

修士論文

シリコン中における  
転位の交差すべり挙動解析

p.1 ~ 60 完

平成 20 年 2 月 8 日 提出  
指導教員 酒井 信介 教授

66211 杉本 有正

# 目次

<b>第1章 序論</b>	6
1.1 研究の背景	6
1.2 単結晶シリコン中における転位	8
1.3 交差すべりモデル	10
1.4 研究の目的	11
<b>第2章 解析手法と検証</b>	12
2.1 緒言	12
2.2 転位動力学法	13
2.2.1 転位に作用する力	14
2.2.2 転位の位置更新	17
2.2.3 交差すべり解析	18
2.3 転位動力学シミュレータの拡張	20
2.3.1 部分転位の作成	20
2.3.2 部分転位に作用する力	21
<b>第3章 解析結果</b>	23
3.1 一様応力場における拡張転位挙動	23
3.1.1 緒言	23
3.1.2 解析条件	24
3.1.3 解析結果	25
3.1.5 考察	26
3.2 STI 構造への適用	27
3.2.1 緒言	27
3.2.2 解析手法	29
3.2.2.1 解析手順	29
3.2.2.2 解析対象	30
3.2.3 応力解析	31
3.2.3.1 応力解析モデル	31
3.2.3.2 応力解析結果	35
3.2.4 転位動力学解析	38
3.2.4.1 転位の成長判定	38
3.2.4.2 拡張転位の解析	41

3.2.4.3	交差すべり解析	48
3.2.5	考察	54
第4章	結論	55
	参考文献	56
	謝辞	59

# 目次

Fig.1.1 (a) TEM micrograph of silicon dislocation in DRAM structure[2]. (b) DRAM cell diagram [4] and schematic of generated dislocation.....	6
Fig.1.2 (a) Diamond cubic structure of Si lattice. (b)Glide and Shuffle set[20].....	9
Fig.1.3 Weak beam micrograph of a dissociated and hexagonal loop in silicon. [20].....	9
Fig.1.4 Freidel-Escaig cross-slip model. [15].....	10
Fig.2.1 Geometry for computing the stress field about a straight segment of dislocation.....	14
Fig.2.2 The geometry of finite core treatment. The contributions from the two displaced arcs shown as solid lines evaluated using Eq.2.5 .....	15
Fig.2.3 The method of computing the image force. Some of the symbols used Eq.2.6 are shown.....	16
Fig.2.4 The method of generating cross-slip. ....	18
Fig.2.5 The treatment of point between different slip plane.....	19
Fig.2.6 The method of making partial dislocations. ....	20
Fig.2.7 Schematic of extended dislocation .....	22
Fig.2.8 The extended width of straight screw dislocation. ....	22
Fig.3.1 (a) Geometry of the specimen with two tensile axis. [25](b) The effect of the surface on the dissociation width. [25] .....	23
Fig.3.2 Analysis model of tensile test.....	24
Fig.3.3 Initial geometry of dislocation.....	24
Fig.3.4 simulation result of tensile test. slip system partial dislocationred;[-2-11], partial dislocation blue;[-112].....	25
Fig.3.5 simulation result of tensile test. slip system.partial dislocation red ; [-112],partial dislocation blue;[-2-11].....	25
Fig.3.6 Example of STI structure [37].....	28
Fig.3.7 Flowchart of the analysis.....	29
Fig.3.8 Schematics of STI structure plane view and 3-D view of the unit cell ....	30
Fig.3.9 FEM model (model 1) .....	32
Fig.3.10 FEM model (model 2) .....	32
Fig.3.11 Fabrication process of STI structure.....	34
Fig.3.12 Step of FEM analysis.....	34

Fig.3.13 Stress distribution in STI structure.....	36
Fig.3.14 Resolved shear stress in STI structure.....	37
Fig.3.15 Initial dislocation position .....	39
Fig.3.16 Initial dislocation loop and resolved shear stress .....	40
Fig.3.17 Resolved shear stress of partial dislocation of (111)[10-1] slip system ....	41
Fig.3.18 Simulation result of dislocations whose slip system is (111)[10-1],and generation position is A and C . (a) model 1 , (b) model 2.....	42
Fig.3.19 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[10-1] slip system...	43
Fig.3.20 Simulation result of dislocations whose slip system is (1-11)[10-1],..... and generation position is A . (a) model 1 , (b) model 2.....	44
Fig.3.21 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[110] slip system ....	45
Fig.3.22 Simulation result of dislocations whose slip system is (1-11)[110], ..... and generation position is A .....	45
Fig.3.23 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[110] slip system ....	46
Fig.3.24 Simulation result of dislocations whose slip system is (1-11)[0-1-1],and generation position is B . .....	47
Fig.3.25 Simulation result of cross-slip which occurred at point D .....	49
Fig.3.26 Simulation result of cross-slip which occurred at point E.....	50
Fig.3.27 Simulation result of cross-slip which occurred at point F.....	51
Fig.3.28 Simulation result of cross-slip which occurred at point J.....	52
Fig.3.29 Sketch of experiment result .....	53

## 表目次

Table 1 Material property used in FEM analysis . . . . .	33
Table 2 Whether initial dislocation grew or not in each case of different slip system .	39

# 第 1 章 序論

## 1.1 研究の背景

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・小型・軽量・低消費電力化に対する社会的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．このような素子構造の高密度化に伴い素子内部の応力は増大する傾向にある．素子内半導体製造に用いられるシリコンウエハは初期状態では完全無欠陥の状態では供給されるが，基盤特性改良のためのイオンインプラネーションや，熱応力や真性応力によるデバイス内の応力増大等の要因によって素子内に転位が導入されることがある．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[1]．Fig.1.1(a)に DRAM 内部に発生した転位の TEM 画像[2,3]，(b)に DRAM 構造[4]と内部に発生した転位の模式図を示す．このように半導体素子内部において本来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，デバイスの電気特性の劣化，歩留まり低下の要因となる．そのため，半導体製造過程においてはシリコン基盤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．

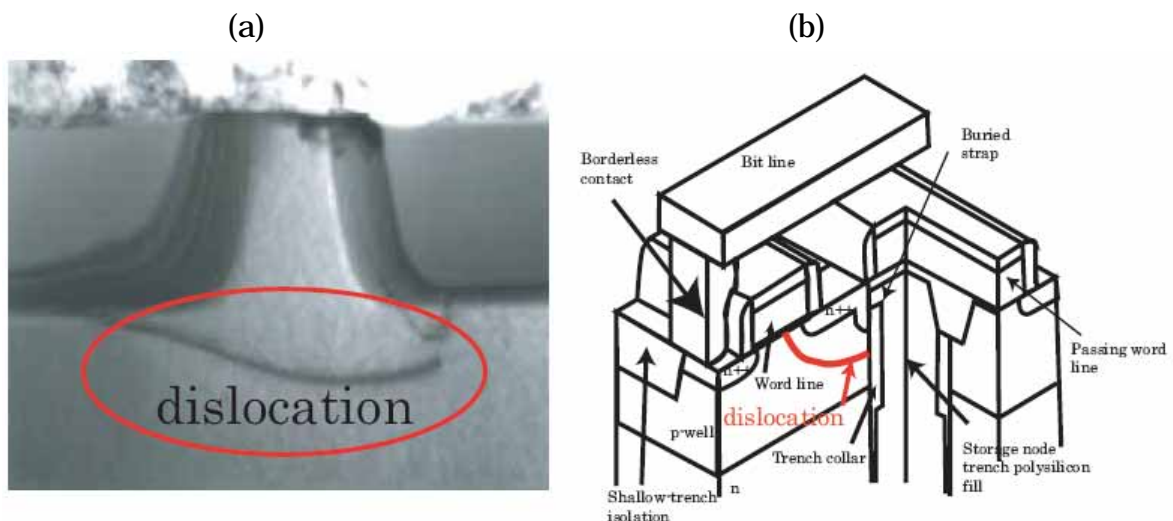


Fig.1.1 (a) TEM micrograph of silicon dislocation in DRAM structure[2]. (b) DRAM cell diagram [4] and schematic of generated dislocation.

