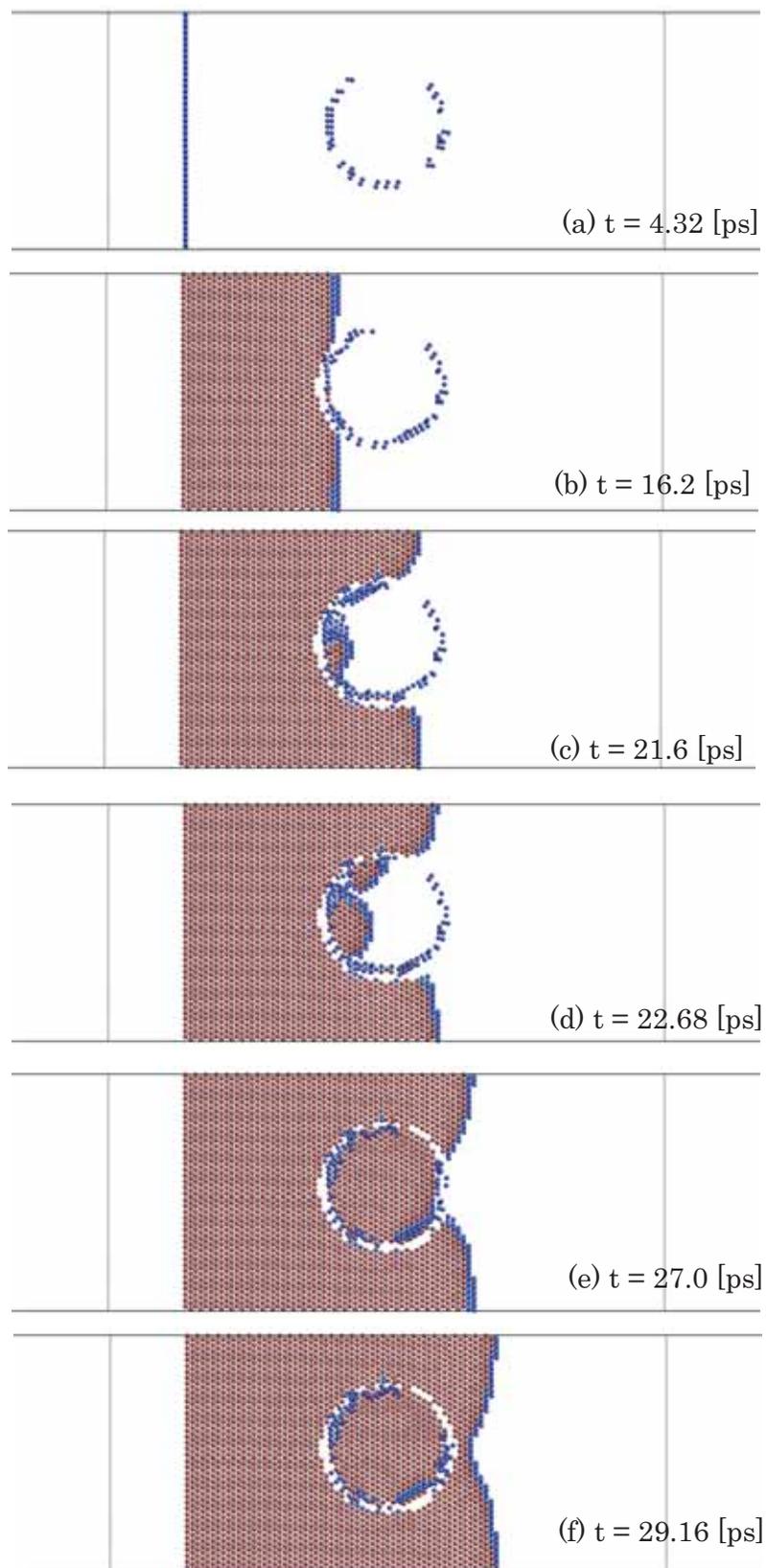


Fig. 4.20 Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 4.32$ [ps]:(b) $t = 16.2$ [ps]:(c) $t = 21.6$ [ps]:(d) $t = 22.68$ [ps]: (e) $t = 27.0$ [ps]:(f) $t = 29.16$ [ps]

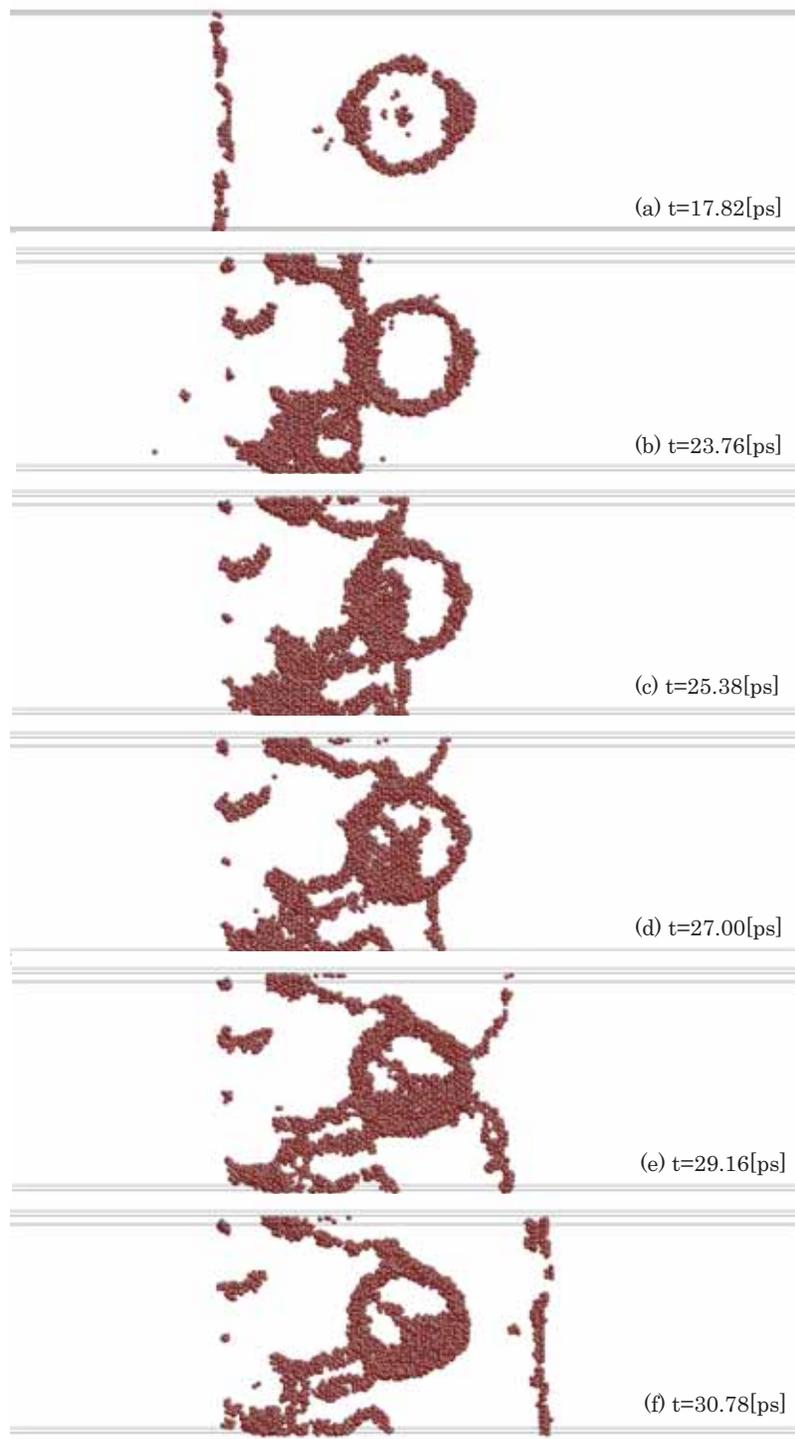


Fig. 4.21 Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 17.82[\text{ps}]$:(b) $t = 23.76[\text{ps}]$:(c) $t = 25.38[\text{ps}]$:(d) $t = 27.00[\text{ps}]$:(e) $t = 29.16[\text{ps}]$:(f) $t = 30.78[\text{ps}]$

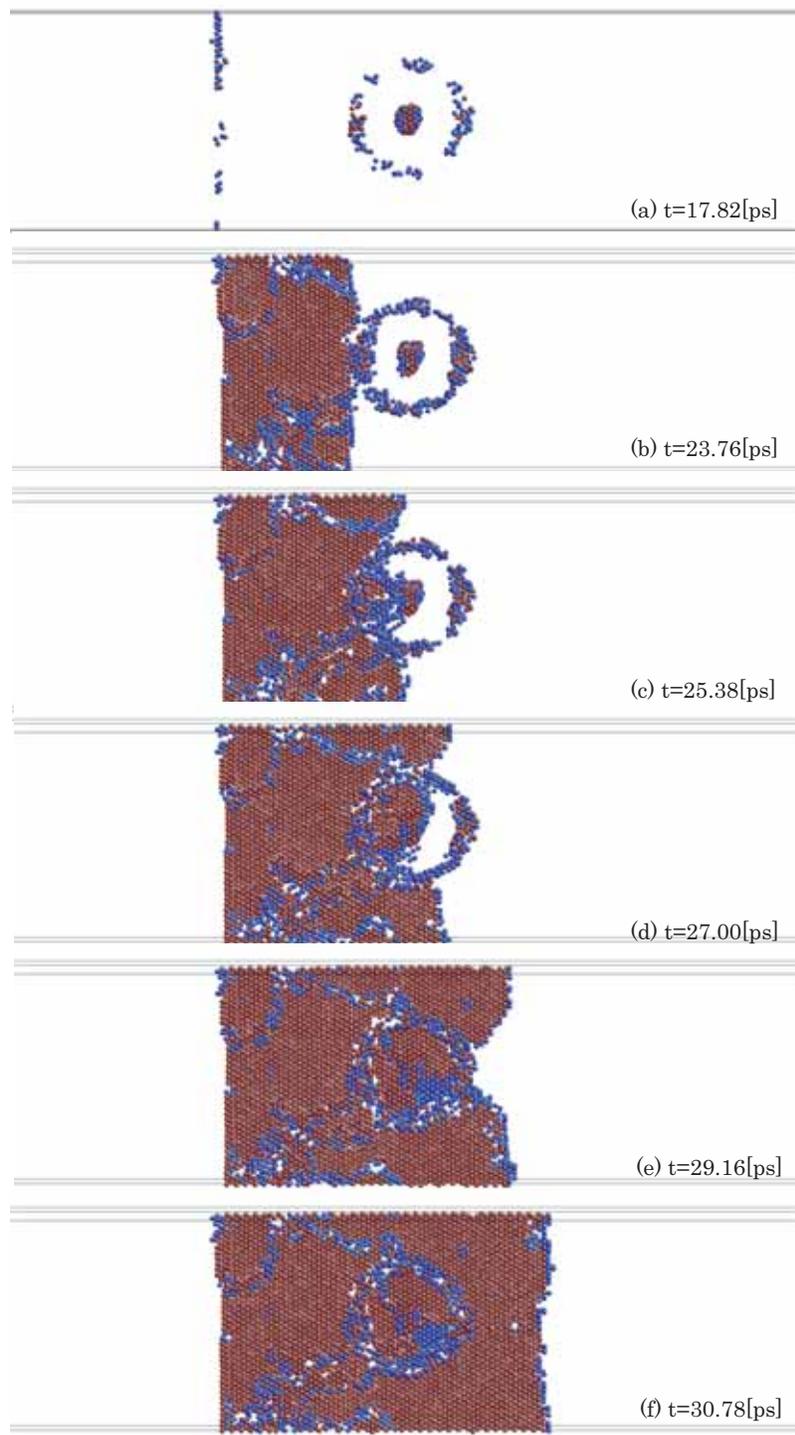


Fig. 4.22 Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 17.82[\text{ps}]$; (b) $t = 23.76[\text{ps}]$; (c) $t = 25.38[\text{ps}]$; (d) $t = 27.00[\text{ps}]$; (e) $t = 29.16[\text{ps}]$; (f) $t = 30.78[\text{ps}]$

フランク部分転位と刃状転位の相互作用

解析モデル 解析モデルを Fig.4.23 に示す．積層欠陥を中央に配置し，積層欠陥と刃状転位の相互距離は 15.4[nm] 相互に離れた．積層欠陥を構成する格子間シリコンの数は 715 であり，析出物半径は $7a_0 = 3.8$ [nm] であり，その他領域サイズ等は Table.4.3 に示す．境界条件は力を作用させる y 方向を固定境界条件と x 方向を固定境界条件とし，z 方向を周期境界条件として解析をおこなう．温度は 0 及び 900[K] で解析をおこなう．転位の駆動力となるせん断変形は Fig.4.23 矢印方向に -10%ひずみが作用するように変位制御で与えることとする．

Table 4.3 The region size and the number of the atoms in the simulation cell in Fig.4.23.

Number of Atoms	294728
Model Size	
x[nm]	46.1
y[nm]	9.4
z[nm]	13.3

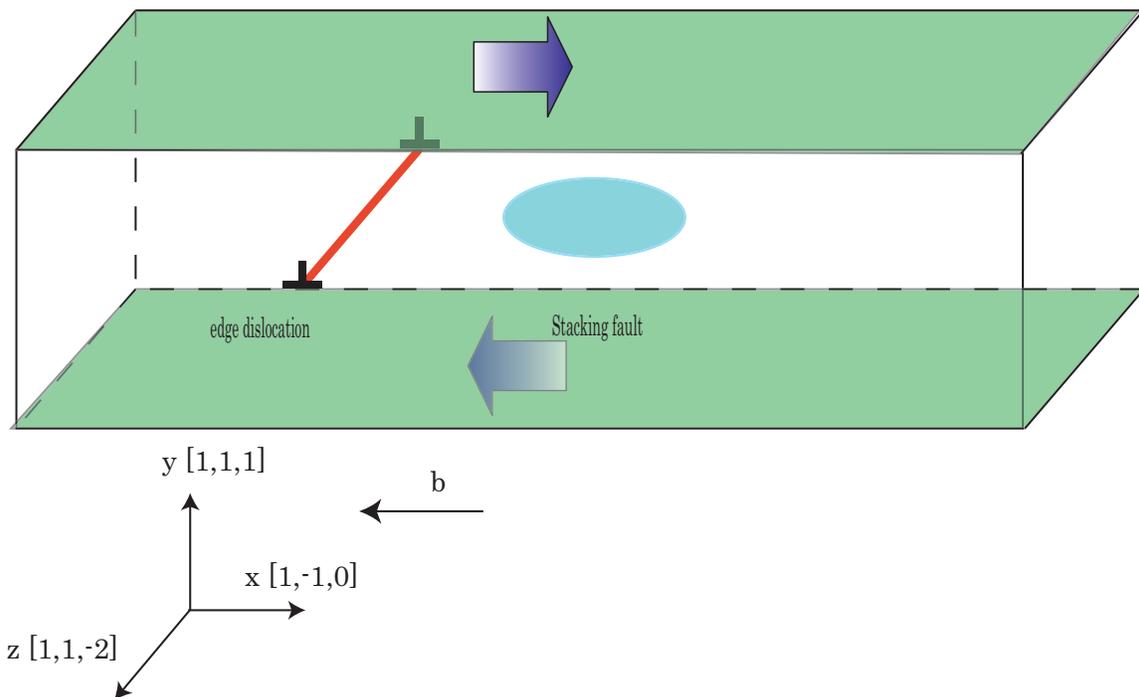


Fig. 4.23 Simulation model for computation of the interaction between a stacking fault and an edge dislocation .

解析結果 0[K] の場合の解析結果を以下に示す．可視化手法は転位芯周りの原子を抜き出す手法 (Fig.4.24), スリップベクトル (Fig.4.25) は前述と同様である．今解析においても 0 ~ 5.4[ps] において線形に 0 ~ 10% ひずみを作用させている．(a) は初期位置である．(b) において刃状転位とフランク部分転位は接触位置にいたる．この時相互の素片間には先ほど同様斥力が働く．そのため (c) に至るまで転位はフランク転位の内部の積層欠陥には侵入できない．先ほど同様に双極子のような反応が起こりフランク部分転位の外周で固着する．転位の張り出し角が大きくなって張力が作用するようになることによって双極子の固着力に駆動力が勝り, 外周部から積層欠陥内部に転位が侵入する (d)．(e) においては今度は素片間に引力が働き転位線は再び内部から外部に出る点で固着する．しかし先ほど同様に転位線が大きく張り出す形で張力が駆動力に加わることで (f) で刃状転位は再びフランク部分転位外部に抜けだし, 張力によりもとの直線形状を取り戻す．

先ほど同様フランク部分転位と刃状転位間には相互作用力が働き, フランク部分転位は刃状転位の運動に対して転位をピン止めする効果がある．先ほどの議論同様反応の促進作用は期待できると考えられる．

続いて 900[K] の場合の解析結果を以下に示す．Fig.4.26 と Fig.4.27 は先同様の可視化手法を用いた．今解析においても 0 ~ 10.8[ps] において線形に 0 ~ 900[K] まで昇温させその後, 5.4[ps] かけて 10% ひずみを作用させている．熱活性による揺らぎが存在することで多少相互反応が変わっている．まず第一に刃状転位の運動であるが (a)→(b) へと移動する際に境界面付近で転位に何らかの異変がため刃状転位は部分転位 (Fig.4.27(b) の青いライン) を引きずりながら運動をしている運動を行なっている．このため移動速度の関係が逆転し, 刃状転位がフランク転位外周に張り出すことなしに中央部から一気に内部に侵入する (c)．これは熱活性により転位運動が活性化されより高速に運動することが可能になっているためであると考えられる．しかし (e) に見られる積層欠陥から転位が抜け出る際にドラックされる反応は先ほどと全く同様であり, フランク部分転位と刃状転位の反応の本質は全く変わっていないと思われる．

今回 900[K] での反応を取り扱うにあたって熱活性によってフランク部分転位の unfaulting のような反応が誘発されることを期待して解析を行なったのであるが, こうした反応は全く起きることがなかった．しかしながら高温での熱的に活性化された状態にあっても, フランク部分転位は刃状転位の運動に対して転位をピン止めする効果がある．先ほどの議論同様反応の促進作用も熱活性が加わるためより期待できると考えられる．