金属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ており，エッチピット法 [5] や透過型電子顕微鏡 (Transmission Electron Microscope : TEM) [6,7,8] 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．これらの実験的知見と弾性論に基づいた転位論 [8-13] 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の理論的説明を可能とした．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簡単な転位形状，反応に限られる [9]．そのため，転位論にもとづき，転位の運動を数値計算により取り扱う転位動力学シミュレーションの研究が行われてきた [14]．これにより，より複雑な転位現象を取り扱うことが可能となった．

転位挙動の一つに交差すべりがある．一般に転位線ベクトルとバーガスベクトルが与えられると，その両ベクトルと平行な平面が滑り面として特定される．しかし，バーガスベクトルと転位線が平行ならせん転位の場合，バーガスベクトルと転位を与えられてもすべり面が特定することができない．そのため，転位は適宜すべり面を変えて運動することができる．この一連の過程を交差すべりと呼ぶ [11]．交差すべりは金属の塑性変形に関して，硬化や回復プロセスにおける重要なメカニズムである [15,16]．また，二重の交差すべりと Frank-Read 源の組み合わせによって転位の増殖機構も容易に起こる [11]．らせん転位であっても転位が拡張している場合には積層欠陥を含む面が滑り面に特定される．そのため，積層欠陥エネルギーの小さな材料では交差すべりは困難であり，一般に fcc 金属よりも bcc 金属の方が，交差すべりが起こりやすい．この交差すべり発生については様々なモデルが考えられている．M.Rhee [16] らは bcc 金属中における交差すべりをローカルルールとして取り入れ，確率論的アプローチを行い，fcc 金属中における交差すべりのモデルについても Freidel, Escaig, Duesbery らによって研究されている [15,17] また，単結晶シリコン中で作成された試験片や半導体素子においても交差すべりが実験で確認されている [18,19]．よって，半導体構造内における転位動力学解析を行う際には，交差すべりが発生する可能性の考察，また，交差すべり発生時の挙動についても考える必要があると考えられる．

## 1.2 単結晶シリコン中における転位

単結晶シリコン中における転位について述べる．単結晶シリコンは Fig.1.2(a) に示すようなダイヤモンド構造をしている．そのため，転位のすべり面として Fig.1.2(b)に示すように，広い面間でずれる Shuffle-set 転位と狭い面間でずれる Glide-set 転位の二種類のすべり面における転位が考えられ，研究されてきた[20]．安定した積層欠陥は Glide-set においてのみ存在可能であり，実験により転位の拡張が確認されていたため単結晶シリコンでは Glide-set 転位が起きていると考えられていた．しかし，近年になって低温から室温程度の温度条件のもと数から十数 GPa の高応力下で拡張していない完全転位が観察され[20,21]，この転位は Shuffle-set 転位であると考えられている．このシリコン中の転位種の温度による変化はシリコンの延性-脆性の性質変化(ductile-to-brittle transition : DBT)に重要な役割を果たしていると考えられている．この DBT はシリコンではおよそ 400 K で起こり，本研究で取り扱う転位は 800 ~ 1000 K における現象であるので今回は glide-set 転位を想定する．

また，シリコン中の glide-set 転位の中でも比較的低温の条件では転位の自己エネルギーよりも Peierls エネルギー(転位が Peierls-valley を離れ，運動するのに必要なエネルギー)の方が大きいため，転位は Peierls-valley に拘束され，Fig.2.3 に示すようならせん転位と 60° 転位からなる六角形形状を取ることとなる[22]．この転位形状はシリコンにおいては主に温度が  $0.6T_m$  よりも低い場合に見られる．ここで  $T_m$  はシリコンの融点であるのでおよそ 1410 K ，つまり 850 K 付近で転位のとり形状が変わってくると考えられる．本研究では Peierls-valley に拘束されない転位を想定して解析を行う．



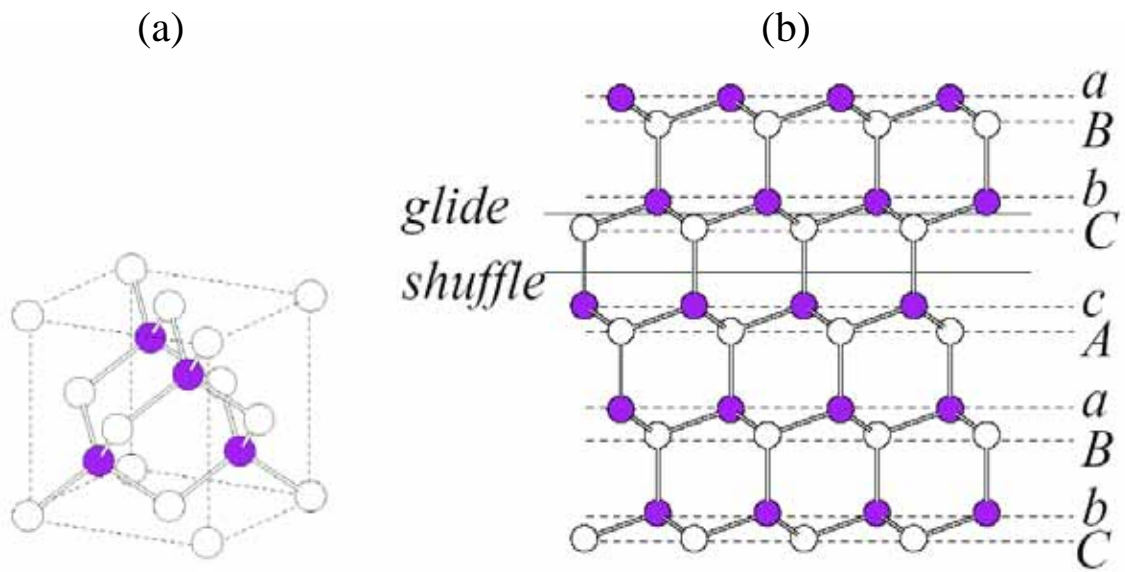


Fig.1.2 (a) Diamond cubic structure of Si lattice. (b) Glide and Shuffle set[20]

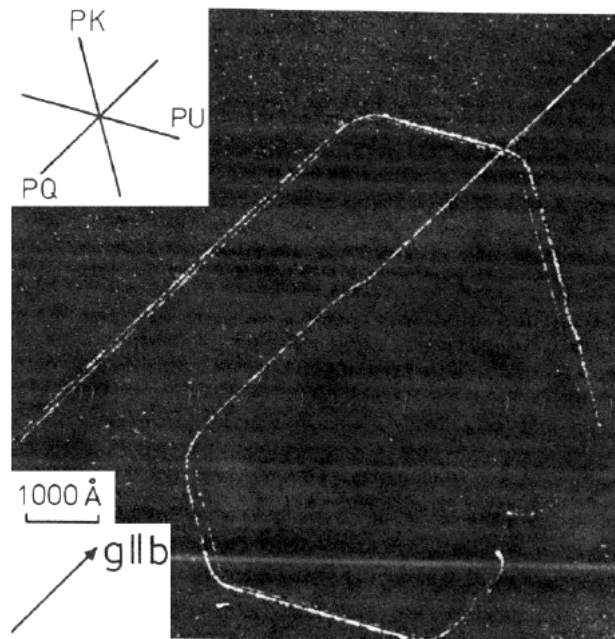


Fig.1.3 Weak beam micrograph of a dissociated and hexagonal loop in silicon. [20]

### 1.3 交差すべりモデル

本研究では、転位が拡張している場合の交差すべり発生を考える．よって fcc 金属における交差すべりモデルの Freidel-Escaig モデル[15]によってシリコン中の交差すべりを考える．このモデルを Fig.1.4 に示す．このモデルにおいて拡張転位は初期すべり面上で一度完全に収縮し，その後，交差すべり面上で再び拡張している．Moller ら[39]は交差すべり発生にはこの収縮と拡張が必要であるとされている．その上で彼らは表面において交差すべりが発生しやすくなると論じている．これは表面の転位端における転位の収縮と転位端では交差すべり面において拡張に必要なエネルギーの減少するためである．

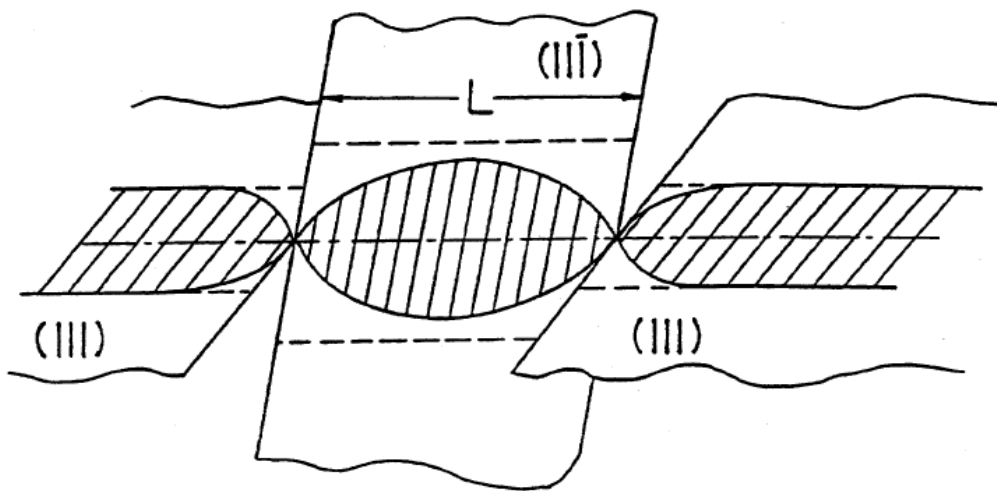


Fig.1.4 Freidel-Escaig cross-slip model. [15]

## 1.4 研究の目的

現在，転位動力学における交差すべりの解析において，その発生条件について明確な指針がない．転位線方向から判別し，確率論的に取り扱う解析[16]や実験結果から発生位置を指定する解析などが行われている[23]．しかし，転位線方向からの判別の場合，転位動力学における転位の離散化精度には限界があり[24]，特に界面等の応力変化が大きく転位の形状が複雑になると考えられる位置においては正確な形状の再現が難しい．また，転位がらせん方向を向いている場合においても，転位が広く拡張していれば交差すべりは起こりにくいと考えられる．

本研究では交差すべりが発生する条件を明らかにすることを目的とする．そこで本研究では，交差すべりが発生する際に必要な拡張転位の収縮に注目し，部分転位を転位動学的に取り扱うことで拡張転位が収縮する条件を調べる．

## 第 2 章 解析手法と検証

### 2.1 緒言

本研究ではシリコン構造中における拡張転位の状態を調べるため部分転位を転位動力学的に取り扱い解析する。まず、部分転位の解析を可能とするために転位力学シミュレータの機能を拡張する。開発したシミュレータを George ら [25] の論文中の実験、共同研究先である東芝での STI 構造についての実験に対し適用し、解析・検討を行う。検討を行う際には条件で交差すべりを起こした場合の解析結果を実験結果と比較することでその妥当性を検討することとする。

転位力学解析においては、転位ループを複数の素片に離散化し、各素片に働く力を求め、それを元に位置更新を行うことで転位挙動を解析する。本章では使用した転位力学シミュレータの計算アルゴリズムを簡略に説明する。

2.2 では転位力学シミュレータの主な計算アルゴリズムを説明する。この部分は小林氏が開発したものである [14]。よって、2.2 の大部分は小林氏の修士論文を引用させていただいた。なお、この計算アルゴリズムの大部分は H.M.Zbib や K.W.Schwarz らの手法によっている [24,26,27]。

2.3 では、本研究で開発した拡張転位の解析手法について述べる。この拡張転位解析は 2 本の転位が数 nm の近距離にあるため、解析における時間ステップが大きくなると転位線が交差するといった問題が起こる。そこで、解析コストを下げるため転位が停止した位置、もしくは任意の解析ステップから拡張転位の解析を行うものとする。

## 2.2 転位動力学法

### 2.2.1 転位に作用する力

本解析の単結晶シリコン中の転位挙動を解析する際、転位に作用する力のうち、影響の大きいものとして外力、素片間の相互作用力、鏡像力、を解析に取り入れる。

#### 外力の評価

本解析において外力は有限要素法を用いて得られた結果を入力するため、応力値の分布として与えられる。この応力値から離散化された  $d\vec{l}$  のベクトルを持つ転位素片に対し作用する力  $\vec{f}$  は式(2.1)に示すピーチケラーの式を用いて求められる[28]。

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

ここで  $\vec{n}$  はすべり面に垂直な単位ベクトル、 $\vec{b}$  は転位のバーガスベクトルである。

#### 素片間の相互作用力の評価

本解析では転位を素片分割しているので自己張力も隣接する素片以外はこの相互作用力と同様に考える。数値計算の安定性を考慮し、相互作用力を求める際、転位同士の距離に応じて便宜的に以下の三段階に分けて取り扱う。

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

以下に各手法について簡単に記述する。

まず、遠距離素片との相互作用について述べる。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[9]。本解析では式(2.2)、(2.3)に示す Schwarz らが数値計算に適した形に展開したものをを用いる[24]。

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

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = & -(1-\nu) \left[ (\vec{b} \times \vec{F})_i s_j + (\vec{b} \times \vec{F})_j s_i \right] + (\vec{b} \times \vec{s})_\gamma (\delta_{i\gamma} F_j + \delta_{j\gamma} F_i) \\ & + G \left[ \delta_{ij} s^2 + s_{0i} s_{0j} \left( \frac{s^2}{R^2} + \frac{2s^2}{s_0^2} \right) - (s_i s_{0j} + s_j s_{0i}) \frac{s_0^2}{R^2} + s_i s_j \left( 1 - \frac{s_0^2}{R^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (2.3)$$

$\sigma_{ij}(\vec{r})_{r=p}$  は Fig.2.1 における，節点 P における転位素片 AB が作りだす応力場をあらわしている．各パラメータを以下に示す．

$$\sigma_0 = \mu / 4\pi(1-\nu) , \quad \vec{F} = (\vec{s}_0 s^2 - s_0^2 \vec{s}) / s^2 s_0^2 R , \quad G = (s \times b)_\gamma s_{0\gamma} / s^2 s_0^2 R$$

ここで， $\mu$ は縦弾性係数， $\nu$ はポアソン比である．各ベクトルの幾何関係は Fig.2.1 に示してある．

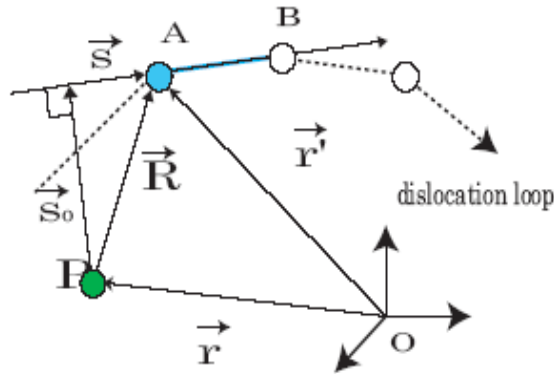


Fig.2.1 Geometry for computing the stress field about a straight segment of dislocation

次に，近距離素片の相互作用について述べる．近距離素片の場合にも遠距離素片の場合と同様の手法で相互作用を求めることはできるが，素片 AB が節点 P に近づくにつれ，ベクトル  $\vec{s}_0$  が微小になる．そのため，式(2.3)の値が発散しやすくなり，数値計算の安定性が低くなる．そこでコアスプリット法[24]を用いる．この手法では，素片を存在する位置から仮想的にだけ  $\delta$  だけ両側にずらし，そのずらされた 2 素片からの平均をとることでこの素片からの相互作用力を求める．なお，ずらされた素片から相互作用力の計算には遠距離素片からの相互作用を

求める際と同様の手法をとる．

最後に隣接素片からの相互作用力の計算について述べる．この場合，ベクトル  $\vec{R}, \vec{s}, \vec{s}_0$  が 0 となるため値が発散する．そこで Schwarz らにより定式化された Differential Stress Methods を用いる．この手法では，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[29]を用いて隣接素片の評価を行う．Fig.2.2 に示すように点 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．

$$\sigma_{\text{core}} = \frac{\sigma_{ij}(\phi_2, +\delta) + \sigma_{ij}(\phi_2, -\delta)}{2} - \frac{\sigma_{ij}(\phi_1, +\delta) + \sigma_{ij}(\phi_1, -\delta)}{2} \quad (2.4)$$

$$\frac{\sigma_{ij}}{\sigma_0} = [D1(s_{3i}s_{1j} + s_{3j}s_{1i}) + D2(s_{3i}s_{2j} + s_{3j}s_{2i})] \quad (2.5)$$

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

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

ここで各係数を以下に示す．

$$\sigma_0 = \mu/4\pi(1-\nu), \quad \vec{s}_3 = \vec{s}_1 \times \vec{s}_2, \quad b_1 = \vec{b} \cdot \vec{s}_1, \quad b_2 = \vec{b} \cdot \vec{s}_2, \quad \rho = R_c + \delta, \quad I_0 = f\phi/as, \\ I_1 = -f/s, \quad I_2 = -f\phi/s + f \ln(s + \phi), \quad I_3 = f(2a + \phi^2)/s, \quad I_4 = f\phi^3/2s - 3aI_2/2, \\ a = \delta^2/R_c(R_c + \delta), \quad s = (a + \phi^2)^{1/2}$$

$R_c$ は節点における曲率半径， $\delta$ は隣接素片のずらし幅， $\phi$ は隣接節点の曲率半径方向ベクトルとのなす角である．

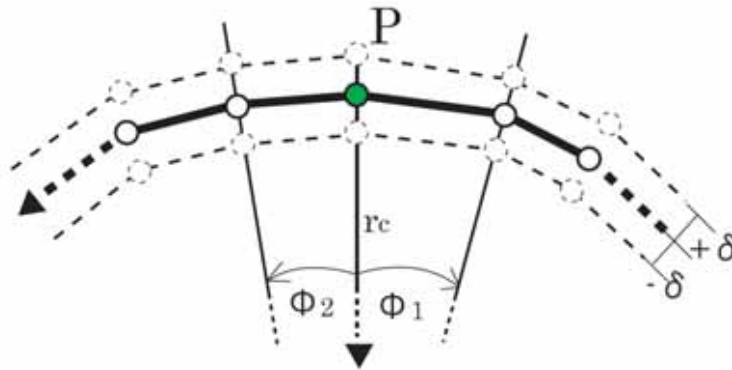


Fig.2.2 The geometry of finite core treatment. The contributions from the two displaced arcs shown as solid lines evaluated using Eq.2.5

これらの転位素片からの影響の足し合わせにより転位間の相互作用を見積もる。ただし、これらの手法により求まるのは応力場であるので式(2.1)に示したピーチケラーの式により力に変換する。

### 鏡像力の評価

本解析では Schwarz らの論文にある簡便な手法を用いて評価を行う[24]。この手法では転位線を表面のなす角により式を変える。これを式(2.6)に示す。なお、式中所ける  $\lambda, \theta, \beta, \bar{n}_1, \bar{n}_2$  の幾何関係は Fig.2.3 に示す。

$$\mathbf{f} = \begin{cases} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{\mathbf{n}_2 |2\nu \cos\beta \sin\beta|\} & \theta < 10^\circ \\ \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)\lambda} \{\mathbf{n}_1 |(1-\nu \cos^2\beta) \tan\theta| + \mathbf{n}_2 |2\nu \cos\beta \sin\beta|\} & 10^\circ \leq \theta \leq 80^\circ \\ \frac{\mu}{4\pi\lambda} \left( b_s^2 + \frac{b_e^2}{1-\nu} \right) & 80^\circ < \theta \end{cases} \quad (2.6)$$