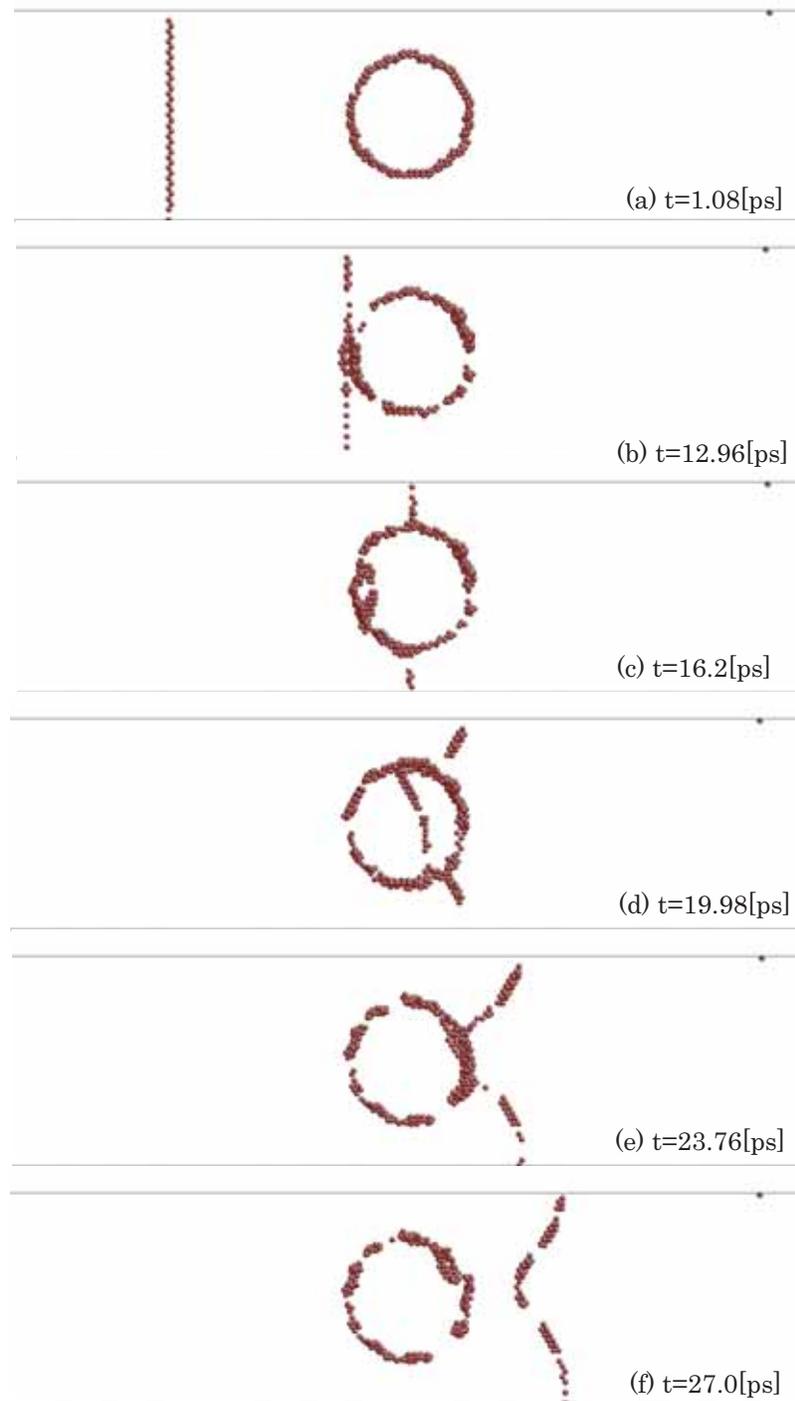


Fig. 4.24 Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 1.08[\text{ps}]$:(b) $t = 12.96[\text{ps}]$:(c) $t = 16.2[\text{ps}]$:(d) $t = 19.98[\text{ps}]$:(e) $t = 23.76[\text{ps}]$:(f) $t = 27.0[\text{ps}]$

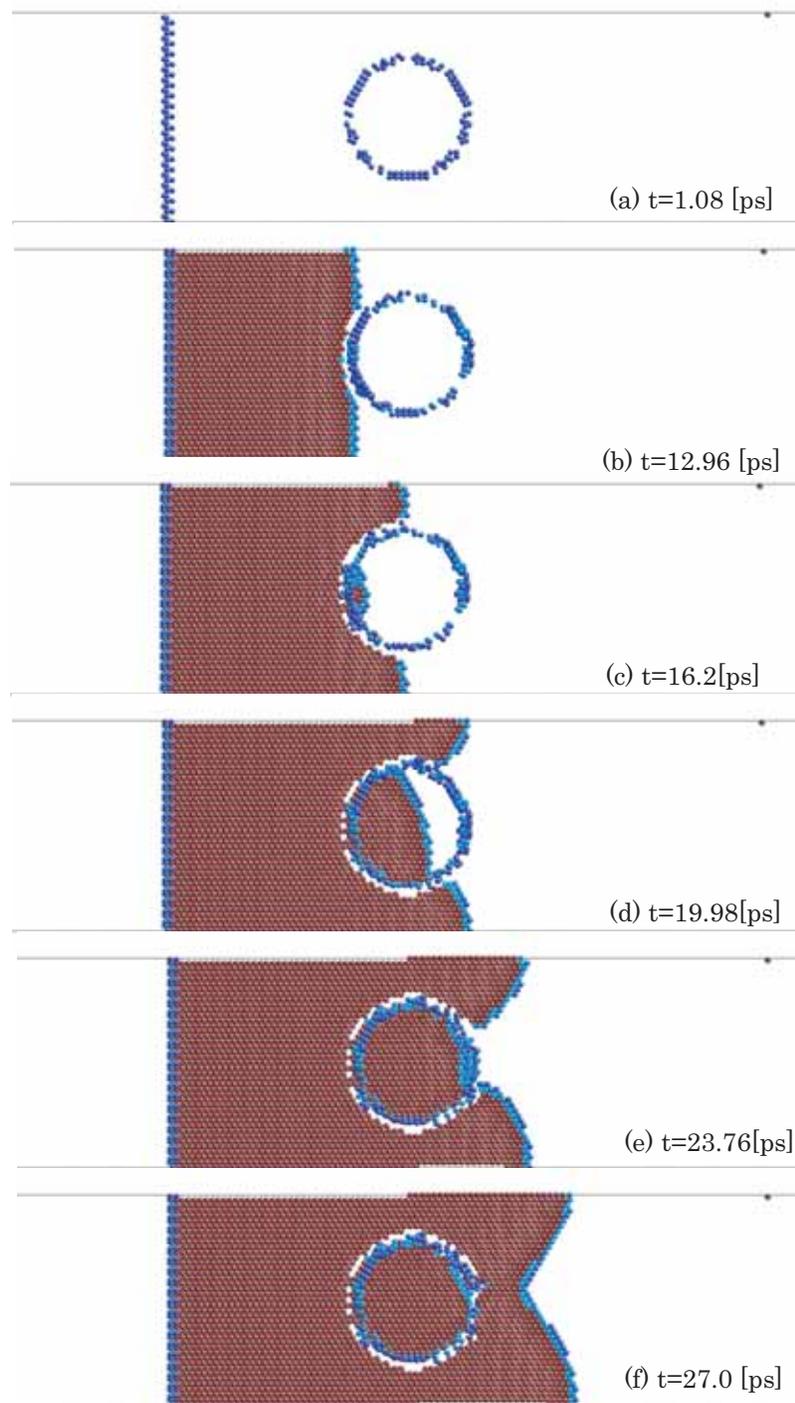


Fig. 4.25 Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 1.08$ [ps]:(b) $t = 12.96$ [ps]:(c) $t = 16.2$ [ps]:(d) $t = 19.98$ [ps]: (e) $t = 23.76$ [ps]:(f) $t = 27.0$ [ps]

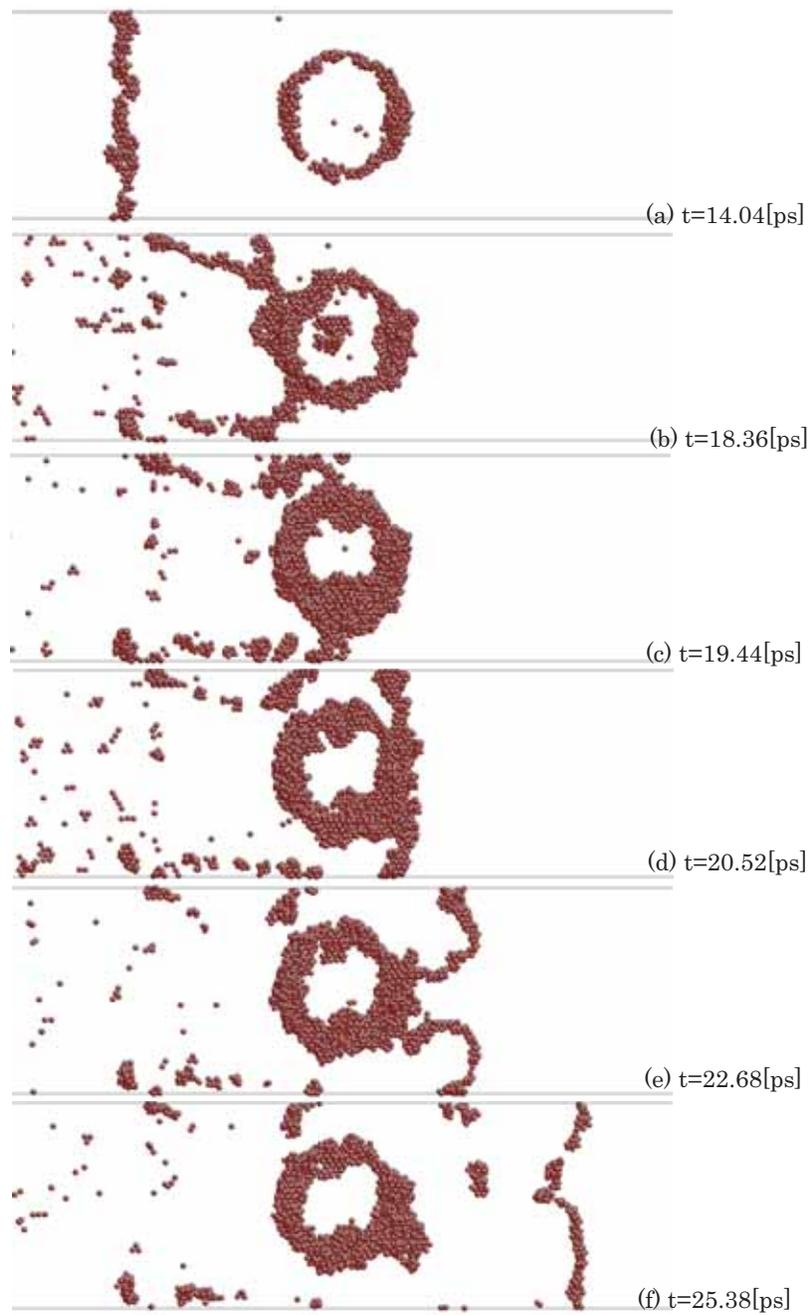


Fig. 4.26 Snapshots of the simulation result. Dislocation visualization algorithm is used. (a) $t = 14.04[\text{ps}]$; (b) $t = 18.36[\text{ps}]$; (c) $t = 19.44[\text{ps}]$; (d) $t = 20.52[\text{ps}]$; (e) $t = 22.68[\text{ps}]$; (f) $t = 25.38[\text{ps}]$

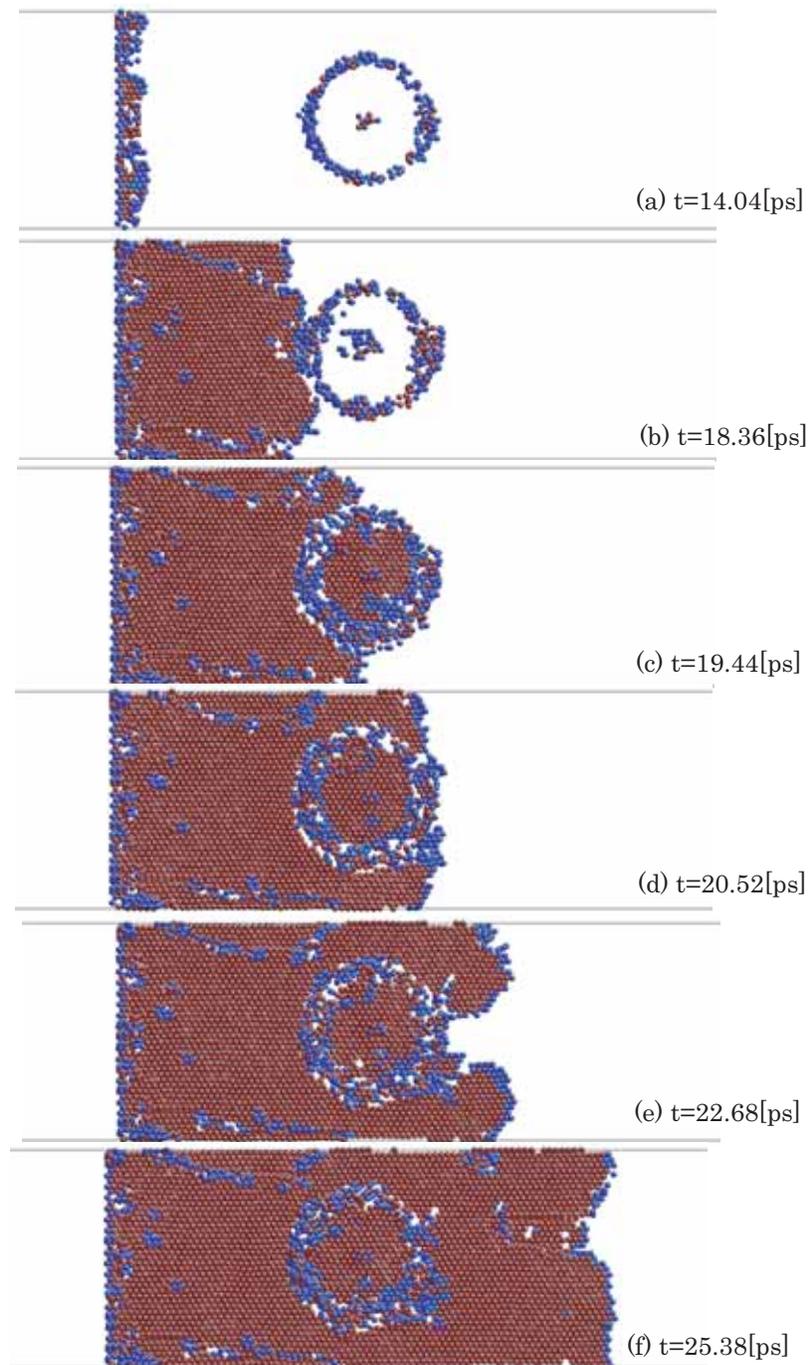


Fig. 4.27 Snapshots of the simulation result. Atoms are colored by the norm of slip vector. (a) $t = 14.04[\text{ps}]$; (b) $t = 18.36[\text{ps}]$; (c) $t = 19.44[\text{ps}]$; (d) $t = 20.52[\text{ps}]$; (e) $t = 22.68[\text{ps}]$; (f) $t = 25.38[\text{ps}]$

4.4.2 転位動力学的アプローチ

先ほどは分子動力学を用いて相互反応へのアプローチを行なったが、転位論の観点で計算可能なエネルギー的な見地から転位と結晶欠陥の相互作用を探るアプローチもまた存在する [73–75]。本節では分子動力学法では計算することの不可能な複雑な形状をした Pre-PED と間相互反応や Pre-PED とフランク部分転位との相互作用力を転位動力学を用いて評価することで間接的に反応が起こる方向性について議論を行なう。

フランク部分転位と Pre-PED 間相互作用

フランク部分転位は積層欠陥の一種であり、完全転位である Pre-PED と相互作用を行なうと考えられる。厳密には部分転位からの寄与を考える際には、前節の分子動力学で行なったような積層欠陥の影響を考慮する必要があると考えられるが、近似的に (1, 1, 1) 滑り面上の $1/3[1, 1, 1]$ 成分を持つプリズマティック転位ループとして取り扱った。今回解析では、一例として上記の仮定を行なった初期半径 20[nm]、表面から中心までの深さ 50[nm] の実験結果を模擬したフランク部分転位と滑り方向 $1/2[1, 1, 0]$ を持つ長さ 200[nm] の Pre-PED の相互作用を調べた。Pre-PED の外形・すべり系は Fig. 4.6 と同様である。初期配置において Fig. 4.28(a) のように相互距離は 50[nm] 離れた。また今回は純粋にループ間に働く相互作用力を調べるために外部からの Applied Force は 0 とした。

Fig. 4.28(a)(b) はそれぞれ時刻 $t = 0, 0.01$ [sec] 秒後の上面図である。お互いに引力が作用し引き付けあっている様子が分かる。転位芯の相互作用が始まる距離まで近づくと、文献 [73, 74] にあるようにフランク不動転位は Pre-PED に吸収されて消滅すると考えられる。Fig. 4.28(c) に対応する相互反応が生じていると思われる TEM 写真の平面図を示す。特に顕著なのは (*) をつけた で囲っている箇所である。この箇所は PED となり基板内部に射出したあとの状態であるが、もとの Pre-PED が成長し PED となり存在したと思われる箇所には TEM 写真中黒い点として存在している EOR 転位の密度はほぼ 0 となっている。文献 [75] で Dislocation channel と紹介されているような転位 (今回の場合 Pre-PED) によって結晶欠陥 (今回の場合 EOR) がスイープされる現象が生じた結果と考えられる。

Pre-PED と Pre-PED 間相互作用

前節と同様に Pre-PED 間に働く相互作用について調べ、TEM 写真との比較検討行なった。Pre-PED の長さは共に 500[nm] とし、外形・すべり系は Fig. 4.6 と同様である。対象とする初期配置は、Fig. 11(a) にあるように、互いを x 方向に 250[nm] 離し、中心線を z 方向に 250[nm] ずらした。また前節同様に Applied Force は 0 とした。

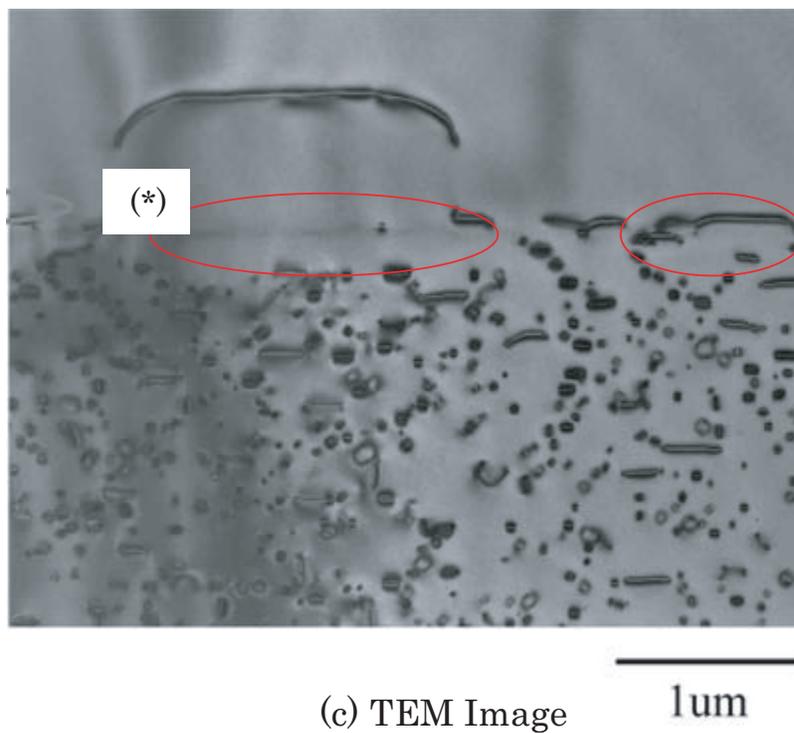
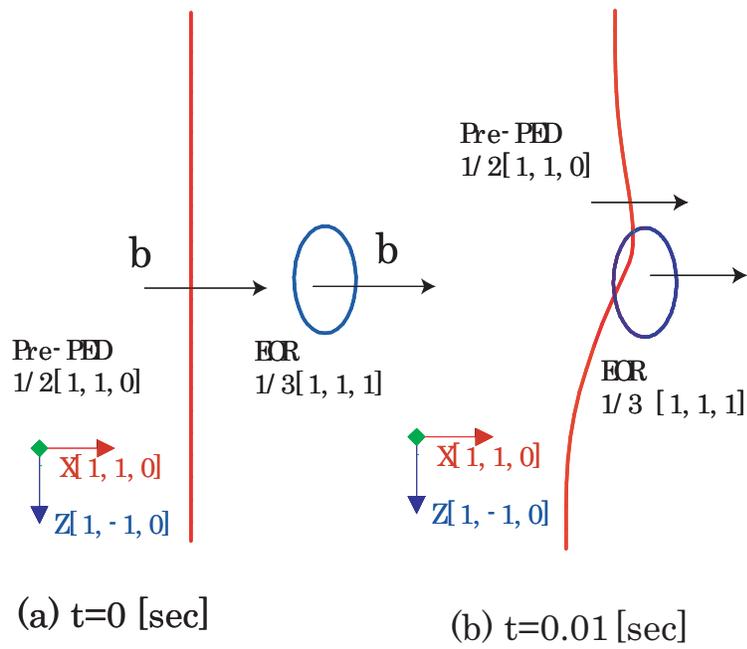


Fig. 4.28 Snapshots of plane-view configuration of Pre-PED and EOR dislocation interaction and a corresponding TEM image [10] . (a) $t = 0$ [sec] (b) $t = 0.01$ [sec] (c) TEM image [10] .