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、らせん成分である。Schwarzら[k6]発散を防ぐため右辺第一式を加えた。式(2.6)を用いて自由表面の影響を計算する場合、自由表面から転位素片までの距離  $\lambda$  が 0 に近づくにつれ、求まる値が発散する。よって、カットオフ距離  $\lambda_c$  を設定し、 $\lambda < \lambda_c$  の場合  $f = 0$  とした。なお、転位ループの端点は常に界面上に存在するようにステップごとに補完する。

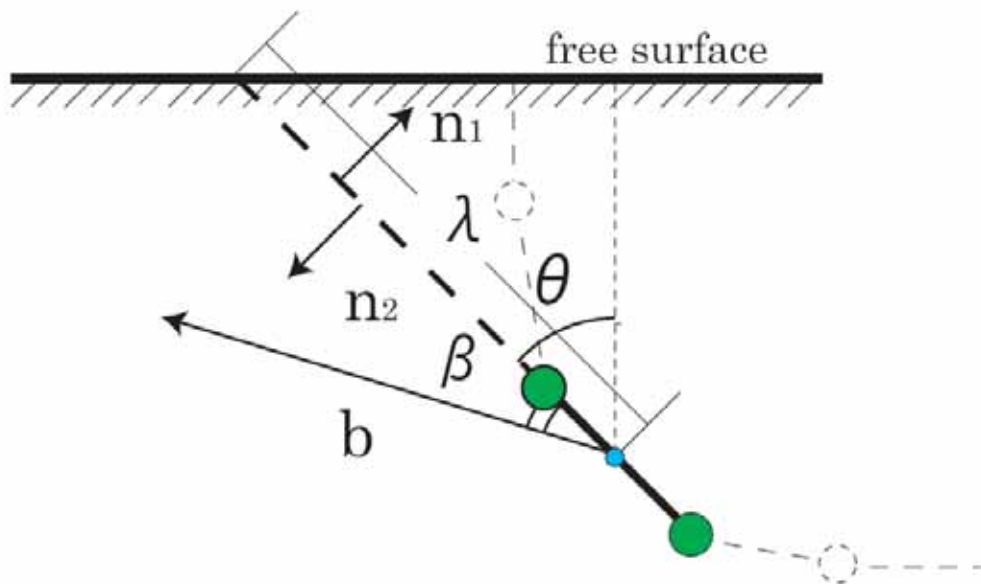


Fig.2.3 The method of computing the image force. Some of the symbols used Eq.2.6 are shown



### 2.2.2 転位の位置更新

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。また、単結晶シリコン中の転位はシリコン基盤中に存在する酸素原子によって運動を妨げられ、ある応力以下では固着する[30,31]。そこで、転位の移動速度に酸素濃度に応じた停止応力の項を組み込んだ実験式(2.7)を使用する[33]。

$$v = \begin{cases} B \left( \frac{\tau}{\tau_0} \right)^m \exp\left( -\frac{Q}{k_B T} \right) & \tau > \tau_{cr} \\ 0 & \tau < \tau_{cr} \end{cases} \quad (2.7)$$

ここで

$$\tau_{cr} = 2.2 \times 10^{-19} C_0 \exp \frac{0.215}{kT} \quad (2.8)$$

であり、 $B=7.2 \times 10^{10}$  [ $\mu\text{m/s}$ ]、 $m=1.1$ 、 $Q=2.2$  [eV]、 $\tau_0=10$  [MPa]、 $k_B$ はボルツマン定数、 $T$ は温度[K]、 $C_0$ は酸素濃度[ $\text{cm}^{-3}$ ]である。

この式を用いて、転位に作用する力を速度に変換する。この速度を用い、差分法により転位位置の更新を行う。

### 2.2.3 交差すべり解析

#### 交差すべりの発生

本解析における交差すべりの取り扱いについて述べる．本研究では，単一すべり面における転位の安定形状からの転位端における交差すべりを想定している．また，各素片は自分の属するすべり面の番号を情報として持っている．このすべり面番号の情報を新たな交差すべり平面に更新することで交差すべりを発生させる．この交差すべりを発生させる手順を Fig.2.4 に示す．今，節点 A が転位端であり，素片 AB における交差すべりの発生を想定する．交差すべりが起こるためには転位線とバーガスベクトルが平行である必要があるため，B を AB' がらせん転位となるような位置 B' に移動した．ここで， $AB=AB'$  が成り立つようにする．また，交差すべり面上の運動が円滑になるように AB' の中間接点 D を作成する．この図において，素片 AD, DB' が交差すべり面に属している．

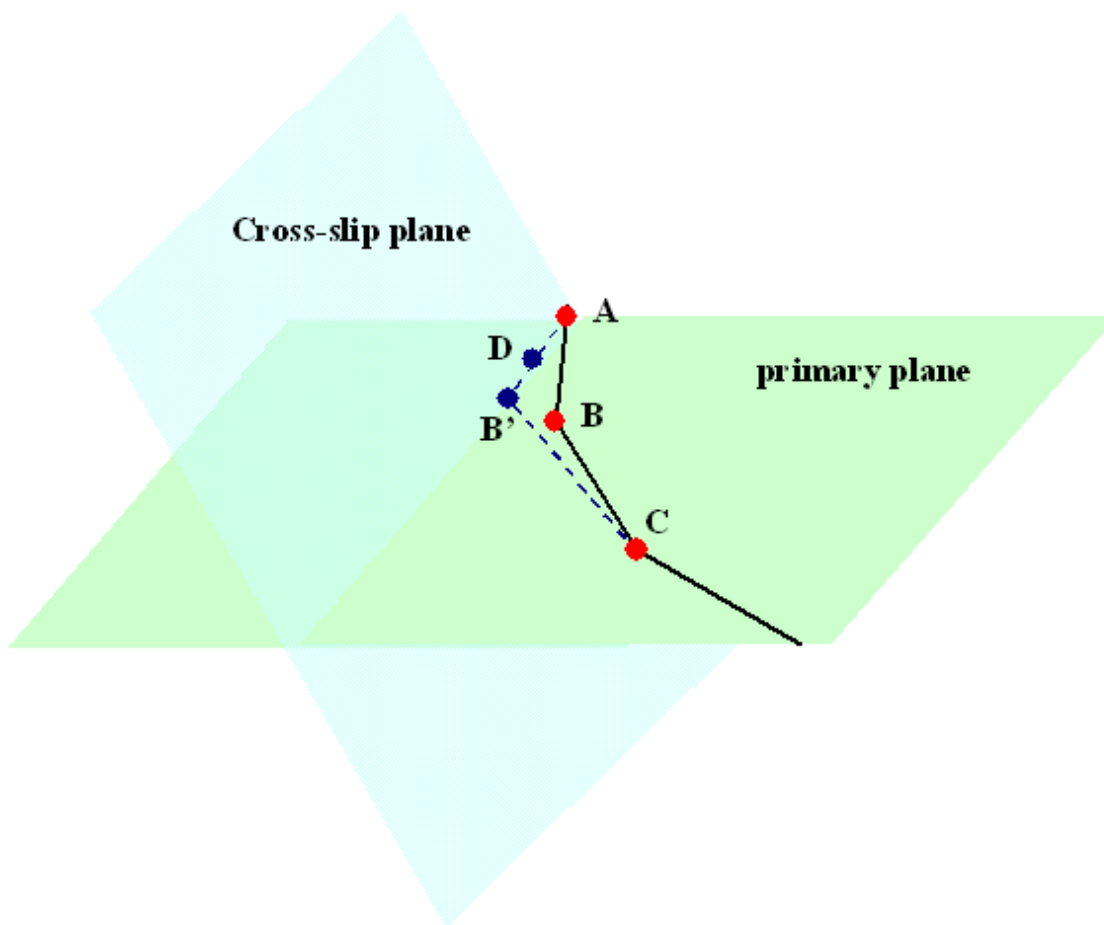


Fig.2.4 The method of generating cross-slip.