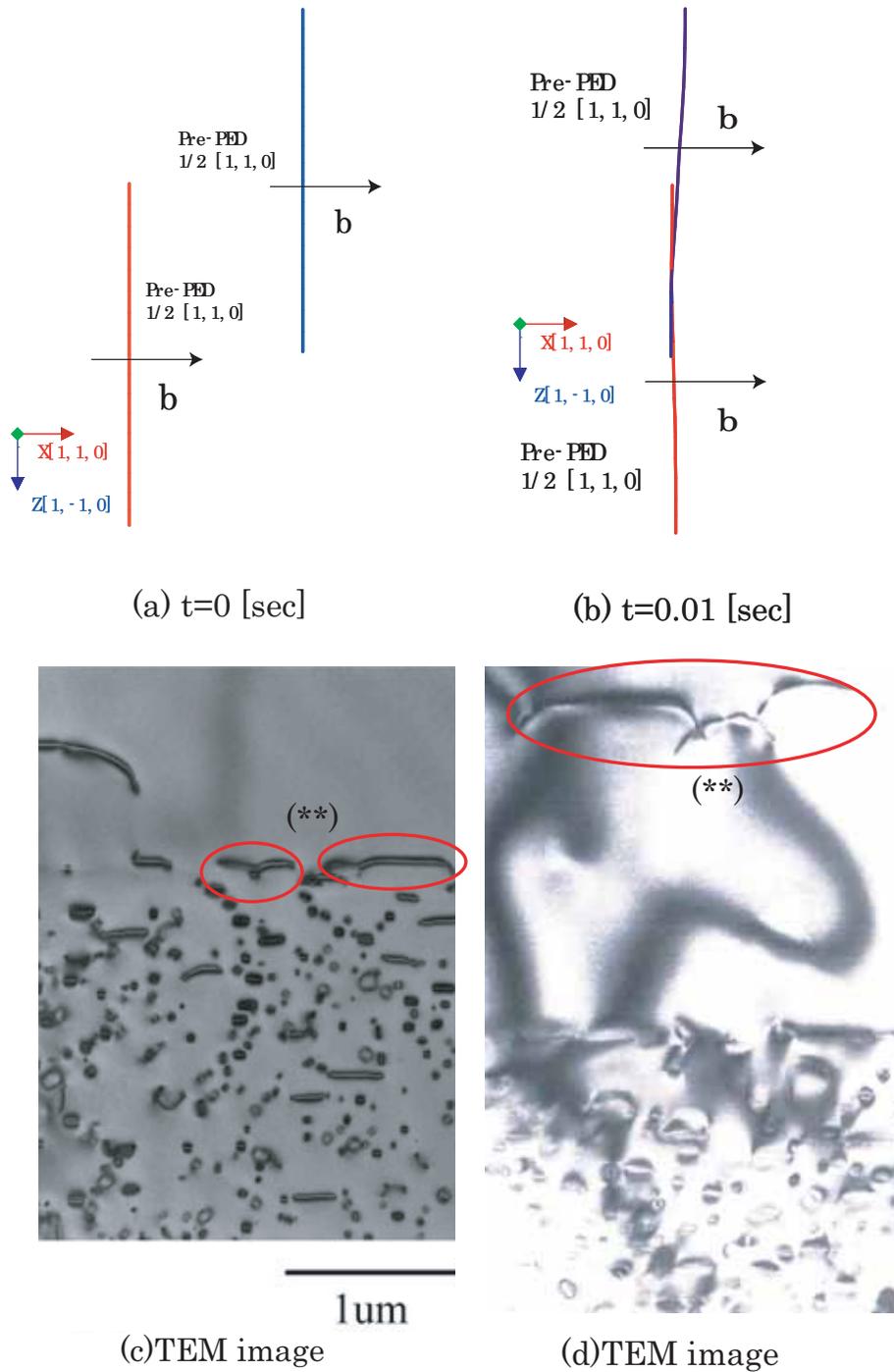


Fig. 4.29 Snapshots of plane-view configuration of Pre-PED and Pre-PED interaction and a corresponding TEM image [10]. (a) $t = 0$ [sec] (b) $t = 0.01$ [sec] (c) TEM image [10] (d) TEM image [10].

Fig. 4.29 (a)(b) はそれぞれ $t = 0, 0.01[\text{sec}]$ 後の上面図である．お互いに引力が作用し引き付けあっている様子が分かる．転位芯の相互作用が始まる距離まで近づくと，annihilation や zipping などの近接作用が起こると考えられる．Fig. 4.29(c)(d) [10] は対応する TEM 写真である．(c) においては SiN エッジ端で Pre-PED が堆積している (**) つきの で囲まれている箇所に着目すると上記のような反応が起こって 1 本の $1[\mu\text{m}]$ 程度の大きな PED となり，基板内部にパンチアウトすると現象を解釈することができる．(d) においては SiN 端から射出された後に接近した PED 間に反応が起ころうとしている状態の TEM 画像と考えられる．

なお，今回のような複雑な転位形状同士の相互作用においては，幾何形状によって転位上のセグメントごとに引力・斥力のパートが存在するため，ループ全体としてどのように動くかは相互の幾何的な初期配置によって大きく変わるということをつけ加えておく．

4.5 PED の運動

今節では Fig.4.2 に示されるような SiN 膜端に堆積した PED が射出され基板内部へと運動する様子を転位動力学を用いて解析を行なう．

4.5.1 応力場解析

転位動力学シミュレーションにあたって転位に作用する外部応力場を計算する必要がある．SiN 薄膜の応力場によってシリコン基板に発生する応力場について有限要素法解析ソフト ANSYS9.0 を使用して解析した．モデルは Fig. 4.31 に示すように土屋らの実験を模擬した．土屋らの実験は，半導体の素子パターンとして Fig.4.30 に示す Line & Space パターンを用いているため，対象性を考慮して二次元平面ひずみとして応力解析を行った．物性は，等方弾性体，線形熱膨張率を仮定した．各物性値を Table.4.4 に示す．Line, Space 部の幅をそれぞれ $5.0[\mu\text{m}]$ ，シリコン基板深さ方向厚みを $40.0[\mu\text{m}]$ とし厚いシリコン基板を模擬するため，底部に等価剛性要素を用いた．SiN の膜厚は $100 \sim 300[\text{nm}]$ とし，薄膜形成時に作用する引っ張りの真性応力を初期応力として $0.1 \sim 2.0[\text{GPa}]$ として与えた．また基板温度は 900 とした．熱酸化膜 (SiO_2) 部はその膜厚が $3 \sim 9[\text{nm}]$ と非常に薄いため， $0[\text{nm}]$ としたモデルも比較対象として用意した．Fig. 4.32 にミーゼス相当応力の分布を示す．SiN の角部で応力集中が起こり $3[\text{GPa}]$ 以上の強い応力が生じている．従って薄膜角部を初期転位配置箇所とするのは適切であると考えられる．最後に $(1, \bar{1}, 1)[1, 1, 0]$ 系の分解せん断応力分布を SiO_2 $0[\text{nm}]$ の場合の解析結果を実線で， SiO_2 $9[\text{nm}]$ の場合の解析結果を点線で Fig.4.33 に示す．両者はほぼ同じである．このことから解析においては SiO_2 層が非常に薄いため応力場解析においてほぼ差が生じないことを示している．

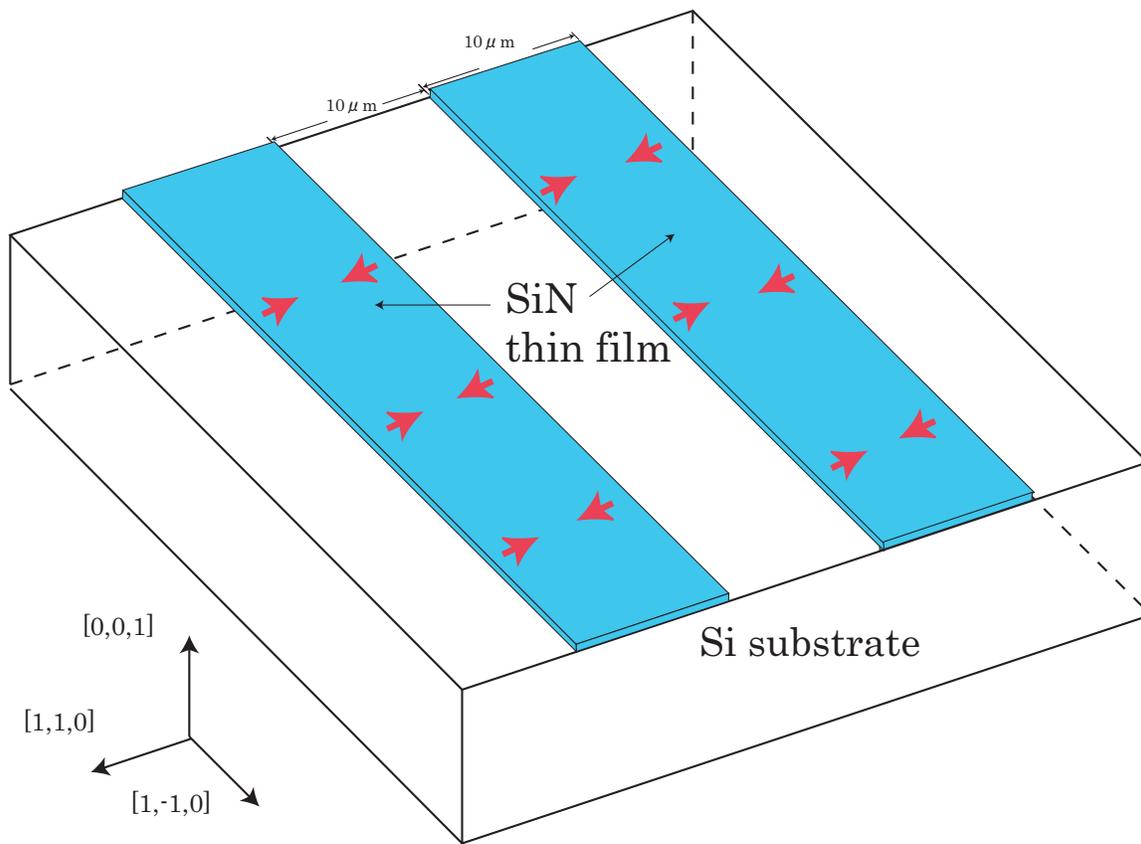


Fig. 4.30 Schematics of line and space pattern.

Table 4.4 Material constants used in the FEM.

material	young ratio [GPa]	poisson ratio	linear thermal expansion coefficient [1/]	Initial stress [GPa]
Si	170	0.28	3.0×10^{-6}	-
SiO ₂	70	0.17	0.87×10^{-6}	0.0
SiN(Si ₃ N ₄)	260	0.26	3.1×10^{-6}	0.1~2.0
Equivalent stiffness Si	2.0×10^5	0.28	3.0×10^{-6}	-

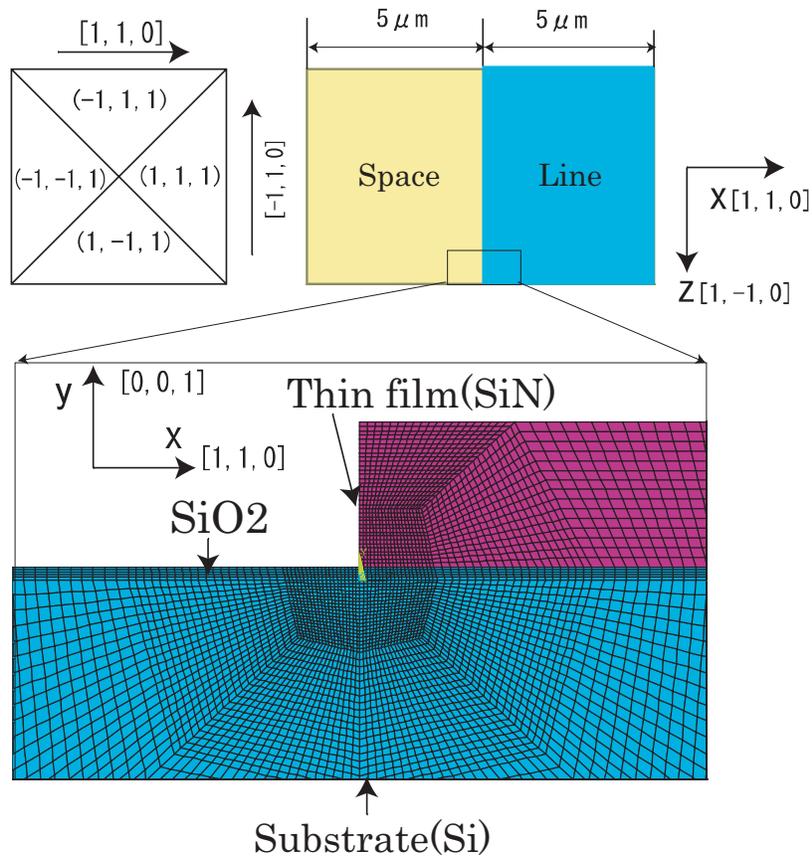


Fig. 4.31 Plane-view of the schematics of the Line and Space pattern with slip direction .

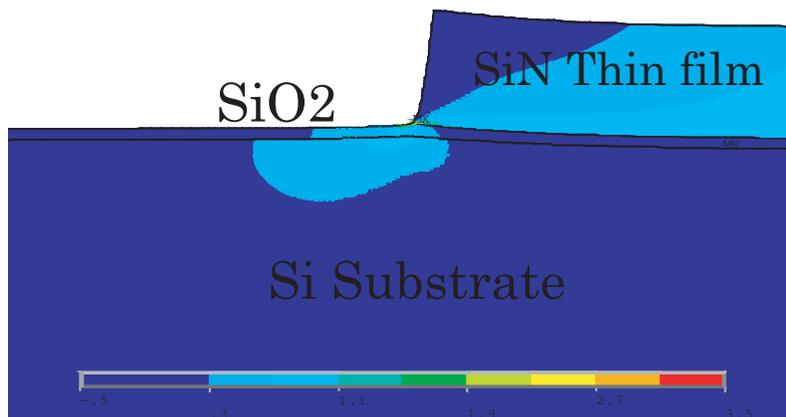


Fig. 4.32 Mises equivalent stress contour of Si substrate.

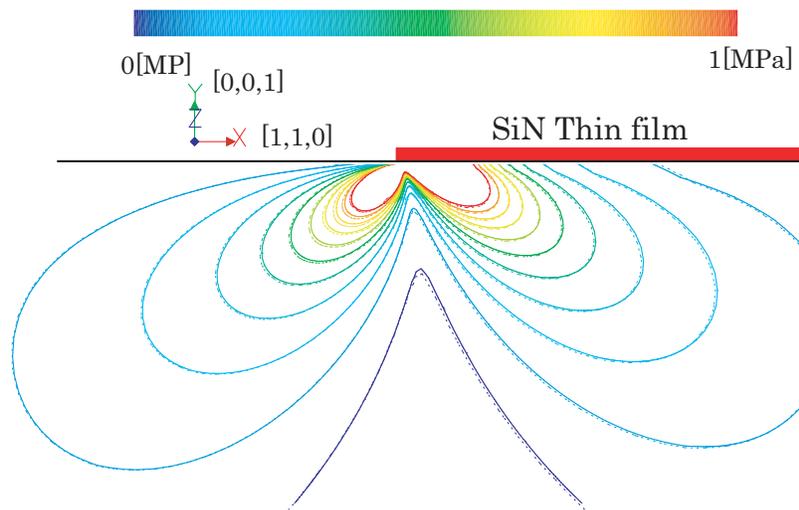


Fig. 4.33 Resolved share stress contour of Si substrate with $(1, \bar{1}, 1)[1, 1, 0]$ slip system. Solid line shows iso-stress contours with $\text{SiO}_2 0[\text{nm}]$ and dot line for $\text{SiO}_2 9[\text{nm}]$.

4.5.2 転位動力学解析

転位形状の再現性

停止に至るまでの PED 運動のシミュレーションを行なう。初期転位の形状・すべり系は Fig. 4.6 のように設定する。解析結果の一例として、SiN の膜厚を $100[\text{nm}]$ 、膜の真性応力として $1.6[\text{GPa}]$ として入力したものの結果を Fig. 4.34 に図示する。Fig. 4.34(a),(c),(e) は初期状態での転位の配置に対するそれぞれ鳥瞰図・上面図及び側面図であり、Fig. 4.34(b), (d) は $0.24[\text{sec}]$ 後の停止状態での鳥瞰図・上面図及び側面図である。今回取り扱った素子パターンにおいて、転位の主たる駆動力となるのは、SiN 薄膜の真性応力である。Si 基板に生じる応力場は Edge 端からの距離に対して減少し、基板の摩擦力とつりあう形で停止する。今回のケースにおいて、転位の線張力は転位が $(1, \bar{1}, 1)$ 及び $(\bar{1}, 1, 1)$ の 2 つの滑り面にまたがるように存在することで、転位形状がほぼ 2 本の直線で構成されるため、PED 運動の停止条件にあまり関与していないと考えられる。Fig. 4.34(g) は土屋らの実験結果 [10] の TEM 写真である。それぞれ上面図、断面図において丸でマークしてあるものが、解析と実験の対応する形状である。Fig. 4.34(d),(e),(f) の比較から形状がほぼ一致していることが分かる。以上より解析結果は、転位形状を精度よく再現していると結論付けられる。このことから初期位置における転位のすべり系の仮定 (Fig. 4.6) が妥当であることが間接的に示される。

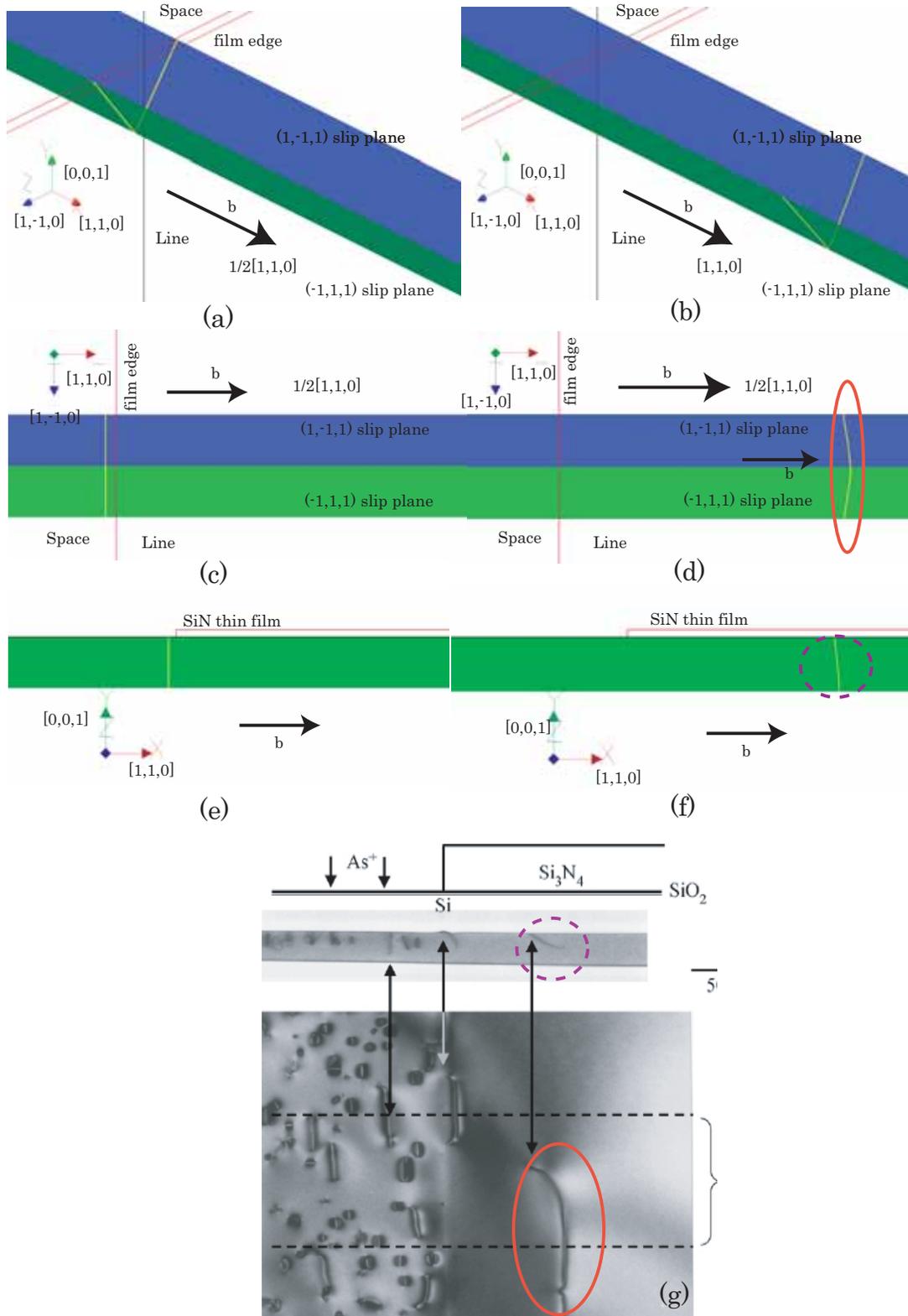


Fig. 4.34 (a)(b)(c)(d)(e)(f) Snapshots of simulated dislocation loop. (a)(c)(e) initial state. (b)(d)(f) stationary configuration.(f) TEM Image of Experiment result [10]

転位停止位置の SiN 膜厚依存性

続いて転位停止位置の SiN 膜厚依存性について実験結果と解析結果の比較を行なう。Fig. 4.35 は、転位の SiN の角部からの移動距離を SiN の膜厚を変化させて実験結果とともにプロットしたものである。膜の初期応力として 1.6[GPa] を与えた。左側 y 軸に実験値、右側 y 軸に解析値を示す。実験値・解析値にはその絶対値には差があるものの Fig. 4.35 より定性的な傾向はよく一致していることが分かる。一般にエッジ端に働くラインフォースは膜厚と膜応力の積に比例するため、膜の応力場を駆動力とする PED の移動距離もまた膜厚に比例すると考えられるが、実験結果・解析結果ともこの傾向が良く現われている。

実験値と解析値の定量値における差を生む原因は 2 つ存在する。まず第一に実験値は全ての PED の移動距離の平均値を取ったものであるため、薄膜膜厚依存性の定性的な傾向を議論するうえでは問題ないと考えられるが、定量的な議論においては不適當である可能性があることがあげられる。第二に SiN-Si 界面からの影響が考えられる。Fig.4.34(g) にも表れているように、実験結果において PED はその進行方向 $[1, 1, 0]$ に対して、界面と接している両端が若干進行方向後方に取り残される形で移動している。これに対して解析結果では Fig.4.34(d) に示されているように実験ほど顕著にこの傾向が現れていない。従って定量的な比較を行なうためには界面力の評価法を変更し精度を上げる必要があると考えられる。

転位停止位置の酸化膜厚依存性

続いて転位停止位置の熱酸化膜 (SiO_2) 膜厚依存性について実験結果と解析結果の比較を行なう。Fig. 4.36 は、転位の SiN の角部からの移動距離を SiO_2 の膜厚を変化させて実験結果とともにプロットしたものである。SiN の膜厚は 100, 200, 300[nm] としそれぞれプロットした。左側 y 軸に実験値、右側 y 軸に解析値を示す。実験値・解析値にはその絶対値には差があるものの Fig. 4.36 より実験結果と解析結果は定性的な傾向はよく一致していることが分かる。熱酸化膜はべた膜膜であり、SiN 薄膜 (100 ~ 300[nm]) に比べて非常に薄い (3 ~ 9[nm]) ため、酸化応力値は 0 として解析を行なっている。定性的な傾向としては、やはり SiN 薄膜に比べて熱酸化膜は非常に薄いため PED の運動に大きな影響を及ぼしていないことが、実験結果・解析結果に現われている。

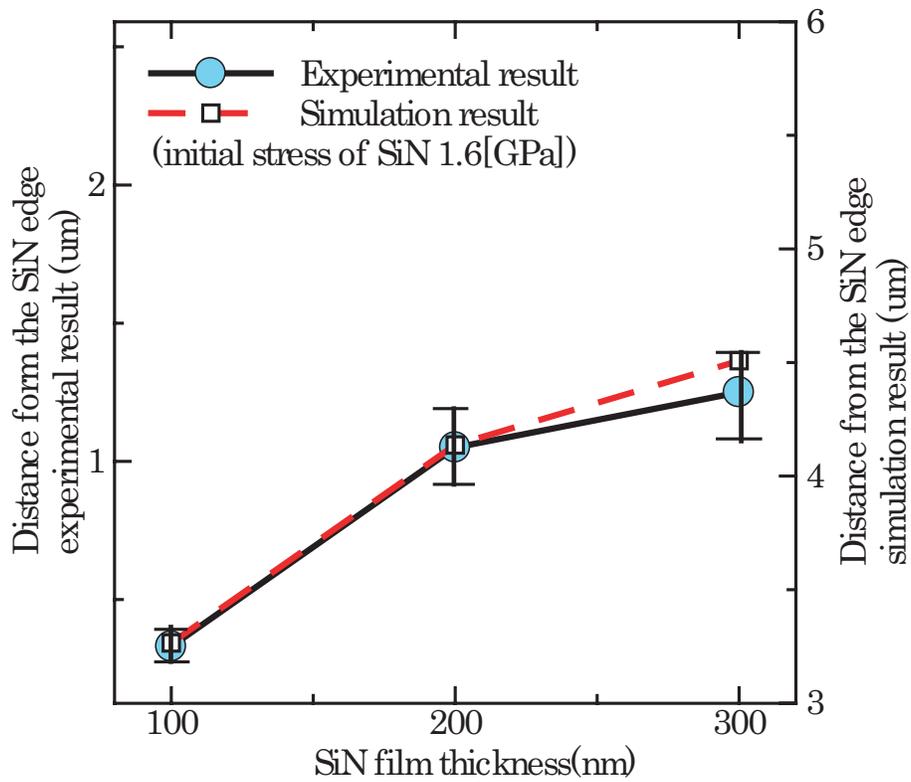


Fig. 4.35 Dependence of the PEDs position from the SiN edge on SiN thickness.

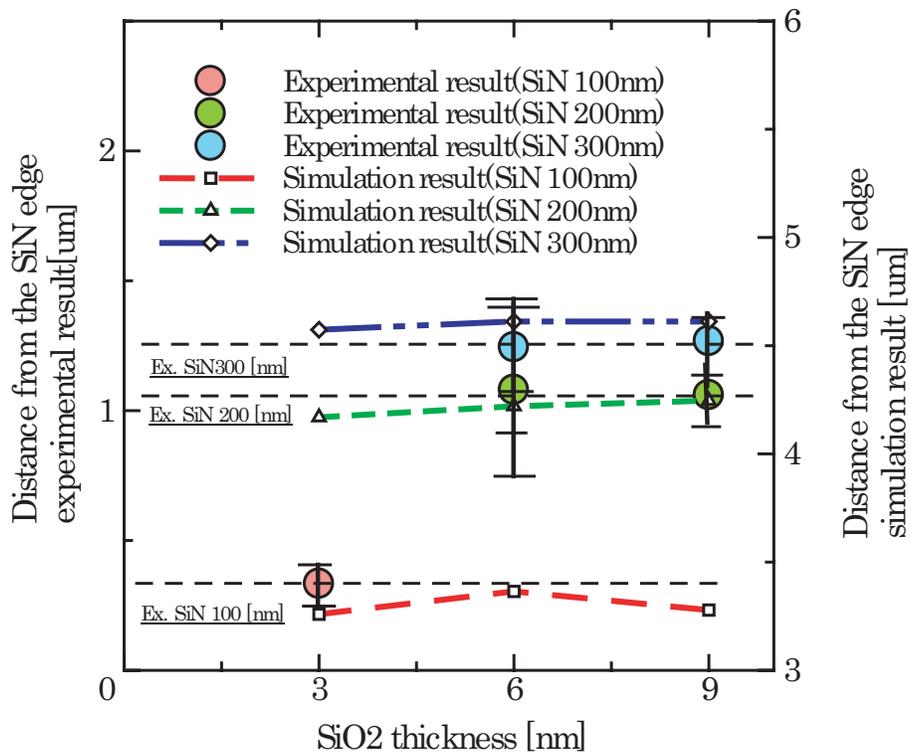


Fig. 4.36 Dependence of the PEDs position from the SiN edge on SiO₂ thickness.

4.6 結言

イオンインプランテーション起因の転位発生現象に対してフランク部分転位の unfaulting に基づいた仮説を提案し, その仮説にそって分子動力学法・転位動力学をスケールに応じて使い分け実験で発生している現象について検証を行なった. その結果 unfaulting を含む転位の射出機構を再現することが可能となった.

第5章 析出物起因転位発生への適用

5.1 緒言

ウエハの熱処理時に発生するスリップ [76, 77] の抑制は半導体の歩留まり向上のための大きな課題となっている。スリップとは無転位シリコン結晶中になんらかの原因で転位が発生し、酸素などの不純物の影響を受けながら増殖したものである。よってスリップ抑制のためには転位の発生と増殖を抑える必要がある。このためには不純物周りの転位の発生機構を知ることが重要である。

高温でシリコンに固溶していた析出物が低温にもたせられると過飽和状態になることがある。このような不純物はシリコン中に析出することになる。一般に酸素や遷移金属不純物のような侵入型不純物は、シリコンとの化合物である。不純物原子は析出相の格子位置を占めるので、析出物の体積は、その中に含まれる Si 原子がしめていた体積よりも大きくなるのが普通である。今回取り扱う酸化物 SiO_2 (Bulk Module Defect: BMD) の場合には体積は約 2 倍に増える。すると析出物周りには大きな弾性ひずみが生じるので、それによるエネルギーを緩和するため結晶欠陥が発生する。結晶欠陥の発生の仕方には 2 通りある。1 つは析出物の成長につれ Si の侵入型原子が 1 個ずつ母材結晶中に放出される過程で、侵入型 (interstitial) 原子が (1, 1, 1) 面に沿って板状に集合し、析出物周りに侵入型 (extrinsic) 積層欠陥 (stacking fault) を形成する。もう 1 つは析出物の半径がある程度大きくなり、その周りの応力場が転位発生の応力値に達した場合に Fig.5.1 のようなパンチアウト転位 (punched out dislocation) を発生させる。パンチアウト転位は転位線とバーガースベクトルを含む柱面に沿って運動することのできるプリズマテック (prismatic) 転位ループの一種である。一旦このようにパンチアウト転位が発生すると比較的弱い基板内の熱応力を駆動力に増殖し、上記のようなスリップをシリコン基板に発生させる。

本章ではプリズマテック転位ループ形成によるパンチアウト転位発生の転位動力学解析を行い、その発生機構を転位動力学を用いて再現することを目的とする。

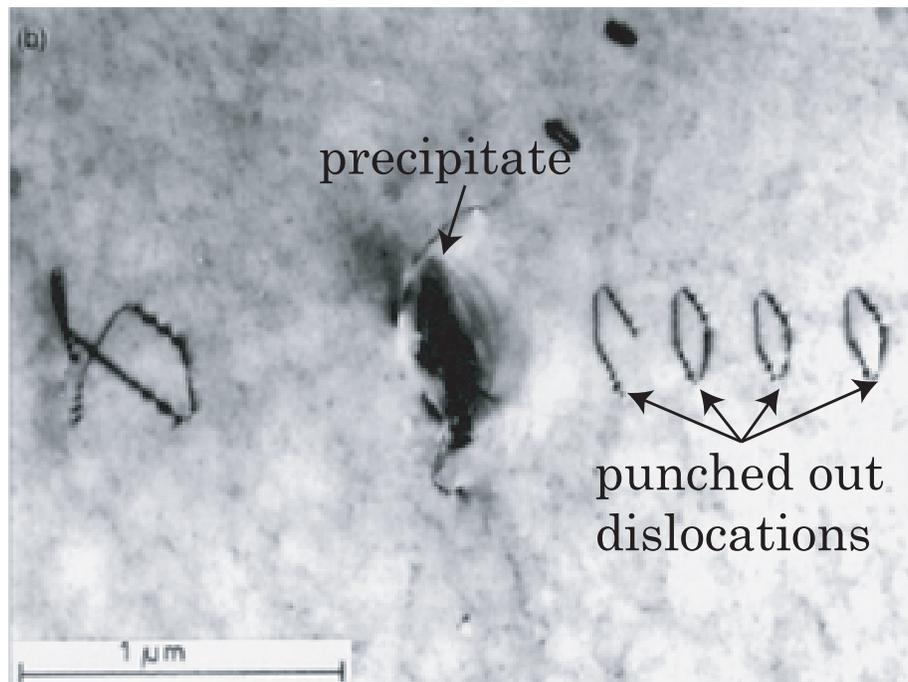


Fig. 5.1 TEM image of dislocations punched out from precipitate [12].

5.2 解析モデル

パンチアウト転位形成のモデルは Ashby ら [13] によって提案されている。Ashby らは弾性論理論解を用いた析出物周りの応力場解析を行い、そこから求められる転位駆動力となる分解せん断応力と転位論のブラウン近似 [43] に基づいた張力の比較から析出物からの転位の張り出しを考察し、あわせてエネルギー的な論点から転位発生について議論を行なった。しかしながら Ashby らは交差滑りを含んだプリズマテック転位ループ形成についてのモデルは提案したものの、こうした複雑な過程を転位論のみを利用して詳細に解析することは不可能である。そこで本研究では転位動力学に基づく数値計算を用いてモデルの再現を行なう。

以下に Ashby らが提案したプリズマテック転位ループ形成のメカニズムを Fig.5.2 に示す。(a)(b) は酸素析出物 (BMD) 周りの滑り面の幾何形状である。(c) では界面のミスフィットによる強い応力場によって発生する初期転位を示す。バーガーズベクトルの方向は完全転位であれば3方向いずれでも構わないが、今回は (a)(b) で設定した座標系において計算がしやすいように仮に $[1, 0, \bar{1}]$ とする。(c) の初期転位は BMD 起因の応力場によって拡張し、ループ上のある素片において交差滑り先の滑り面の分解せん断応力の方が、現在の滑り面の分解せん断応力より大きくなる場合で、なおかつその素片がらせん成分のみをもつ場合に交差すべりが起きる 2.2.8。こうした交差滑りを都合 4 回繰り返すこと ((d),(e)) でプリズマテック転位ループが構

成される (f) .