### すべり面中間節点の取り扱い

転位が交差すべりを起こした場合、転位は二つ以上のすべり面上に存在することとなるので、二平面状の転位をつなぐ節点の取り扱いについて考える必要がある。この、交差すべり面と初期すべり面の間にある節点の取り扱いについては Schwarz らの手法を取り入れる[24]。この手法について Fig.2.5 を用いて説明する。E が中間節点、A,B がその隣接節点である。E は常に交差すべり面と初期すべり面の境界線上に存在し、その位置は  $AE + EB$  の長さが最小となるように定められる。A,B の位置はそれぞれのすべり面上にて前述した位置更新手法により毎ステップ更新される。よって、E の位置もそれにあわせ更新する必要がある。

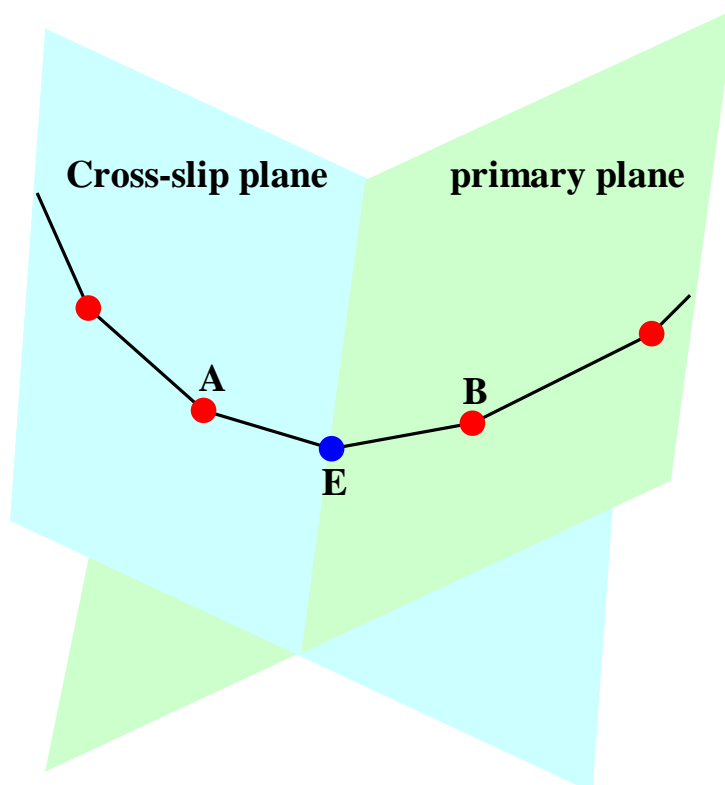


Fig.2.5 The treatment of point between different slip plane.

## 2.3 拡張転位解析手法

### 2.3.1 部分転位の作成

本解析では 2.2 で述べた手法により解析した転位を停止位置 , もしくは任意のステップで一本の転位線を二本の部分転位に分離し, 解析することで転位の収縮 , 拡張の状態をしらべる .

まず , 部分転位に分離する手法を述べる . 拡張転位解析開始時に拡張幅が均一になるように部分転位を作成する . この手法を Fig.2.6 に示す . 初期拡張幅を  $d_0$  とするとき , 各転位線に対し  $d/2$  だけ離れた平行線を想定し , 赤色の点で示しているその交点を部分転位の節点に設定する . これを転位線の両側に対し行うことで拡張転位を作成する .

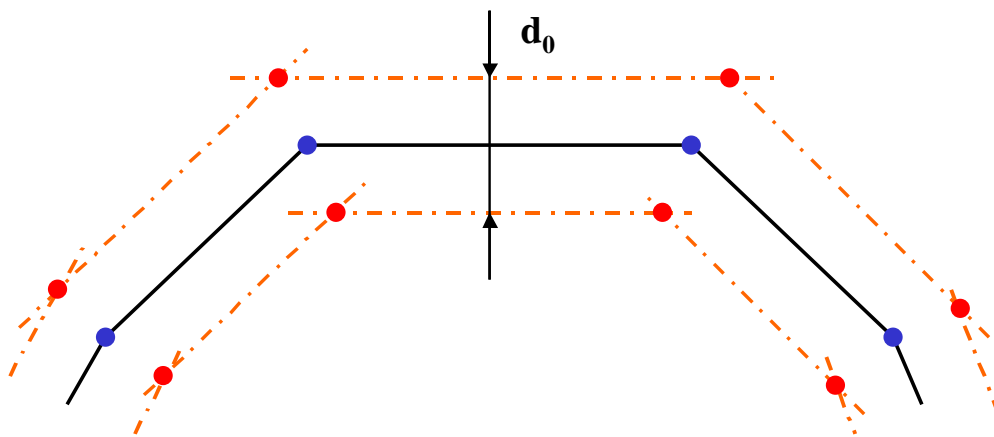


Fig.2.6 The method of making partial dislocations.

### 2.3.2 部分転位に作用する力

部分転位に働く力について，2.2.1 で述べた外部応力，相互作用力，界面力に加え，積層欠陥による影響を考える．A.Moulin[34]らはこの力を導入し，応力 $\tau$ のもと，ある初期拡張幅 $d_0$ を与えたとき，安定拡張幅 $\delta$ まで拡張するのに必要な時間を計算している．積層欠陥は面欠陥の一種で，面積に比例する積層欠陥エネルギーを持っている[11]．そのため，拡張転位の幅は積層欠陥エネルギーが大きいほど小さくなる．この積層欠陥からの影響を部分転位に働く拡張転位の幅を縮める方向の力として取り入れる．これについてFig2.7に示す． $F_{sf}$ は積層欠陥から転位が受ける力， $F_{int}$ は転位間の相互作用力である．外力を考えない場合はこの二力の釣り合いにより拡張転位の幅 $d$ が決まる．この部分転位が積層欠陥から受ける単位長さあたりの力は積層欠陥の単位面積あたりのエネルギーに等しくなる．

この部分転位の解析について，外力が作用しない場合の直線らせん転位について検証する．無限長のらせん転位を仮定するとこの転位間に働く相互作用力は式(2.9)で表せる．

$$F_{int} = \frac{\mu b^2}{8\pi d} \left\{ \frac{2-3\nu}{3(1-\nu)} \right\} \quad (2.9)$$

今，この力と積層欠陥から受ける力が釣り合っているので，単位面積あたりの積層欠陥エネルギーを $E_{sf}$ とすると，拡張転位の幅 $d$ は式(2.10)のように表せる．

$$d = \frac{\mu b^2}{8\pi E_{sf}} \left\{ \frac{2-3\nu}{3(1-\nu)} \right\} \quad (2.10)$$

本解析では $E_{sf}=58$  [mJ/m<sup>2</sup>] と置く[35]．このとき  $d=3.38$ nmとなる．これとFig.2.8に示す解析結果を比較する．この解析結果は界面からの影響を除くため，界面から 50nm以上は離れた位置の分布を表示している．ここで拡張転位の幅は 3.2~3.3nmとなっており，理論解とよい一致を示している．

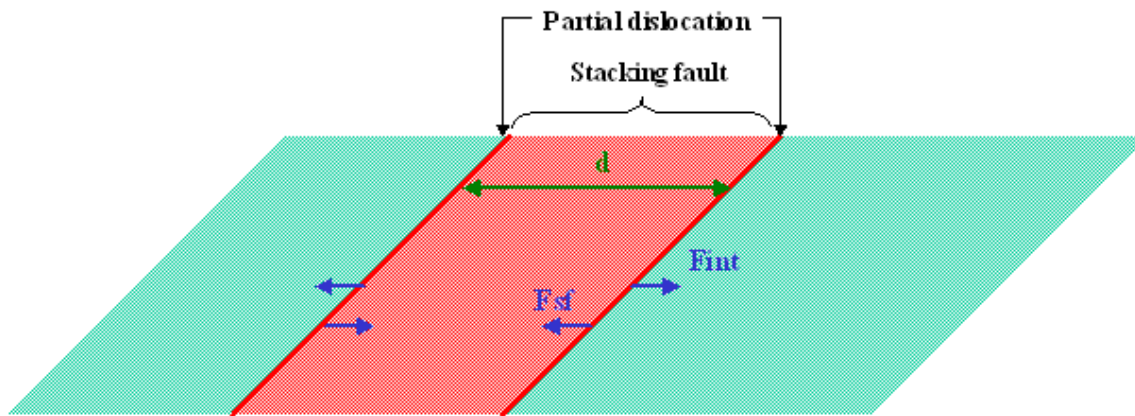


Fig.2.7 Schematic of extended dislocation

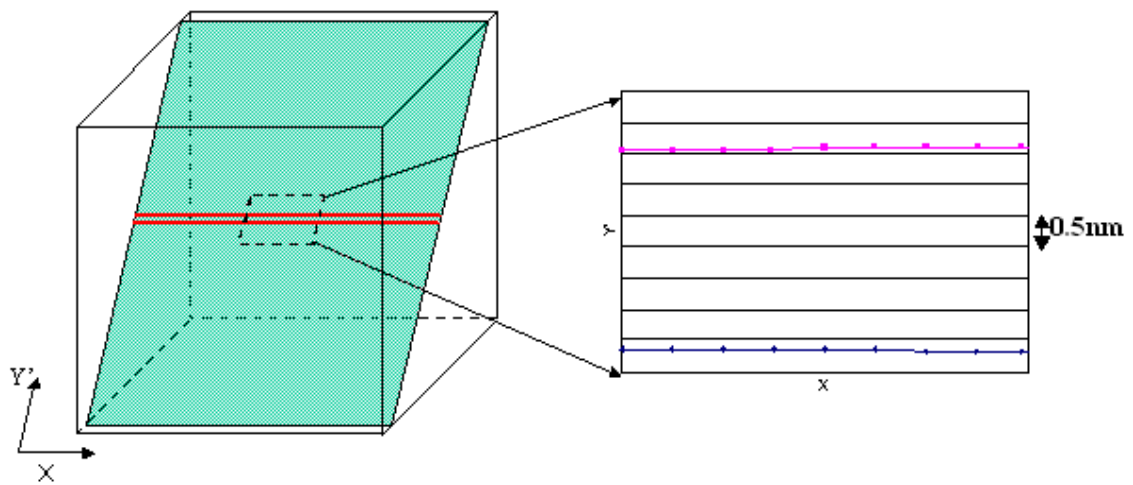


Fig.2.8 The extended width of straight screw dislocation.

# 第3章 解析結果

## 3.1 一様応力場における拡張転位挙動

### 3.1.1 緒言

George[25]らはシリコンの試験片に引っ張り荷重を加えることで試験片中で交差すべりを発生させた．この実験において転位は Peierls-valley に沿うような形状を取っている．この実験の概要を Fig.3.1 に示す．George らはまず，(1)800 の条件下で， $[-410]$ 方向に 25MPa の引っ張り応力を与える．(2)その後，650 の条件下で $[-1-10]$ 方向に 15MPa の力で引っ張る．その結果，(1)の過程で，らせん方向の直線転位が表面で収縮し，(2)の過程で交差すべりが発生・成長した．この収縮においては部分転位が表面でそれぞれのバーガースベクトルの方向を向くようにして起こっている．

そこで 本研究のように転位が Peierls-valley に拘束されない条件においても，引っ張り応力を加えた場合に同様に拡張転位が表面で収縮するか調べ，転位の収縮が表面の影響によって起こるか調べる．

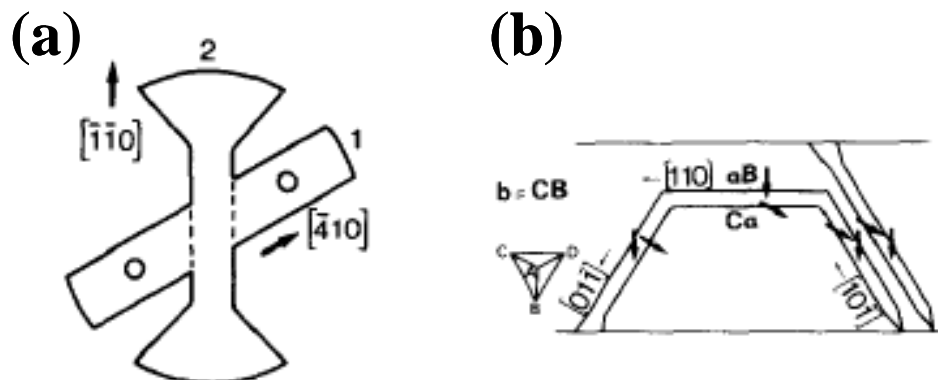


Fig.3.1 (a) Geometry of the specimen with two tensile axis. [25](b) The effect of the surface on the dissociation width. [25]

### 3.1.2 解析条件

Fig.3.2 のような直方体の解析モデルを作成し，解析をおこなった．(001)面と(00-1)面を自由表面に設定し，ここから受ける界面力を考慮する．応力場は論文の実験同様， $[-410]$ 方向に一様 $\sigma_0=25\text{MPa}$ とした．解析はすべり面(1-11)，バーガスベクトル $[-101]$ について行う．このモデルにFig.3.3 に示すように初期転位を配置する．初期転位は(001)表面に端点を持つ半径 50nmの転位ループと，(001)面と(00-1)面をつなぐ直線らせん転位を配置する．この転位の部分転位のバーガスベクトルは $[-2-11]$ と $[-112]$ である．

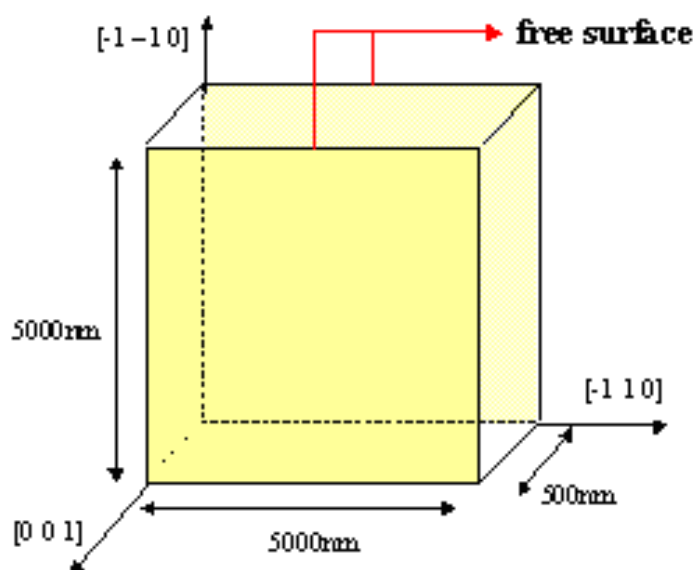


Fig.3.2 Analysis model of tensile test

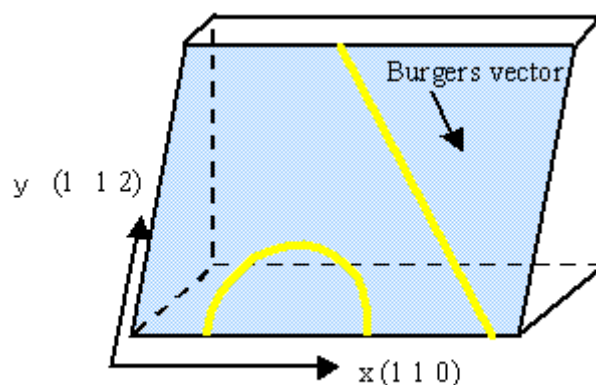


Fig.3.3 Initial geometry of dislocation



### 3.1.3 解析結果

Fig.3.4 に[001]表面に近い側の部分転位を[-2-11],遠い側の部分転位を[-112]に定めた際の解析結果, Fig.3.5 に[001]表面に近い側の部分転位を[-112],遠い側の部分転位を[-2-11]に定めた際の解析結果を示す.この二つの解析で結果に大きな違いは見られなかった.これは応力場が小さいため,バーガースベクトルの違いによる影響が少なかったためと考えられる.どちらの条件においても部分転位は表面に対しほぼ垂直に入っており,論文で述べられていた部分転位が表面においてバーガースベクトル方向を向くことによる拡張転位の収縮は確認されなかった.

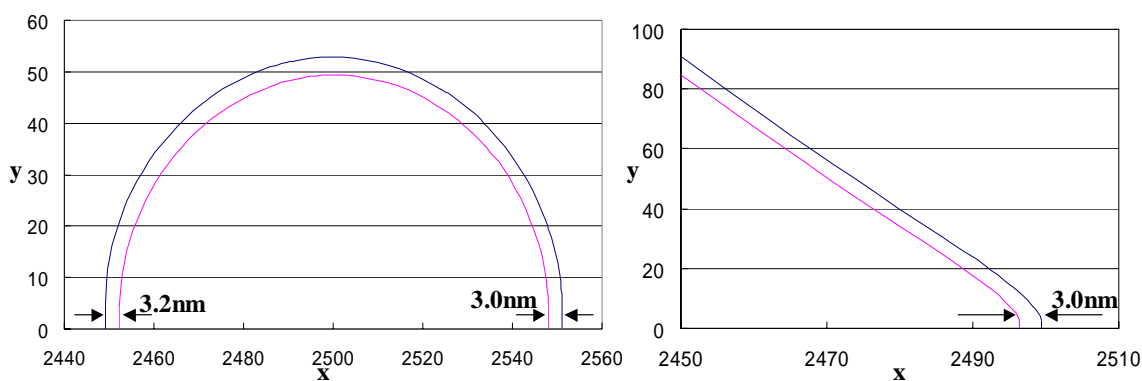


Fig.3.4 simulation result of tensile test. slip system partial dislocation red;[-2-11], partial dislocation blue;[-112]

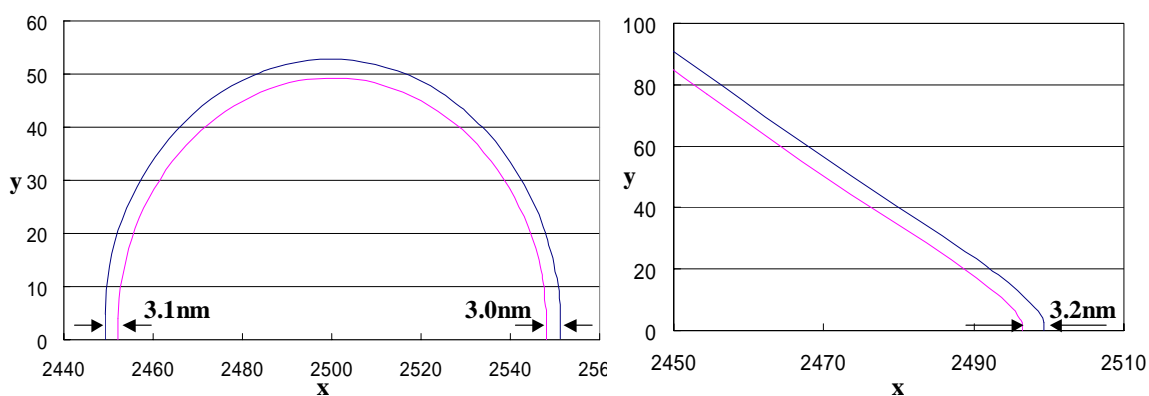


Fig.3.5 simulation result of tensile test. slip system. partial dislocation red ; [-112], partial dislocation blue;[-2-11]