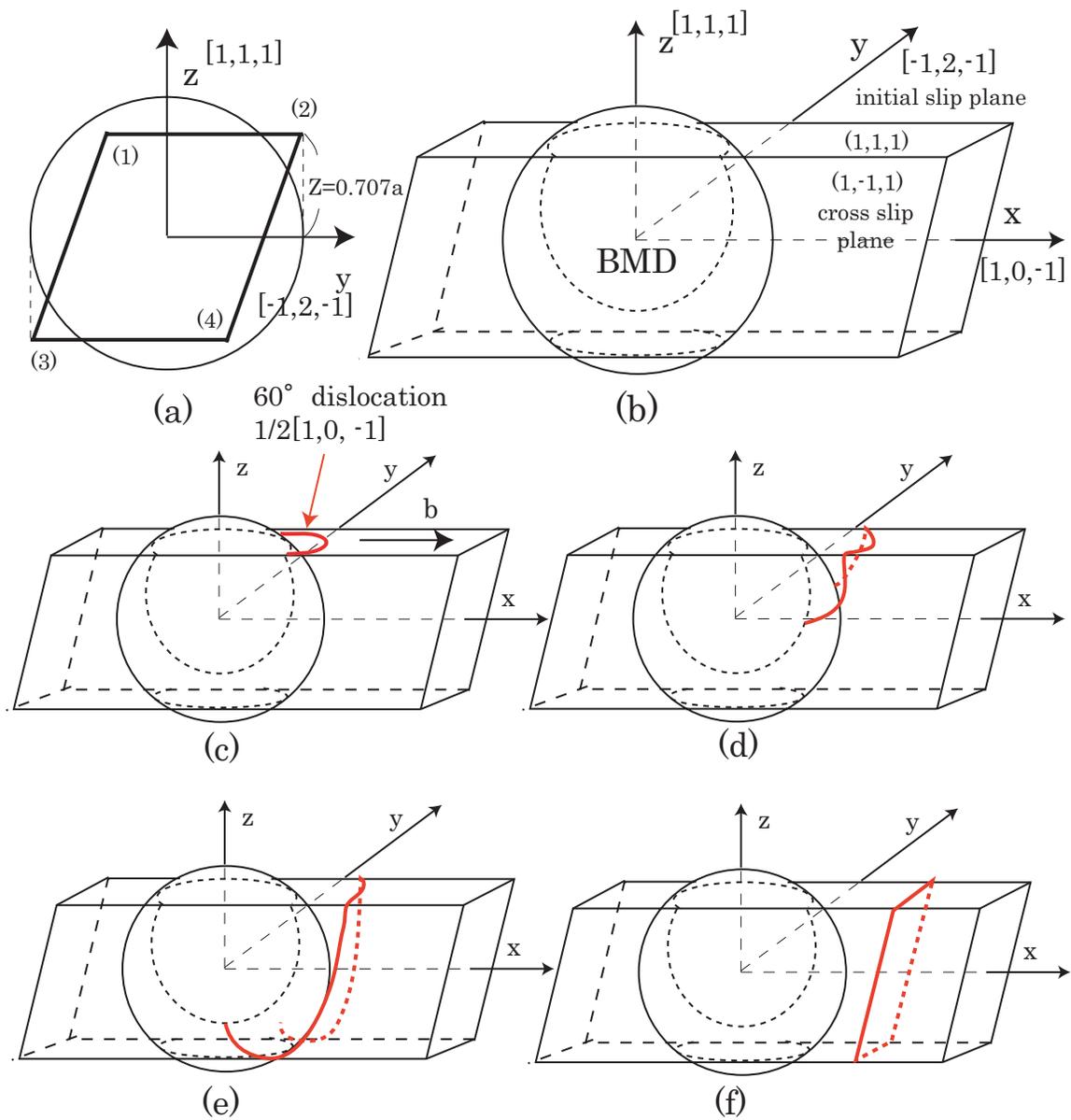


Fig. 5.2 Schematics of the generation of prismatic loops at a particle [13]. (a)(b) The geometry of the slip planes around BMD. (a)Cross sectional view (b)3D-view. (c) A share loop on the (1, 1, 1) glide plane with the Burgers vector $1/2[1,0,\bar{1}]$ expands until its screw segments lie parallel to highly stressed cross-slip planes. Repeated cross slip then generates a prismatic loop as shown (b)~(d).

5.3 応力場解析

転位動力学計算を行なうにあたって外部応力場を何らかの手法で計算して入力してやる必要がある．BMD形状を球状と仮定するなら,BMDの作り出す応力場は弾性論を用いて簡単に計算することが可能である．文献 [78] における水圧を受ける球かとして近似するならば下式のようなになる．

$$\begin{aligned}\sigma_r &= \frac{a^3}{r^3} p \\ \sigma_\theta &= -\frac{1}{2} \frac{a^3}{r^3} p \\ \sigma_\phi &= -\frac{1}{2} \frac{a^3}{r^3} p\end{aligned}\quad (5.1)$$

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad \text{where } r \geq a$$

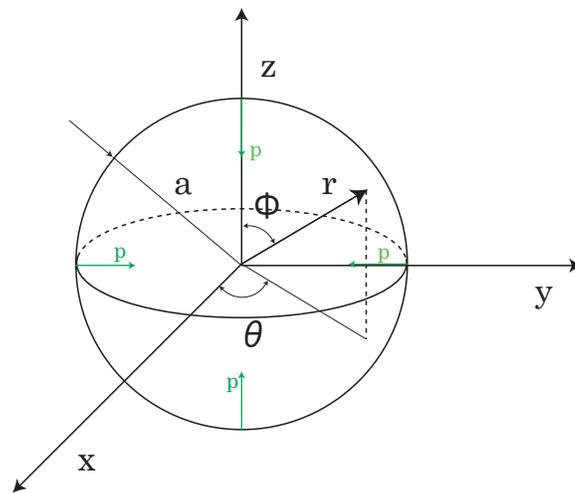


Fig. 5.3 The Geometry of the coordinate to calculate stress field around BMD. Some symbol used in eq.5.1 are shown.

ここで a は球かの半径, p は水圧であり,各パラメータの位置関係は Fig.5.3 に示す通りである．極座標表示のままでは今後の計算において都合が悪いため式 5.1 を直交座標系に変換

し、なおかつパラメータを変換することで下式を得る。

$$\sigma_{xx} = -\frac{2\mu a^3 \varepsilon}{r^3} \left(2\frac{x^2}{r^2} - \frac{x^2 z^2}{s^2 r^2} - \frac{y^2}{s^2} \right) \quad (5.2)$$

$$\sigma_{yy} = -\frac{2\mu a^3 \varepsilon}{r^3} \left(2\frac{y^2}{r^2} - \frac{y^2 z^2}{s^2 r^2} - \frac{x^2}{s^2} \right) \quad (5.3)$$

$$\sigma_{zz} = -\frac{2\mu a^3 \varepsilon}{r^3} \left(2\frac{z^2}{r^2} - \frac{y^2}{s^2} \right) \quad (5.4)$$

$$\sigma_{xy} = -\frac{2\mu a^3 \varepsilon}{r^3} \left(2\frac{xy}{r^2} - \frac{xyz^2}{s^2 r^2} + \frac{xy}{s^2} \right) \quad (5.5)$$

$$\sigma_{yz} = -\frac{6\mu yz a^3 \varepsilon}{r^5} \quad (5.6)$$

$$\sigma_{zx} = -\frac{6\mu xz a^3 \varepsilon}{r^5} \quad (5.7)$$

$$s^2 = x^2 + y^2 \quad \varepsilon = \frac{3B}{3B + 4\mu} \delta$$

なお上式を導くために $p = -4G\varepsilon$ とし、 μ は縦弾性係数、 B は析出物の体積弾性率、 δ は母材（シリコン）と酸素析出物のミスフィットであり全て物性値である。式 5.2~5.7 及びピーチ・ケラー式 2.2 より滑り系 $(1, 1, 1)[1, 0, \bar{1}]$ の分解せん断応力 (τ_{rss}) は

$$\tau_{rss} = \sigma_{zx} = -\frac{6\mu xz a^3 \varepsilon}{r^5} \quad (5.8)$$

となる。よって τ_{rss} が最大値をとるのは $z = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}a$ の時であり、このとき $\tau_{rss} = -3\mu\varepsilon$ が最大値である。従って $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}a, 0, \frac{1}{\sqrt{2}}a \right)$ を転位の発生地点として仮定する。このとき

1. BMD の応力場が球対称となっていること
2. 交差すべりの条件として”ループ上のある素片において交差滑り先の滑り面の分解せん断応力の方が、現在の滑り面の分解せん断応力より大きくなる場合に交差滑りを起こす”という条件が存在すること
3. プリズマテック転位ループは柱面上で閉じた曲線になる必要があること

という3つの条件を満たす柱面は一意に決まり、Fig.5.2(a) のようなライン (1) ~ (4) で構成される4平面からなる柱面となる。よって今研究では転位を構成する素片は上記4面のどれかに属するものとして解析をおこなう。

本節の最後に滑り系 $(1, 1, 1)[1, 0, \bar{1}]$ および $(1, \bar{1}, 1)[1, 0, \bar{1}]$ 上の分解せん断応力の分布を Fig.5.4(a)(b) に示す。なお以降、各パラメータを $a = 100[\text{nm}]$, $\mu = 60.5[\text{GPa}]$, $\delta = 0.025$, $B = 35.6[\text{GPa}]$ と仮定して解析を行なうこととする。BMD 自体の応力場が球対称であるため、(a)(b) とともに BMD を中心として全く同じ形の応力場を示している。

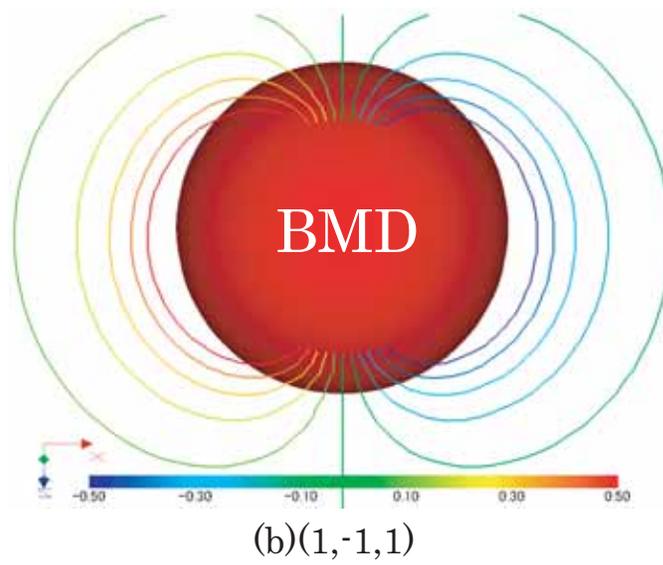
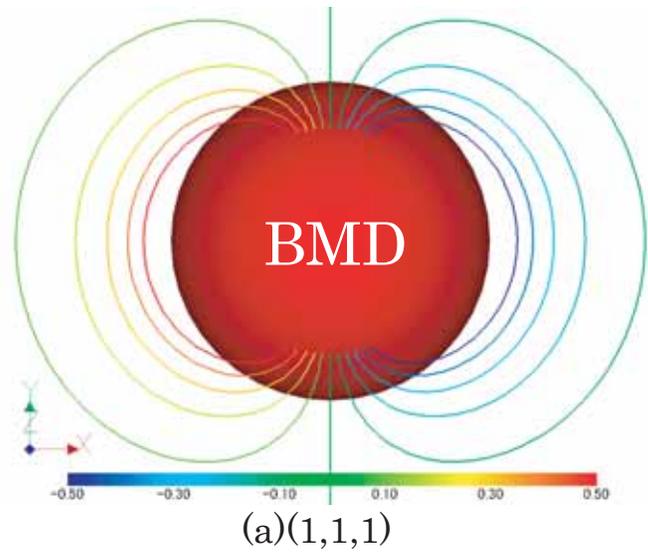


Fig. 5.4 The resolved shear stress contour (a)on the (1, 1, 1) plane and (b)on the (1, $\bar{1}$, 1) plane.

5.4 転位動力学解析

今回解析に対しては、スケールが小さく形状を精密に再現するため、Differential Stress Methods 2.2.3 を用いて計算を行なう。また酸素濃度は酸素析出物が存在することからも比較的濃いと考えられるため、CZ ウエハと同一の $C_0 = 8.0 \times 10^{17} [\text{atoms}/\text{cm}^3]$ の物性値を用いて計算を行なった。転位動力学解析結果を Fig.5.5 に示す。Fig.5.5 は $0 \sim 250 [\mu\text{sec}]$ の間パンチアウト転位が時間発展する様子を $10 [\mu\text{sec}]$ 間隔でプロットしたものである。当初上面の $(1, 1, 1)$ 面に配置された初期転位が交差滑りをおこすことで、左右の $(1, \bar{1}, 1)$ 面に広がっていく。その後再度交差滑りをおこし下面の $(1, 1, 1)$ 面に移り、さらに $(1, 1, 1)$ 上で BMD に接する末端同士が対消滅をおこすことで最終的にプリズマティックループを形成している。BMD 周囲の応力場を駆動力として、BMD 周りの交差面を包み込むように回りながら、プリズマティックループを形成するパンチアウト転位の機構が Ashby のモデル [13] そのままに再現されている。Fig.5.6 と Fig.5.7 はそれぞれ初期ステップ (a)、交差滑り (b)~(e)、下面 $(1, 1, 1)$ での対消滅 (f) が起こっているステップをそれぞれ鳥瞰図、上面図からスナップショットを取ったものである。転位反応が上手く取り込まれていることが分かる。

最後に TEM 写真との比較を Fig.5.8 に示す。(a) はパンチアウト転位を 2 本発生させた場合のシミュレーションのスナップショットであり、(b) はパンチアウト転位の TEM 画像である [12]。両者は非常によく類似している。このことから転位のすべり系の過程や析出物周り応力場の近似が妥当であることを示すことができた。

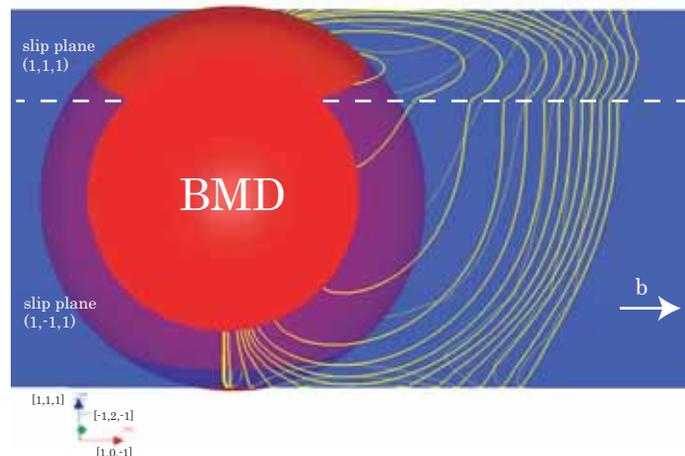


Fig. 5.5 Computational figures of the punch out dislocation on the initial glide plane $(1, 1, 1)$ and cross slip plane $(1, \bar{1}, 1)$ with Burgers vector $\frac{1}{2}[1, 0, \bar{1}]$ under applied stress caused by the BMD at subsequent equidistant time moments.

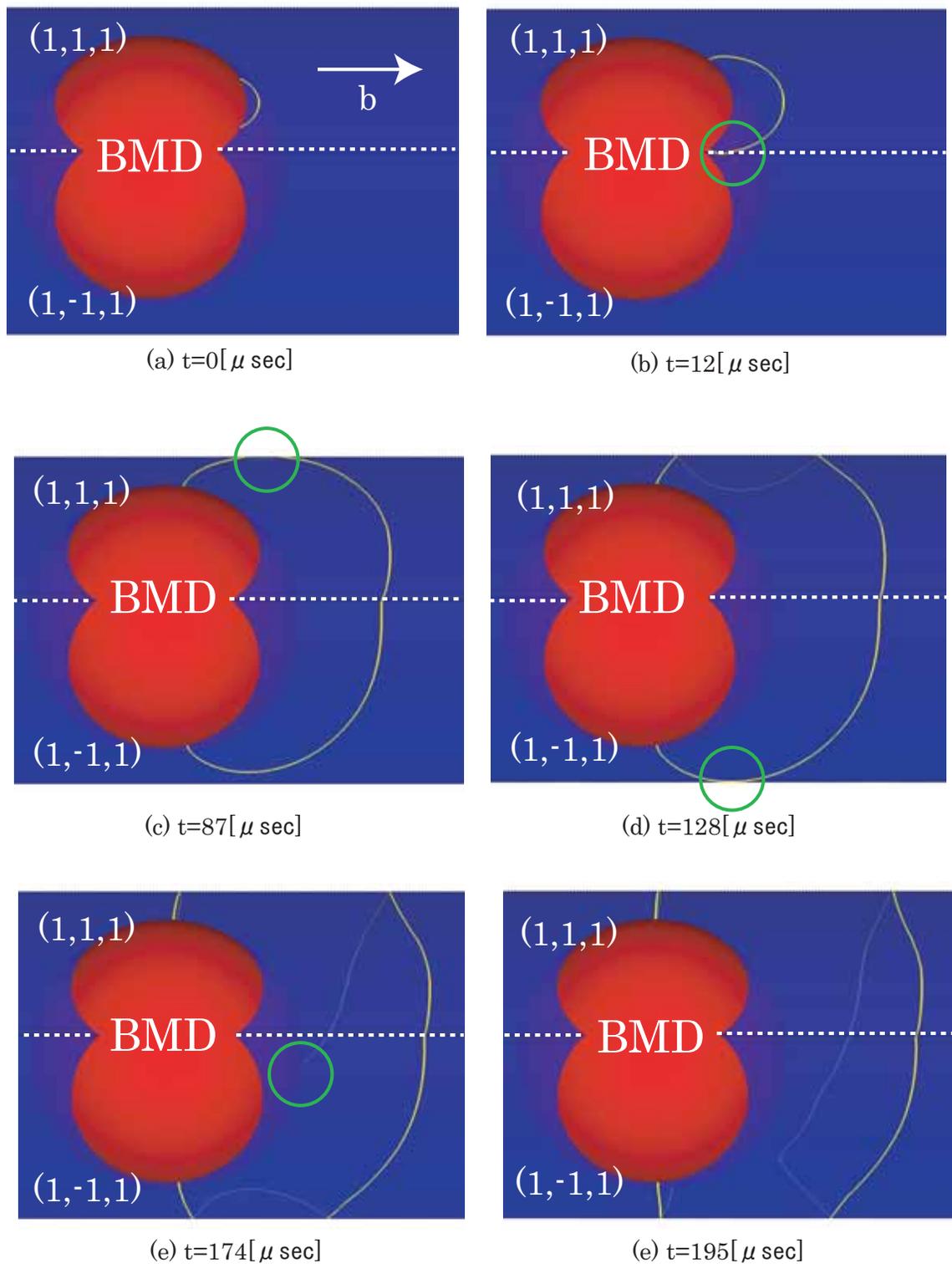


Fig. 5.6 The simulated operation of a punched out dislocation with 3d view. The sequence of the operation is shown at various time moments:(a) $t = 0[\mu\text{sec}]$;(b) $t = 12[\mu\text{sec}]$;(c) $t = 87[\mu\text{sec}]$;(d) $t = 128[\mu\text{sec}]$;(e) $t = 174[\mu\text{sec}]$;(f) $t = 195[\mu\text{sec}]$

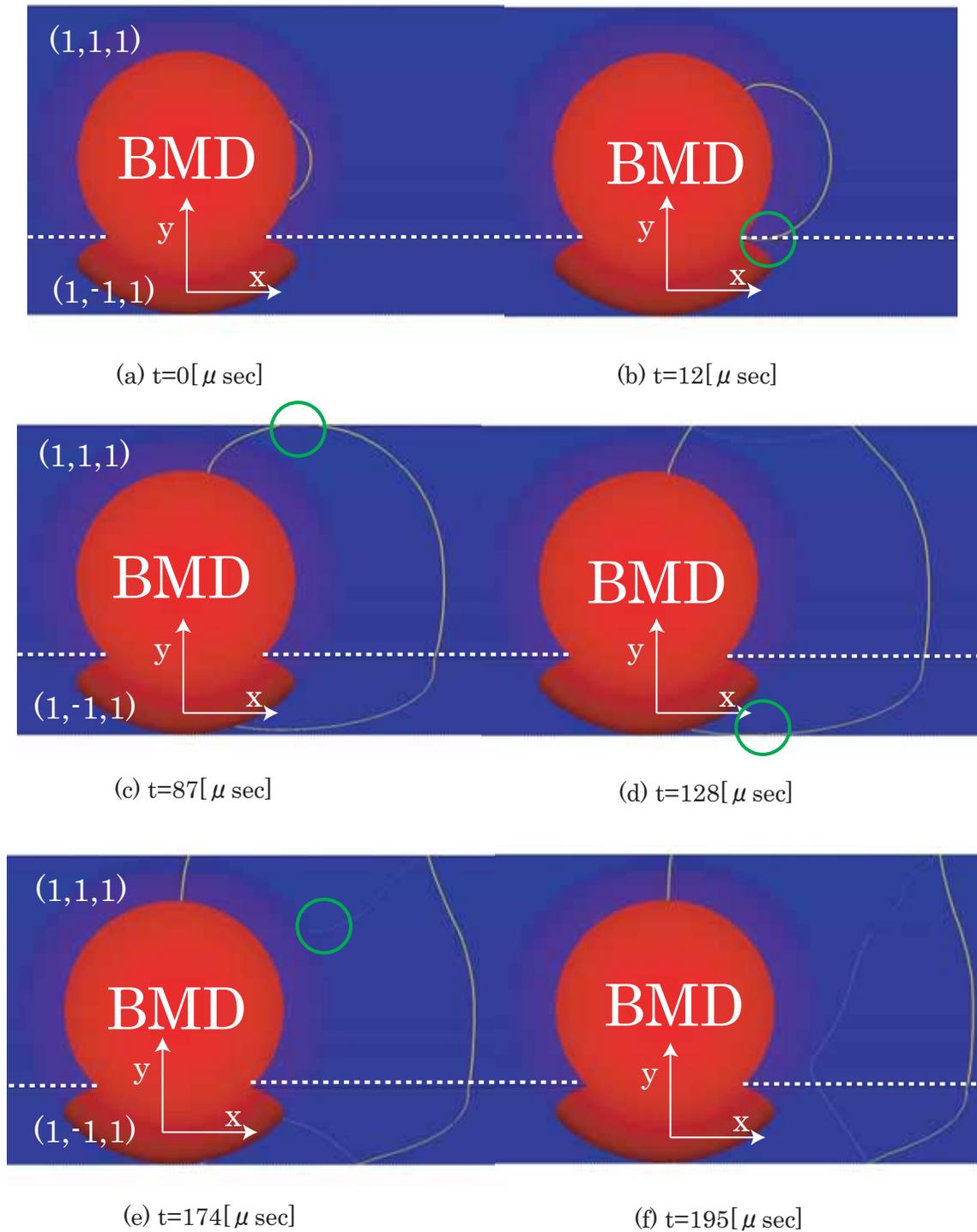


Fig. 5.7 The simulated operation of a punched out dislocation with upside view. The sequence of the operation is shown at various time moments:(a) $t = 0[\mu \text{sec}]$;(b) $t = 12[\mu \text{sec}]$;(c) $t = 87[\mu \text{sec}]$;(d) $t = 128[\mu \text{sec}]$;(e) $t = 174[\mu \text{sec}]$;(f) $t = 195[\mu \text{sec}]$

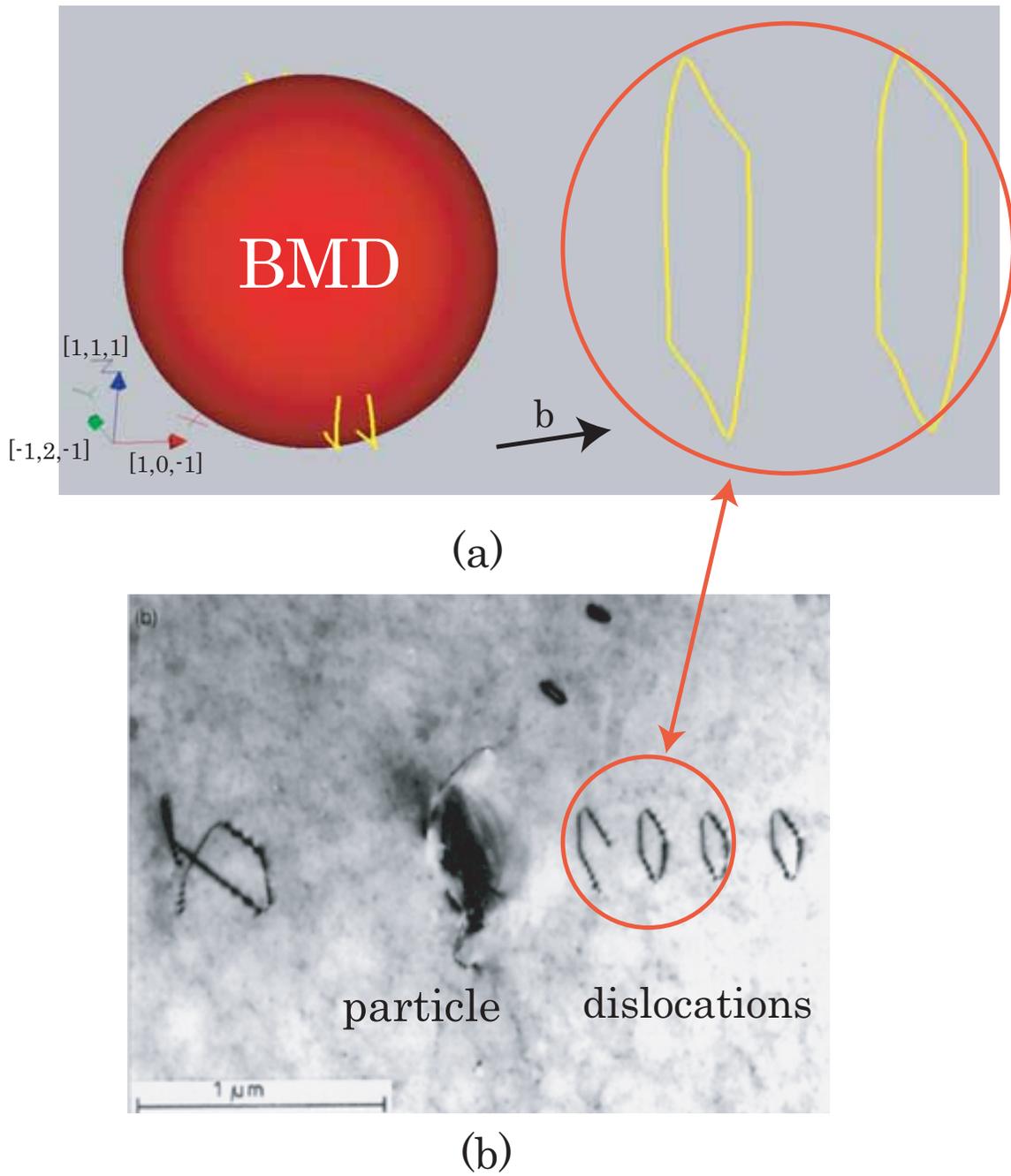


Fig. 5.8 Comparison of the simulation result(a) with TEM image(b) [12].

5.5 考察

前述しているようにパンチアウト転位は発生過程において交差滑りを起こして初めてプリズマティック転位ループを形成することができ、発生した析出物から離れて遠方へと移動することが可能となる。そこで考察として、交差滑りの有無による現象の変化の度合いについて検証を行なう。

Fig.5.9 はそれぞれ交差滑りを仮定した場合 (a) としなかった場合 (b) について 0 ~ 250[μsec] までの時間発展の様子を 10[μsec] 間隔でプロットしたものである。交差滑りをおこさない (b) では、転位は駆動力と張力が釣りあう形状で平衡状態に達しその運動を停止する。これに対して交差すべりを仮定した (a) では、プリズマティック転位ループを形成することにより、張力による停止効果を受けることなく BMD の応力場により射出され、遠方へと運動を続ける。

交差滑りを起こさない場合の平衡状態の詳細を Fig.5.10 に分解せん断応力の等高線と共に示す。転位先端は分解せん断応力が 100[MPa] ほどの箇所まで停止している。式 2.20 よりこの近辺の転位に作用する駆動力は 0.038[nN] と見積もれる。停止位置において転位先端は BMD 中心から約 200[[nm]] ほど移動するので、このときのループ形状を半径 100[nm] の円ループと近似すると式 2.14 より 0.044[nN] と予想され、この値は駆動力とほぼ同じである。誤差は円ループと近似してしまった点に存在すると考えられるため、この停止位置は非常に妥当であると考えられる。この平衡状態の形状は Ashby ら [13] が転位論を用いて計算した結果と類似した形状である。

Fig. 5.11(a) は、BMD 中心から転位先端までの距離 (r) を時間に対して交差滑りの有無 2 通りの解析結果をプロットしたものである。(b) は r の幾何関係を図示したものである。交差滑りを仮定しない場合は上記説明したように張力と駆動力が釣り合う形で 1[ms] 近辺で完全に運動を停止する。この場合転位は発生した析出物周りで完全に停止してしまうため、拡張することなく基板汚染の原因とは成りえないと考えられる。これに対し交差滑りを仮定した場合は、15[ms] 後においても運動を停止することなく移動し続ける。このようなプリズマティック転位ループの運動において、その一部が他の転位や析出物との相互作用により停止することで 2 重交差滑りによるフランク・リード源の形成などで転位増幅機構を形成し、結果としてスリップなどの基板汚染の原因となり得る。

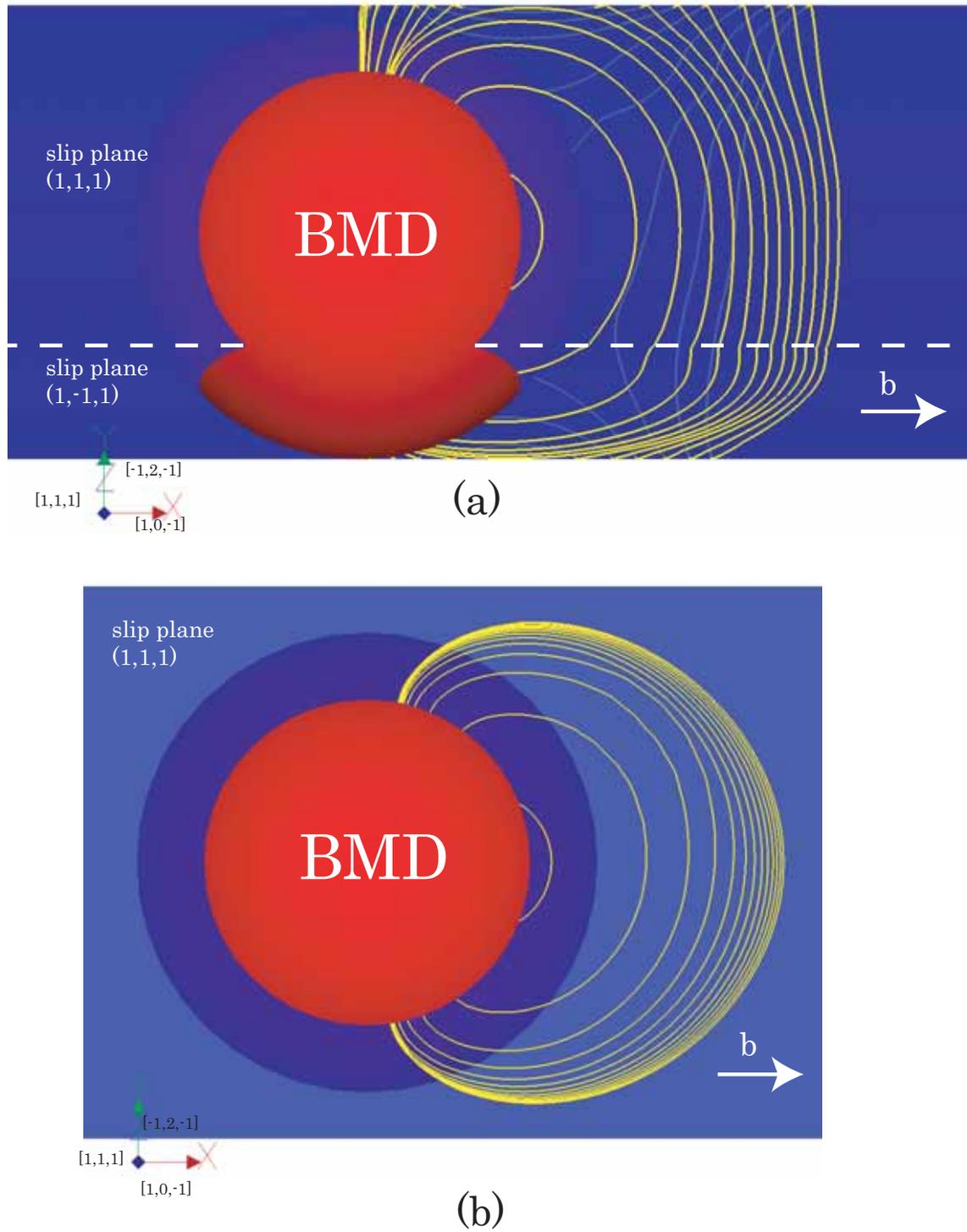


Fig. 5.9 Comparison of the simulation result (a)with cross slip with (b)without cross slip from upside view.

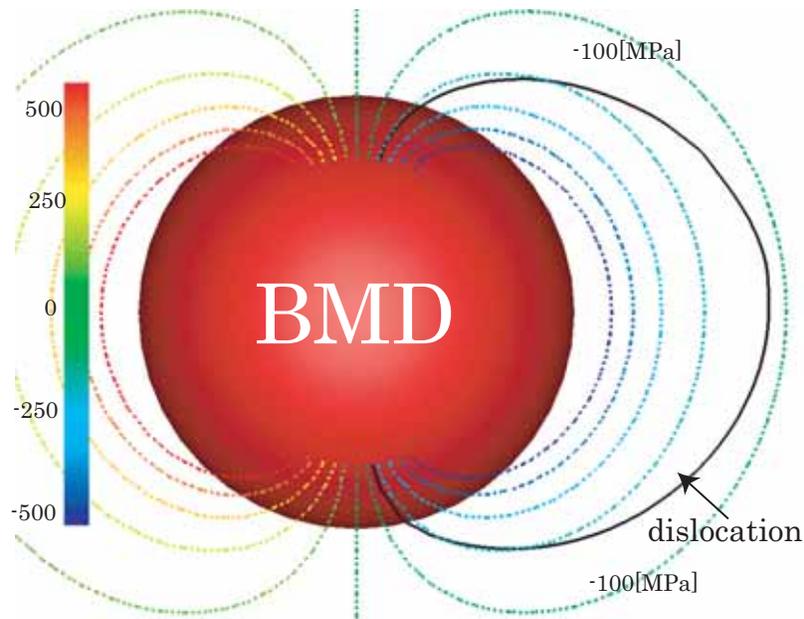


Fig. 5.10 The equilibrium shape of a dislocation loop(solid line) bulging from the interface of a particale with Iso-stress contour line as broken lines.

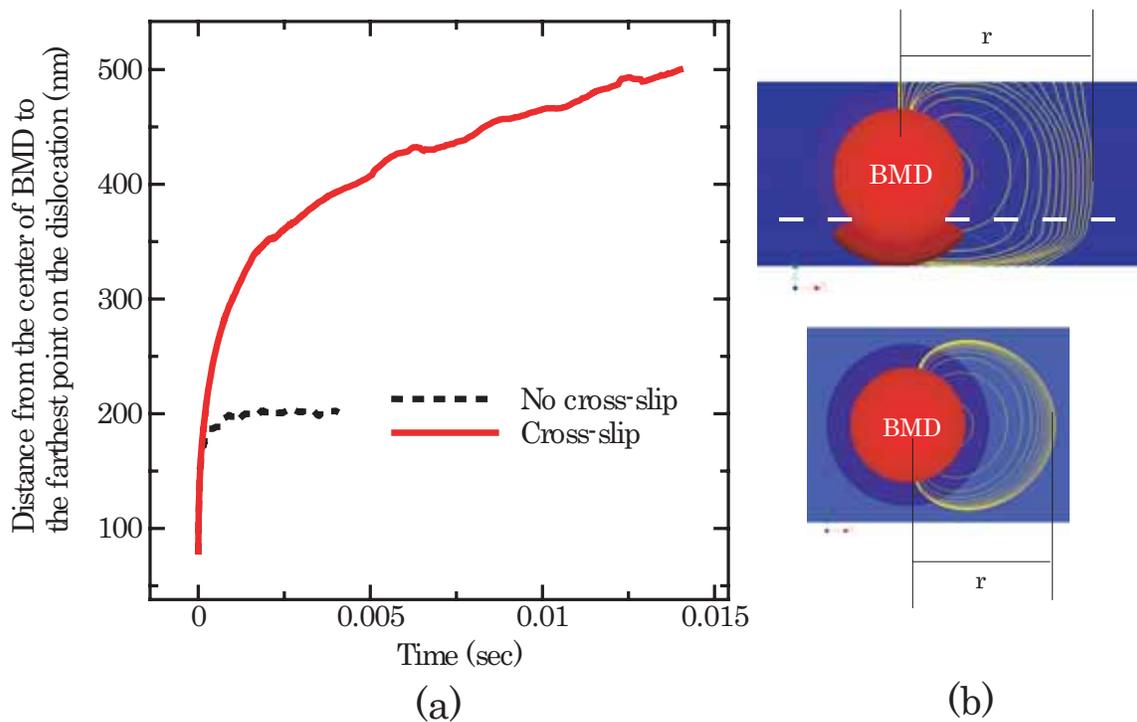


Fig. 5.11 (a)Time history of the distance from the center of the BMD to the dislocation edge. Simulation result with the cross slip (the solid line) is compared with without the cross slip (dash line).(b) The distance used in (a) is graphically shown.