### 3.1.4 考察

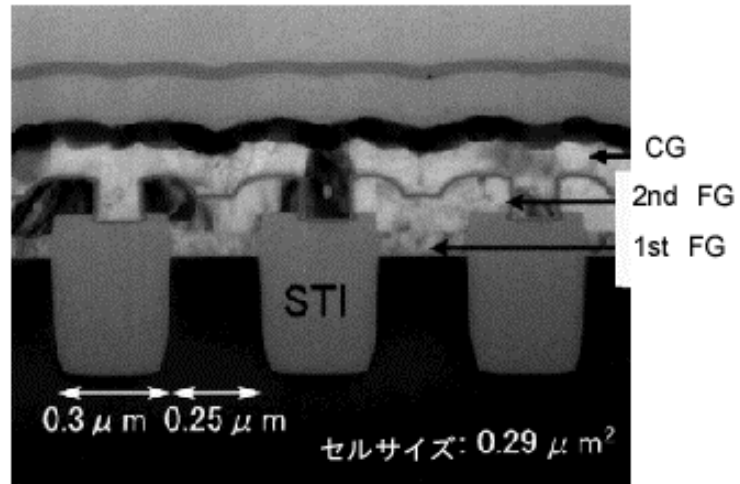
本章の解析において，部分転位の転位端は界面力の影響によりほぼ垂直に界面に入射した．よって本章の解析では，一様引っ張り応力下において George らが述べていた，部分転位が各バーガースベクトル方向を向くことによる表面の収縮は確認できなかった．よって，George らの論文における表面での拡張転位収縮の実験結果は，転位が Peierls-valley に拘束されていることの影響が大きいと考えられる．そのため，本研究の条件における交差すべりの場合，他の要因で拡張転位が収縮しているのではないかと考えられる．

## 3.2 STI 構造への適用

### 3.2.1 緒言

STI (Shallow Trench Isolation) とはSRAM等の半導体デバイス内部において素子間に絶縁体であるSiO<sub>2</sub>の溝を形成することで素子同士を電氣的に分離する構造のことである。Fig.3.6 はその代表的な構造である。シリコン基盤上のAA (Active Area) が幅 0.3mmのSTI溝で分離されているのが見て取れる。STI構造を用いることで基盤全体に占める素子分離領域の面積を小さくすることが可能なので[36]，STIはデバイスの高集積化に欠かせない技術である。しかし，このような素子構造の高密度化に伴い素子内部の応力は増大する傾向にある。素子内半導体製造に用いられるシリコンウエハは初期状態では完全無欠陥の状態で供給されるが，基盤特性改良のためのイオンインプランテーションや，熱応力や真性応力によるデバイス内の応力増大等の要因によって素子内に転位が導入されることがある。半導体素子内部において本来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，デバイスの電気特性の劣化，歩留まり低下の要因となる。そのため，半導体製造過程においてはシリコン基盤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。

三宅らは[2]本研究に先立ち，交差すべりを考えない場合においてSTI構造中に発生した転位形状とTEM画像を比較し，よい一致を得ている。この，STIを用いた構造中においても交差すべりが起こる事が確認されており，単一すべり面上での転位挙動に比べ，より深く，広範囲に転位が動くと考えられる。そこで，本章ではSTI構造を持つテストパターンに対して応力解析を行うと共に，転位動力学シミュレータを一本の転位ループに適用して単一すべり面における転位挙動，拡張転位の収縮，交差すべり発生時の転位挙動を解析する。そして，共同研究先の東芝で行われた実験結果と比較を行う。



CG : コントロールゲート FG : フローティングゲート

Fig.3.6 Example of STI structure [37]

## 3.2.2 解析手法

### 3.2.2.1 解析手順

本章では Fig.3.7 のような手順で解析を行う。まず、構造中の熱応力、真性応力を考慮した応力解析を行い、シリコン中の応力分布を求める。この結果を外部応力として転位動力学シミュレータに入力すると共に、ここで応力が集中して大きくなっている箇所を特定する。次に、求めた応力集中位置に初期転位を配置し、転位が初期転位半径よりも大きく成長するすべり系を求め、その単一すべり面における安定形状を求める。次に、この安定形状にある転位がどのように拡張しているか調べるためにこの転位を拡張転位に分解し、解析を行う。この解析において転位が直線らせん転位の拡張幅と比較し、収縮している場合、この位置で交差すべりを発生させ、転位が複数すべり面にまたがる場合の安定形状を調べた。この形状を共同研究先である東芝で得られた実験結果と比較する。

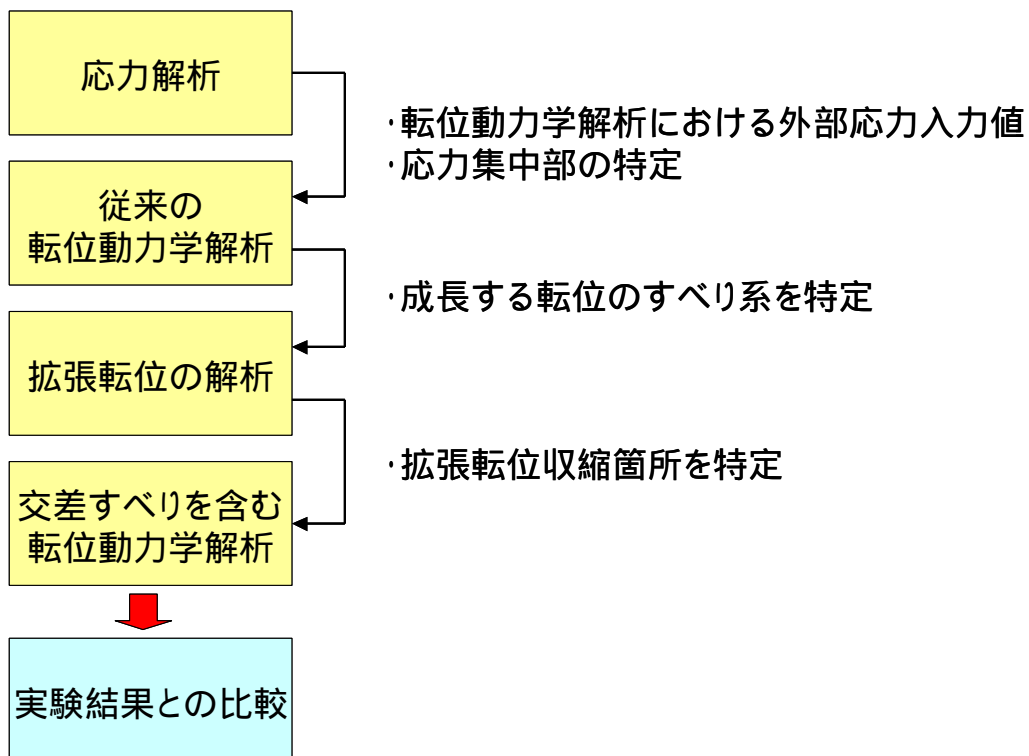


Fig.3.7 Flowchart of the analysis

### 3.2.2.2 解析対象

Fig.3.8 のような STI 構造を持つテストパターンに対して解析を行う．(a)が基板上から見た周期構造パターン，(b)が単位セルの立体形状である．

このテストパターンではシリコンのActive Areaを長方形に区切るように溝が掘られ，その溝がSiO<sub>2</sub>で埋められている．このSTI構造の上にPoly-SiのGateと，それを覆うSiNのSide wallが載せられた周期構造をしている．