5.6 結言

今章では析出物起因のパンチアウト転位形成機構を転位動力学を用いて再現することが可能であることを示した。すなわち Ashby ら提案の機構 [13] を転位動力学を用いて解析的に再現できることを示し、その結果が実験結果の TEM 画像 [12] との比較においてよく一致することを示した。パンチアウト転位形成機構はスケールが比較的大きいため分子動力学などを用いて全ての反応機構を再現することは難しい。このようなスケールにおいては適切な形でローカルルールを組み込むことで現象を再現できる転位動力学法が改めて有効であることを示した。

第6章 結論と展望

6.1 結論

本研究では半導体デバイス内に発生する転位の解析を目的とする転位動力学シミュレータを開発し, 高速度化・高機能化・汎用化させた. 応力起因, イオンインプランテーション起因, 析出物起因と3つの異なる発生起源をもつ転位現象に適用し, 転位発生現象や転位運動の解析ツールとして有効であるという結論を得た. 以下に本研究で得た結果を列挙する.

1. 汎用的な高速・高精度な転位動力学シミュレータを開発した.
2. SiN 真性応力起因転位発生問題に適用し, 実スケール・実時間で実験との一致を得た.
3. イオンインプランテーション起因の転位発生問題に適用し, unfaulting を伴う転位射出メカニズムを解明した.
4. 析出物起因転位発生問題に適用し, パンチアウト転位機構を再現した.

本研究の成果である転位動力学シミュレーターは, 将来の半導体プロセス設計に必要とされる高度な転位動力学解析にも資するものであると考えられる.

付録A

A.1 古典分子動力学法

本項はごく一部を除いて大部分を原氏の博士論文 [37] から引用させて頂いた。ここに改めて謝意を申し上げる。

分子動力学法では、原子間相互作用を特徴づける経験的ポテンシャルを定義することで、各原子に働く力を評価する。各原子に古典的力学法則を適用し、ニュートンの運動方程式を数値的に解く。例えば原子数を N とし、 N 原子の初期条件を規定すれば、 $6N$ 次元の位相空間上にただ一つの軌跡が定まり、各原子の時間発展を決定論的に追従できる。この時、各時間ごとに系の力学量の瞬間値が定義できる。瞬間値の長時間平均が位相空間平均に等しいというエルゴード仮説を用いれば、マクロな物理量を得ることができる。実際のシミュレーションアルゴリズムは、以下に示すように初期構造作成後、2~5 のサイクルを繰り返すことになる。

1. 初期条件作成
2. 周期境界条件に基づき、原子間力を計算する原子対を算出 (Book-keeping 法)
3. ポテンシャルから原子間力を算出
4. Verlet 法により、 Δt 後の原子位置・速度を評価
5. 物理量の算出
6. 2 に戻る

A.1.1 シリコンの経験的原子間ポテンシャル

分子動力学では、原子間ポテンシャルは全粒子の位置の関数として扱われる。よって、原子間力は、ポテンシャルを Φ とすれば、ヘルマン・ファイマン則から、 $F_a = -\frac{\partial\Phi}{\partial r_a}$ として原子位置での微分から得られる。分子動力学計算で物質の物理的性質や構造が再現できるかどうかは、適用する経験的ポテンシャルの精度にほぼ一存する。それゆえ様々な関数形のポテンシャルが開発されてきた。一般的にはポテンシャルの関数形は対象物質の結合特性に依存する。例えば無機化合物形であれば、2 原子間の距離のみの関数である Lennard-Jones 型、Morse 型 [79] といった 2 体ポテンシャルが広く用いられる。共有結合形では、3 原子の位置関係の

関数である 3 体ポテンシャル (Tersoff 型 [54], Keating 型 [80] 等) が挙げられる . また , 電子の密度を関数として埋め込んだ EAM [81] 型のポテンシャルは金属に対して多くの成果を挙げている .

シリコンに対しても , これまでに様々な経験的ポテンシャルが提案されている . シリコンは共有結合の結合方向性ゆえ , 2 体ポテンシャルでの記述は困難であり , いずれも 2 体ポテンシャルに比べ計算が煩雑な多体ポテンシャルとなる . 主なものに , Stillinger-Waber (SW) ポテンシャル [53] , Tersoff ポテンシャル [54] , EDIP ポテンシャル [55] が挙げられる . それぞれに長短・適用範囲があるが , 本研究ではシリコン原子間ポテンシャルに Tersoff のモデルを採用した . 各ポテンシャルの特徴は Balamane ら [56] の論文に詳しくレビューされている .

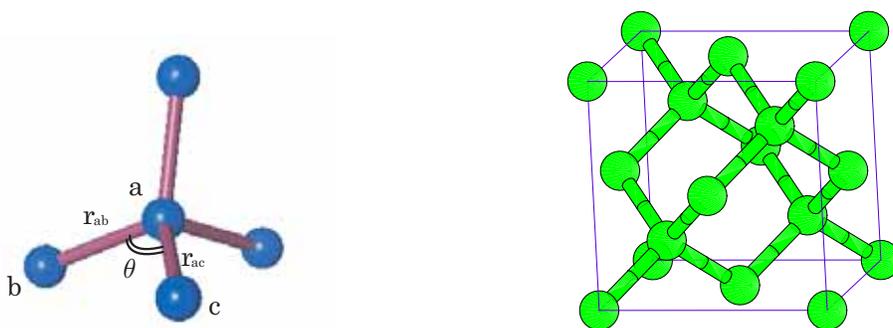


Fig. A.1 Atomic configuration of diamond structure.

Stillinger-Waber (:SW) ポテンシャル

SW ポテンシャルは , 現在使用されているポテンシャルの中では最も古くから用いられているポテンシャルである . 一般的な 2 体ポテンシャルに 3 体間の相対項を付加する形で作られている . $r_{ab}, r_{ac}, \cos\theta_{abc}$ は Fig.A.1 に示す距離と角度である . また ε, σ はそれぞれ結合の強さ , 原子の大きさを表すパラメータである .

$$\Phi = \sum_{\substack{a,b \\ a < b}} V_{ab}(a,b) + \sum_{\substack{a,b,c \\ a < b < c}} V_{abc}(a,b,c) \quad (\text{A.1})$$

$$V_{ab}(r_{ab}) = \varepsilon f_2(r_{ab}/\sigma) \quad (\text{A.2})$$

$$V_{abc}(r_{abc}) = \varepsilon f_3(\mathbf{r}_a/\sigma, \mathbf{r}_b/\sigma, \mathbf{r}_c/\sigma) \quad (\text{A.3})$$

2 体項は以下の形をとる . ここで R はカットオフを表すパラメータである .

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q})\exp[(r - R)^{-1}], & r < R \\ 0, & r \geq R \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

3 体項は以下の形をとる .

$$f_3(\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b, \mathbf{r}_c) = h(r_{ab}, r_{ac}, \theta_{bac}) + h(r_{ba}, r_{bc}, \theta_{abc}) + h(r_{ca}, r_{cb}, \theta_{acb}) \quad (\text{A.5})$$

$$h(r_{ab}, r_{ac}, \theta_{bac}) = \begin{cases} \lambda \exp[\gamma(r_{ab} - R)^{-1} + \gamma(r_{ac} - R)^{-1}] \times (\cos\theta_{bac} + \frac{1}{3})^2, & r_{ab}, r_{ac} < R \\ 0, & r_{ab} \text{ or } r_{ac} \geq R \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

SW ポテンシャルは式 A.6 にあるように 4 配位専用であり , 単結晶ダイヤモンド構造 ($\cos\theta_{abc} = -\frac{1}{3}$) のみをターゲットとしておらず原則としてそれ以外の構造に用いることはできない .

Tersoff ポテンシャル

Tersoff はポテンシャルの複雑な表現を避け , 物理化学的直観によって , 配位数に依存するようにポテンシャルを 2 体の形式で記述し , 3 体効果を暗に含ませた . $r_{ab}, r_{ac}, \cos\theta_{abc}$ は Fig.A.1 に示す距離と角度である .

$$\Phi = \sum_a \Phi_a = \frac{1}{2} \sum_{a \neq b} V_{ab} \quad (\text{A.7})$$

$$V_{ab} = f_C(r_{ab})[a_{ab}f_R(r_{ab}) + b_{ab}f_A(r_{ab})] \quad (\text{A.8})$$

$$f_R(r) = A \exp(-\lambda_1 r) \quad (\text{A.9})$$

$$f_A(r) = -B \exp(-\lambda_2 r) \quad (\text{A.10})$$

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin[\frac{\pi}{2}(r - R)/D], & R - D < r < R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases} \quad (\text{A.11})$$

f_R は反発力 , f_A は引力を表現し , b_{ab} に暗に 3 体項を含ませることによって配位数依存を取り入れている ($a_{ab} \simeq 1$) . b_{ab} は

- ボンドあたりのエネルギーは配位数の単調な減少関数であること
- 3 ~ 12 の配位数ではエネルギーが一定であること

の条件を満たさなければならず , 有効配位数 ζ_{ab} を導入している . さらに ζ_{ab} に近傍との相対距離・結合角の情報を含ませ , 3 体力による結合力の変化を取り入れている .

$$b_{ab} = (1 + \beta^n \zeta_{ab}^n)^{-1/2n} \quad (\text{A.12})$$

$$\zeta_{ab} = \sum_{c(\neq a,b)} f_C(r_{ac}) g(\theta_{abc}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ab} - r_{ac})^3] \quad (\text{A.13})$$

$$g(\theta) = 1 + c^2/d^2 - c^2/[d^2 + (h - \cos\theta)^2] \quad (\text{A.14})$$

$$a_{ab} = (1 + \alpha^n \eta_{ab}^n)^{-1/2n} \simeq 1 \quad (\text{A.15})$$

$$\eta_{ab} = \sum_{c(\neq a,b)} f_C(r_{ac}) \exp[\lambda_3^3 (r_{ab} - r_{ac})^3] \quad (\text{A.16})$$

各パラメーターの値は，表面の再配列に着目してフィッティングされたモデルのもの（T2 model）と，弾性的性質を合わせるようにフィッティングさせたもの（T3 model）が提案されている． Tersoff は両方を表現するフィッティングは不可能であったと報告している． また， R, D, λ_3 については最適化は行なわれていない． 本論文では弾性的な性質が合う T3 モデルを使った．

ポテンシャル形が定まれば，原子配置の一次微分量として力が，ひずみの一次微分量として応力が，ひずみの二次微分量として弾性定数が計算できることになる． ただし， Tersoff ポテンシャルはパラメータ間に複雑な依存関係をもつため，その微分形式は非常に煩雑なものになる． 詳細な微分形式は文献 [82] が非常に参考になる．

A.1.2 周期境界条件

年々計算機能力は向上しているものの、アボガドロ数個もの原子を扱うことはできずスーパーコンピューターの力を借りても現状では 10^9 個程度である [83] .そこで、通常バルクの性質を表すために周期境界条件が用いられる。周期境界条件とは、原子の集合を長さ L の1つの単位胞 (unit cell) と考え、その周り (image unit) に同じものが周期的に並んでいると考える境界条件 (Fig.A.2) で、擬似的な無限系を作ることができる。

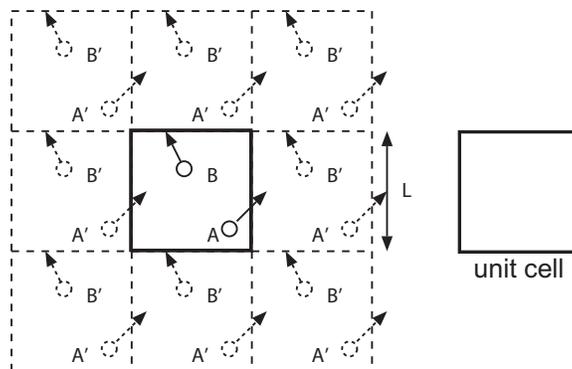


Fig. A.2 Schematic diagram of periodic boundary condition.

A.1.3 Book-Keeping 法とその高速化法

クーロン力のような長距離に及ぶ原子間力を考慮しない場合、一般的に原子間力の計算には数 Å 程度のカットオフ距離が導入される。この時、原子間の相互作用範囲を半径 r_c とすると、ある原子の半径 r_c の球内の原子をあらかじめリストアップしておき、その原子との間の力のみを求めれば計算時間を削減できる。さらに、登録する範囲を r_c より少し大きい $R_c (> r_c)$ としておけば、毎ステップの再登録が必要なくなり効率的である。以上の方法を book-keeping 法と呼ぶ。Fig.A.3 にその概念図を示す。 R_c , または有効ステップ N_{up} は以下のように決定される。

温度 T K での粒子の運動エネルギーから平均粒子速度 v_{ave}^T を求めれば、粒子の最大速度は平均速度の3倍程度となる ($v_{max}^T \approx 3v_{ave}^T$)。この速度と計算時間 (有効ステップ) $N_{up}\Delta t$ を掛け合わせたものがその時間ステップ中に粒子が動ける最大距離 $\Delta r_c = v_{max}^T N_{up}\Delta t$ となる。これより、 N_{up} ステップ中では、 $R_c (= r_c + \Delta r_c)$ 外の粒子は r_c 内に入らないという条件が得られる。

上述した book-keeping 法を用いると、更新登録のたびにかかる計算時間が $O(N^2)$ に比例する。毎ステップ登録を行うわけではないが、大規模な系を扱う場合、好ましいアルゴリズム

とはいえない．そこで本論文では，領域分割法を用いることで登録に要する計算時間を $O(N)$ に削減した．Fig.A.3 に領域分割法の 2 次元概念図を示す．

MD セル全体を一辺 R_c 以上の小さなサブセルに分割し，全計算原子をサブセルに登録する．この時，あるサブセルに登録された原子が力の計算を行うために登録すべき結合原子は，そのサブセル内あるいは隣接するサブセル内に属することとなる．2 次元であれば計 9 個，3 次元であれば計 27 のサブセルに対してのみ登録計算を行えばよく，計算時間の短縮が可能となる．

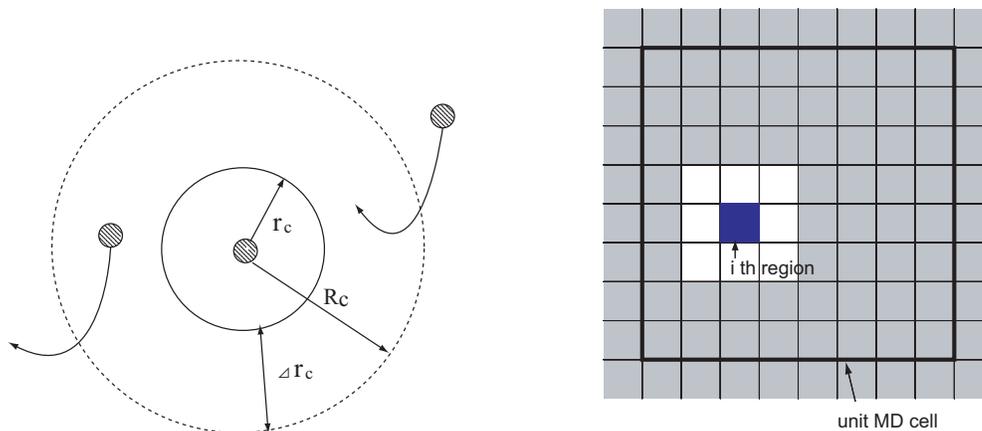


Fig. A.3 Schematic diagram of (left) book-keeping method and (right) domain decomposition method.

A.1.4 運動方程式

分子動力学法では，設定したアンサンブルに応じて異なる運動方程式を用いる．最も基礎的な原子数 (N)・体積 (V)・エネルギー (E) 一定のミクロカノニカルアンサンブル (NVE) の場合，解くべき運動方程式はニュートンの運動方程式 (式 (A.17)) に他ならない．

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (\text{A.17})$$

本論文では NVE アンサンブルの他，温度 (T) が一定に保たれるカノニカルアンサンブル (NVT) を必要に応じて使い分けた．

温度制御法

分子動力学において，系の温度 T は，粒子の運動 v の揺らぎとして統計熱力学観点から式 (A.18) で記述できる．

$$\frac{3}{2}Nk_B T = \sum_a \frac{1}{2}m_a v_a^2 \quad (\text{A.18})$$

この温度 T の制御を実現する有用な方法として，能勢の方法 [84] と束縛法（速度スケールリング）法が知られている．本論文ではより実装が簡便な後者を用いた．速度スケールリング法では，各原子の速度 v_a を強制的にスケールリングすることで，系の運動エネルギーを調節し，系の温度を設定温度へと近づける．即ち，ある時刻 t での原子速度から測定した温度を T ，設定温度を T_c とした時，式 (A.19) による速度変換を適用すればよい．

$$v'_a = \sqrt{\frac{T_c}{T}} v_a \quad (\text{A.19})$$

運動方程式の数値積分法

アンサンブルを定めれば，あとは適当な数値積分法を用いて運動方程式を解けばよい．本論文では分子動力学の数値積分法として広く用いられている速度 Verlet 法 [85] を用いた．

A.1.5 無次元化

物理量はすべて \AA , eV 系で無次元化し，計算結果に一般性を持たせた．本シミュレーターで用いた無次元化を以下に示す．

$$\text{距離} \quad x^* = \frac{x}{d} \quad (r^* = \frac{r}{d}) \quad (\text{A.20})$$

$$\text{質量} \quad m^* = \frac{m}{m_{S_i}} \quad (\text{A.21})$$

$$\text{時間} \quad t^* = \frac{t}{d \sqrt{\frac{m_{S_i}}{eV}}} \quad (\text{A.22})$$

$$\text{速度} \quad v^* = \frac{v}{\sqrt{\frac{eV}{m_{S_i}}}} \quad (\text{A.23})$$

$$\text{力} \quad F^* = \frac{F}{\frac{eV}{d}} \quad (\text{A.24})$$

$$\text{加速度} \quad a^* = \frac{a}{\frac{eV}{m_{S_i} d}} \quad (\text{A.25})$$

$$\text{温度} \quad T^* = \frac{T}{\frac{eV}{k_B}} \quad (\text{A.26})$$

$$\text{圧力 (応力)} \quad \sigma^* = \frac{\sigma}{\frac{eV}{d^3}} \quad (\text{A.27})$$

$$\text{ポテンシャル} \quad \Phi^* = \frac{\Phi}{eV} \quad (\text{A.28})$$

Table A.1 Non dimensional parameter of the silicon.

m_{S_i}	シリコン原子の質量	$4.6643445 \times 10^{-26}$ (kg)
k_B	ボルツマン定数	1.38062×10^{-23} (J/K ⁻¹)
eV	1 electron Volt	1.60219×10^{-19} (J)
d	原子径の無次元パラメータ	1.00×10^{-10} (m)

参考文献

- [1] 三宅威生. 転位動力学シミュレータの開発と半導体構造に関する研究. 東京大学修士論文, 2004.
- [2] *THE INTERNATIONAL TECHNOLOGY ROADMAP FOR SEMICONDUCTORS 2005 EDITION EXECUTIVE SUMMARY* p.63 Fig. 8, p.68 Fig. 10 (<http://www.itrs.net/Common/2005ITRS/Home2005.htm>). 2005.
- [3] E. Adler, J. K. DeBrosse, and S. F. Geissler et al. The evolution of ibm cmos dram technology (<http://www.research.ibm.com/journal/rd/391/adler.html>). *International Business Machines Corporation*, Vol. 39, p. 12, 1995.
- [4] J. P. Hirth and J. Lothe. *THEORY OF DISLOCATIONS Second Edition*. Willey, New York, 1982.
- [5] H. M. Zbib, M. Rhee, and J. P. Hirth. On plastic deformation and the dynamics of 3d dislocations. *Int. J. Sci.*, Vol. 40, No. 2-3, pp. 113–127, 1998.
- [6] K. W. Schwarz. Simulation of dislocation on the mesoscopic scale. i. methods and examples. *J. Appl. Phys.*, Vol. 85, No. 1, pp. 108–119, 1999.
- [7] S. D. Gavazza and D. M. Barnett. The self-force on a planar dislocation loop in an anisotropic linear-elastic medium. *J. Mech. Phys. Solid*, Vol. 24, pp. 171–185, 1976.
- [8] D. ハル. 転位論入門. 共立全書, 1978.
- [9] H. M. Zbib, T. D. Rubia, M. Rhee, and J. P. Hirth. 3d dislocation dynamics: stress-strain behavior and hardening mechanisms in fcc and bcc metals. *J. Nucl. Mater.*, Vol. 276, pp. 154–165, 2000.
- [10] N. Tsuchiya, O. Fujii, K. Umezawa, M. Iwase, and Y. Ushiku. The origin of extended dislocations induced by high-dose ion implantation. *IEEE TRANSACTIONS ON SEMICONDUCTOR MANUFACTURING*, Vol. 18, No. 1, pp. 19–25, 2005.

- [11] 角野浩二, 未澤正志, 津屋英樹, 千川圭吾ら. 半導体の結晶欠陥制御の科学と技術 シリコン編. サイエンスフォーラム, 1993.
- [12] I. Yonenaga and K. Sumino. Mechanical behavior of czochralski-silicon crystals as affected by precipitation and dissolution of oxygen atoms. *Jap. J. Appl. Phys.*, Vol. 21, No. 1, pp. 47–55, 1982.
- [13] M. F. Ashby and L. Johnson. On the generation of dislocations at misfitting particles in ductile matrix. *Phil. Mag.*, Vol. 20, pp. 1009–1022, 1969.
- [14] 徳山巍. 半導体ドライエッチング技術. 産業図書, 1992.
- [15] 志村忠夫. 半導体シリコン結晶工学. 丸善, 1993.
- [16] S. Izumi, T. Miyake, S. Sakai, and H. Ohta. Application of three-dimensional dislocation dynamics simulation to the sti semiconductor structure. *Mat. Sci. Eng. A*, Vol. 395, pp. 62–69, 2005.
- [17] 泉聡志, 三宅威生, 酒井信介, 太田裕之. 転位動力学シミュレーションの sti 半導体構造への応用. *J. Soci. Mater. Sci. Jap*, Vol. 53, No. 12, pp. 1378–1383, 2003.
- [18] 阿部孝夫. シリコン 結晶成長とウェーハ加工. 培風館, 1993.
- [19] S. Kawado. Structural change of oxidation-induced frank sessile dislocation loops in silicon. *J. J. Appl. Phys.*, Vol. 19, No. 5, pp. 815–824, 1980.
- [20] G. Z. Pan, K. N. Tu, and A. Prussin. Size-distribution and annealing behavior of end-of-range dislocation loops in silicon-implanted silicon. *J. Appl. Phys.*, Vol. 81, No. 1, pp. 78–84, 1997.
- [21] G. Z. Pan, K. N. Tu, and A. Prussin. Microstructural evolution of 1 1 3 rodlike defects and 1 1 1 dislocation loops in silicon-implanted silicon. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 71, No. 4, pp. 659–661, 1997.
- [22] 加藤雅治. 入門 転位論. 裳華房, 1999.
- [23] 鈴木秀次. 転位論入門. アグネ, 1969.
- [24] K. Sumino. *Handbook on Semiconductors Completely Revised Edition Volume 3 Chapter 2 Mechanical Behaviour of Semiconductors*. Elsevier Science B.V, 1994.
- [25] L. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, and Y. Brechet. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3d simulation. *Solid State Phen.*, Vol. 23, p. 455, 1992.

-
- [26] B. Devincre and M. Condat. Model validation of a 3d simulation of dislocation dynamics: Discretization and line tension effects. *Acta metall. mater.*, Vol. 40, No. 10, pp. 2629–2637, 1992.
- [27] H. M. Zbib, M. Rhee, J. P. Hirth, and T. D. Rubia. On dislocation reactions and hardening mechanisms in 3d dislocation dynamics. *Constitutive Modeling of Inelastic Deformation and Phase Transformation, Proceedings of the 7th Int. Sym. on Plasticity and its Current Applications*, Neat Press, pp. 519–522, 2000.
- [28] K. W. Schwarz and J. Tersoff. Interaction of threading and misfit dislocations in a strained epitaxial layer. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 69(9), No. 26, p. 1220, 1996.
- [29] N. M. Ghoniem and L.Z. Sun. Fast-sum method for the elastic field of three-dimensional dislocation ensembles. *Phys. Rev. B*, Vol. 60, No. 1, pp. 113–127, 1999.
- [30] N. M. Ghoniem, S. H. Tong, and L.Z. Sun. Parametric dislocation dynamics: A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation. *Phys. Rev. B*, Vol. 61, No. 2, pp. 913–927, 2000.
- [31] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitino, and A. G. Khachaturyan. Nanoscale phase field microelasticity theory of dislocations: Model and 3d simulations. *Acta mater.*, Vol. 49, pp. 1847–1857, 2001.
- [32] Y. U. Wang, Y. M. Jin, A. M. Cuitino, and A. G. Khachaturyan. Phase field microelasticity modeling of dislocation dynamics near free surface and in heteroepitaxial thin film. *Acta Materialia*, Vol. 51, pp. 4209–4223, 2003.
- [33] H. M. Zbib and T. D. Rubia. A multiscale model of plasticity. *Int. J. Plasticity*, Vol. 18, pp. 1133–1163, 2002.
- [34] N. M. Ghoniem, S. H. Tong, J. Huang, B. N. Singh, and M. Wen. Mechanisms of dislocation-defect interactions in irradiated metals investigated by computer simulation. *J. Nucl. Mater.*, Vol. 307-311, pp. 843–851, 2002.
- [35] M. Kammler, D. Chidambarrao, K. W. Schwarz, C. T. Black, and F. M. Ross. Controlled nucleation of dislocations by a spatially localized stress field. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 87, p. 133116, 2005.

-
- [36] M. E. Bachlechner, A. Omeltchenko, A. Nakano, R. K. Kalia, and P. Vashishata. Dislocation emission at the silicon/silicon nitride interface: A million atom molecular dynamics simulation on parallel computers. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 84, No. 2, pp. 322–325, 2000.
- [37] 原祥太郎. 構造緩和アモルファスシリコンの原子モデリング及び表面?界面特性評価:分子動力学アプローチ. 東京大学博士論文, 2005.
- [38] Dierk Raabe. コンピュータ材料科学. 森北出版, 2004.
- [39] D. Maroudas and R. A. Brown. Constitutive modeling of the effects of oxygen on the deformation behavior of silicon. *J. Mater. Res.*, Vol. 6, pp. 2337–2352, 1991.
- [40] M. O. Peach and J. S. Koehler. The forces exerted on dislocations and the stress fields produced by them. *Phys. Rev. B*, Vol. 80, pp. 436–439, 1950.
- [41] T. A. Kharaiishi, J. P. Hirth, H. M. Zbib, and M. A. Khaleel. The displacement and strain-stress fields of a general circular volterra dislocation loop. *Int. J. Eng. Sci.*, Vol. 38, pp. 251–266, 2000.
- [42] T. A. Kharaiishi, J. P. Hirth, H. M. Zbib, and T. D. Rubia. The stress field of a general circular volterra dislocation loop: analytical and numerical approach. *Phil. Mag. Lett.*, Vol. 80, No. 2, pp. 95–105, 2000.
- [43] L. M. Brown. *Phil. Mag.*, Vol. 15, p. 363, 1967.
- [44] H. M. Zbib H. Yashin and M. Khaleel. Size and boundary effects in discrete dislocation dynamics: coupling with continuum finite element. *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 309/310, pp. 294–299, 2001.
- [45] R. Martinez and N. M. Ghoniem. The influence of crystal surface on dislocation interactions in mesoscopic plasticity: A combined dislocation dynamics-finite element approach. *J. Comp. Meth. Engng Sci. CMES*, Vol. 3, p. 229, 2002.
- [46] T. J. Gosling and J. R. Willis. A line-integral representation for the stress due to an arbitrary dislocation in an isotropic half-space. *J. Mech. Phys. Solid*, Vol. 42, No. 8, pp. 1199–1221, 1994.
- [47] M. C. Fivel, T. J. Gosling, and G. R. Canova. Implementing image stress in a 3d dislocation simulation. *Model. Simul. Mater. Sci. Eng*, Vol. 4, pp. 581–596, 1996.

-
- [48] X.HAN and N. M. GHONIEM. Stress field and interaction forces of dislocations in anisotropic multilayer thin films. *Phil. Mag.*, Vol. 85, No. 11, pp. 1205–1225, 2005.
- [49] D. Maroudas and R. A. Brown. Analysis of the effects of oxygen migration on dislocation motion in silicon. *J. Appl. Phys.*, Vol. 69, pp. 3865–3877, 1991.
- [50] D. Maroudas and R. A. Brown. Model for dislocation locking by oxygen gettering in silicon crystals. *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 58, pp. 1842–1844, 1991.
- [51] J. A. Zimmerman, C. L. Kechner, J. C. Hamilton, and S. M. Foulès. Surface step effects on nanoindentation. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 87, No. 16, p. 165507, 2001.
- [52] 高橋昭如. 材料強度のマルチシミュレーション. 東京大学博士論文, 2003.
- [53] F. H. Stillinger and T. A. Weber. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, Vol. 31, pp. 5262–5271, 1985.
- [54] J. Tersoff. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Phys. Rev. B*, Vol. 38, pp. 9902–9905, 1988.
- [55] M. Z. Bazant, E. Kaxiras, and J. F. Justo. Environment-dependent interatomic potential for bulk silicon. *Phys. Rev. B*, Vol. 56, pp. 8542–8552, 1997.
- [56] H. Balamane, T. Halicioglu, and W. A. Tiller. Comparative study of silicon empirical interatomic potentials. *Phys. Rev. B*, Vol. 46, pp. 2250–2279, 1992.
- [57] J. Godet, L. Pizzagalli, S. Brochard, and P. Beauchamp. Theoretical study of dislocation nucleation from simple surface defects in semiconductors. *Phys. Rev. B*, Vol. 70, p. 054109, 2004.
- [58] J. Godet, L. Pizzagalli, S. Brochard, and P. Beauchamp. Computer study of microtwins forming from surface step of silicon. *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 30, pp. 16–20, 2004.
- [59] J. Godet, L. Pizzagalli, S. Brochard, and P. Beauchamp. Comparison between classical potentials and ab initio methods for silicon under large strain. *J. Phys. Condens. Mater.*, Vol. 15, pp. 6943–6953, 2003.
- [60] K. W. Schwarz, X. H. Lu, and D. Chidambarro. Dislocation moderating for the silicon world. *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 309-310, pp. 229–232, 2001.

-
- [61] J. Vanhellemont and S. Amelinckx. Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. application of theoretical generation model for local oxidation processes on (001) silicon substrates. *J. Appl. Phys.*, Vol. 61, pp. 2176–2188, 1987.
- [62] J. Vanhellemont and C. Claeys. Film-edge-induced dislocation generation in silicon substrates. high voltage transmission electron microscopy observations and theoretical results for $(\bar{1}, 1, 1)$ and $(0, 1, 1)$ silicon substrates. *J. Appl. Phys.*, Vol. 63, pp. 5703–5711, 1988.
- [63] S. Isomae, Y. Tamaki, A. Yajima, M. Nanba, and M. Maki. Dislocation generation at Si_3N_4 film edges on silicon substrates and viscoelastic behavior of SiO_2 films. *J. Elec. Soc.*, Vol. 126, pp. 1014–1019, 1979.
- [64] S. Isomae. Stress distributions in silicon crystal substrates with thin films. *J. Appl. Phys.*, Vol. 52, pp. 2782–2791, 1980.
- [65] S. 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.*, Vol. 57, pp. 216–223, 1984.
- [66] A. Kubota and W. G. Wolfer. Transition pathways in the unfauling of dislocation loop. *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 400-401, pp. 362–365, 2005.
- [67] Y. Yang, H. Abe, and N. Sekimura. Behavior of Frank-loops under stress environment. *Phys. Lett. A*, Vol. 315, pp. 293–300, 2003.
- [68] M. Kohyama. Atomic structure and energy of the 1,1,3 planar interstitial defects in Si. *Phys. Rev. B*, Vol. 46, No. 19, pp. 12305–12316, 1992.
- [69] D. Rodney and G. Martin. Dislocation pinning by small interstitial loops: A molecular dynamics study. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 82, No. 16, pp. 3272–3275, 1992.
- [70] B. D. Wirth, M. J. Caturla, T. D. Rubia, T. Khraishi, and H. Zbib. Mechanical property degradation in irradiated materials: A multiscale modeling approach. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Research B*, Vol. 180, pp. 23–31, 2001.
- [71] T. D. Rubia, H. Zbib, T. Khraishi, B. D. Wirth, M. Victoria, and M. J. Caturla. Multiscale modeling of plastic flow localization in irradiated materials. *NATURE*, Vol. 406, pp. 871–874, 2000.
- [72] V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincre, and S. Yip. Connecting atomistic and mesoscale simulations of crystal plasticity. *NATURE*, Vol. 391, pp. 669–672, 2000.

-
- [73] N. M. Ghoniem, B. N. Singh, and L. Z. Sun and T. D. Rubia. Interaction and accumulation of glissile defect clusters near dislocations. *J. Nucl. Mater.*, Vol. 276, pp. 166–177, 2000.
- [74] L. Z. Sun, N. M. Ghoniem, and Z. Q. Wang. Analytical and numerical determination of the elastic interaction energy between glissile dislocations and stacking fault tetrahedra in fcc metals. *Mater. Sci. Eng. A*, Vol. 309-310, pp. 178–183, 2001.
- [75] N. M. Ghoniem, S. H. Tong, B. N. Singh, and L. Z. Sun. On dislocation interaction with radiation-induced defect clusters and plastic flow localization in fcc metals. *Philos. Mag. A*, Vol. 81, No. 11, pp. 2743–2764, 2001.
- [76] H. Shimizu. Dislocations preferentially generated in compressed regions of saddle-shaped deformed, precipitation-softened, czochralski-grown silicon wafer. *Jap. J. Appl. Phys.*, Vol. 39, No. 10, pp. 5727–5731, 2000.
- [77] T. Fukuda and K. Hikazutani. The analysis of slip extension and induced stress in 300mm diameter wafer on three-point symmetrical support. *Jap. J. Appl. Phys.*, Vol. 39, No. 3A, pp. 999–1005, 2000.
- [78] 強度設計データブック編集委員会 (編). 強度設計データブック. 裳華房, 1987.
- [79] P. M. Morse. Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. vibrational levels. *Phys. Rev.*, Vol. 34, pp. 57–64, 1929.
- [80] P. N Keating. Effect of invariance requirements on the elastic strain energy of crystals with application to the diamond structure. *Phys. Rev.*, Vol. 145, pp. 637–645, 1966.
- [81] M. S. Daw and M. I. Baskes. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*, Vol. 29, pp. 6443–6453, 1984.
- [82] 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. PhD thesis, 東京大学, 1999.
- [83] F. F. Abraham, R. Walkup, H. Gao, M. Duchaineau, T. D. de La Rubia, and M. Seager. Simulating materials failure by using up to one billion atoms and the world's fastest computer: work-hardening. *PNAS 99*, Vol. 9, pp. 5783–5787, 2002.
- [84] S. Nose. A unified formation of the constant temperature molecular dynamics methods. *J. Chem. Phys.*, Vol. 81, pp. 511–519, 1984.

- [85] L. Verlet. Computer experiments on classical fluids. I. thermodynamical properties of lennard-jones molecules. *Phys. Rev.*, Vol. 159, pp. 98–103, 1967.

謝辞

大学生生活の後半3年間を過ごした酒井・泉研究室の皆様には大変お世話になりました。この場をお借りしてお礼申し上げます。

酒井信介教授には3年間研究内容について直接指導をしていただいた記憶はなく従って直接会話する機会もほとんどありませんでしたが、あたたかい目で3年間見守っていただきありがとうございます。指導教官の泉聡志助教授には研究方針・内容から研究姿勢についてまで多々ご教授いただきました。基本的にひとのことをあまり聞かない原祥太郎助手には最後の3ヶ月間ほどの間準指導教官としてMD計算について多々アドバイスを頂きました。併せて本論文の付章のMD手法説明は大部分原先生の博士論文から引用させていただきました。ありがとうございます。

酒井・泉研究室の皆様には公私ともにお世話になりました。この場をお借りしてお礼を申し上げます。ありがとうございました。

東芝の川上氏・牛久氏・土屋氏・田村氏・釘宮氏には共同研究という形で、数多くのディスカッションの場を持って頂きありがとうございます。特に土屋氏・釘宮氏両氏にはお忙しい中数多くのメールでの討論に付き合ってくださいありがとうございます。イオンインプランテーション起因の転位発生の議論は土屋氏の協力なくして終えることはできません。この場を借りてお礼を申し上げます。ありがとうございました。併せて題材提供ありがとうございました。

日立製作所の太田氏・石塚氏・西森氏には三宅氏から引き継いだSiN薄膜起因転位の議論でお世話になりました。併せて貴重な題材提供ありがとうございます。この場を借りてお礼を申し上げます。ありがとうございます。

最後になりましたが、今研究前任者の三宅氏にはお忙しい中プログラムの引継ぎ等でメールを通じての大変お世話になりました。またSiN薄膜起因転位の実験概説の章の大部分は三宅氏の修論から引用させていただきました。この場を借りてお礼を申し上げます。ありがとうございます。

以上

p.1 ~ 146 完

修士論文

平成 18年 2月 10日 提出

46165 小林 尚司