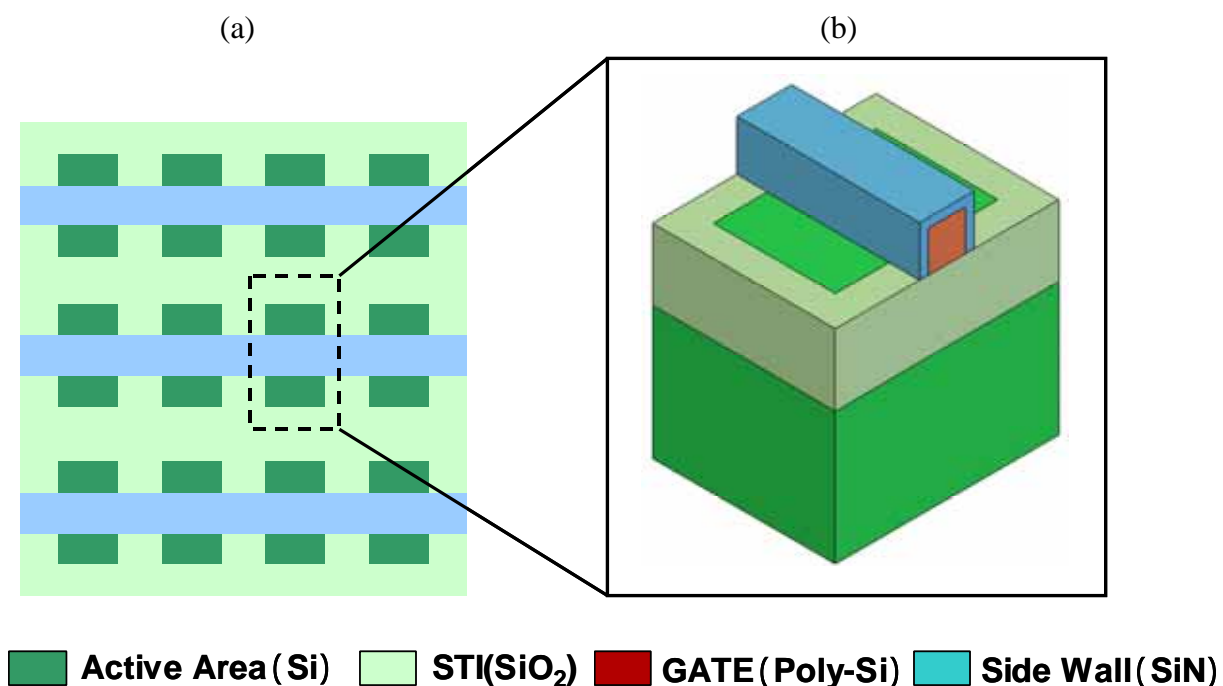


Fig.3.8 Schematics of STI structure plane view and 3-D view of the unit cell

### 3.2.3 応力解析

#### 3.2.3.1 応力解析モデル

Active Area 中に発生する転位は主に STI 製造プロセス中に発生する応力に起因すると考えられる．そこで，有限要素法による応力解析を行った．ここで，応力解析には ANSYS を用いる．作成した FEM モデルを Fig.3.9 ,Fig.3.10 に示す．Fig.3.9 をモデル 1 ，Fig.3.10 をモデル 2 とする．(a)は構造全体のモデル，(b)はシリコン部のみを表示しており，(c)はそれを[-110]方向から見た図である．STI 溝形状が転位挙動に与える影響を調べるため，溝の形状を変えた二種類のモデルを用意した．(c)からわかるように Fig.3.9 は STI 底と壁を直角にきっており，Fig.3.10 では STI 底と壁の間に 45 度の傾斜が入れてある．これらのモデルではメッシュ精度による違いはできるものの STI 溝底の角部以外ではほぼ同様の応力分布を持つと考えられる．使用した要素はどちらもシリコンは六面体一次要素，その他は四面体，もしくはピラミッド型の高次要素で Fig.3.9 の総節点数 115692 ，総要素数 93567 ，Fig.3.10 の総節点数 154984 ，総要素数 117350 である．

境界条件として  $x$  ,  $y$  ,  $z$  方向の各一面を面方向並進固定にし， $x$  ,  $z$  方向の反対側の面を面方向カップリングとして面内における面方向変位が同一にする拘束条件を与えた．これは，実際の素子構造での STI 深さに対し基盤全体の厚さが十分に厚いため，シリコン基盤が均一に変形する状態を模擬させるためである．また，転位動力学に必要な領域は STI 溝近傍のみであるので，要素数を削減し，計算コストを下げるために等価剛性要素を用いた．等価剛性要素とは基盤の大部分を等価な剛性を持つ薄い構造に置き換えるための要素である[38]．本解析で用いた材料物性値を Table 1 に示す．

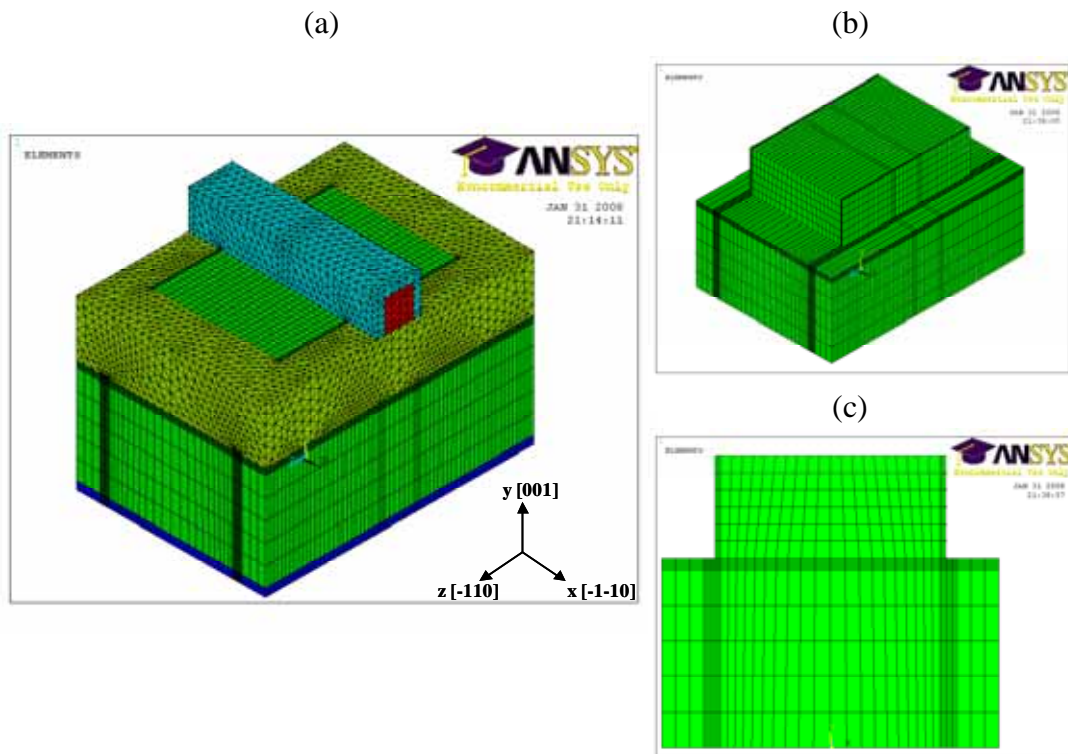


Fig.3.9 FEM model (model 1)

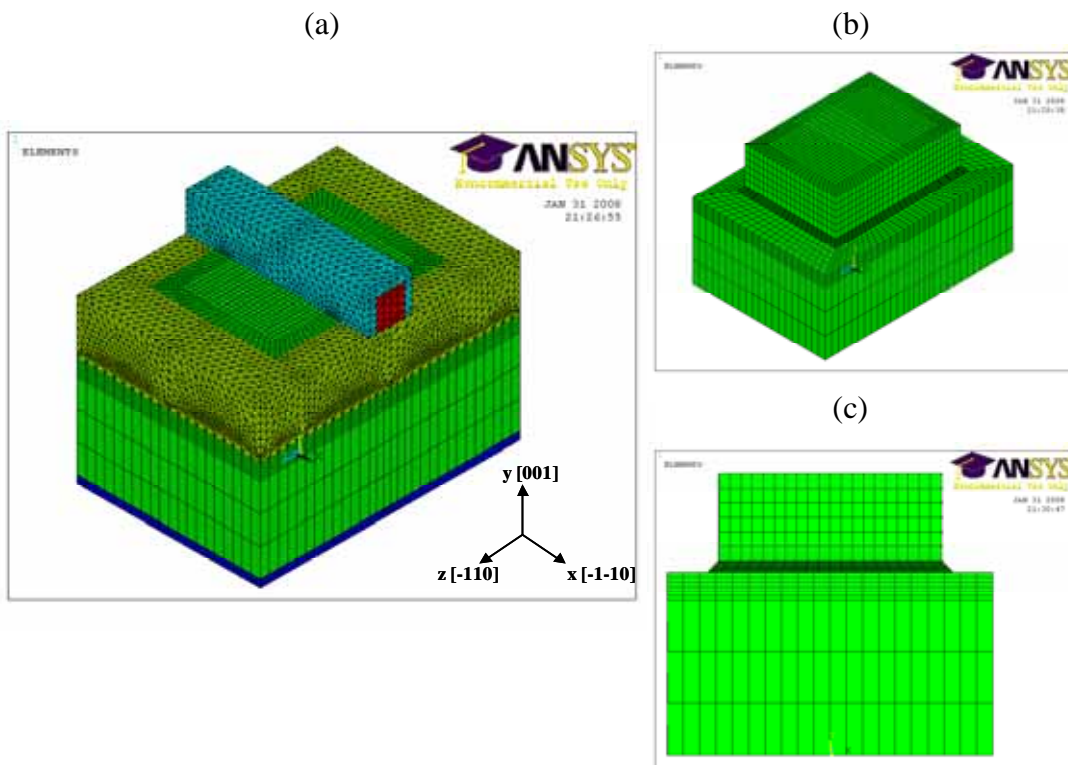


Fig.3.10 FEM model (model 2)



Table 1 Material properties used in FEM analysis

Material	Young ratio [GPa]	Poisson ratio	Coefficient of thermal expansion [1/K]
Si	170	0.20	$3.0 \times 10^{-6}$
SiO <sub>2</sub>	70	0.17	$0.87 \times 10^{-6}$
Poly-Si	170	0.20	$3.0 \times 10^{-6}$
SiN	260	0.25	$3.1 \times 10^{-6}$
Equivalent stiffness Si	$1.48 \times 10^4$	0.20	$3.0 \times 10^{-6}$

STI構造作成プロセスの概略をFig.3.11 に示す。(a)まず、シリコン基盤上に溝を作成し、1000 まで温度を上昇させ、熱酸化によりシリコン表面に酸化膜を形成する。(b)次に 500 程度においてCVD(Cheical Vapor Deposition)を行い、溝をSiO<sub>2</sub>で埋める。このあと 1000 でアニールを行い、応力を緩和する。(c)表面の平坦化処理の後、570 でPoly-Siのゲートを堆積させる。(d)この後、S/D(ソース/ドレイン)インプランテーションを行い、SiNの側壁を作成する。側壁作成後、再びS/Dインプランテーションを行った後、1000 でアニールを行う。

これら一連の製造プロセスで応力が発生する要因としては、熱膨張係数の違いから生じる熱応力とSiO<sub>2</sub>、Poly-Si、SiNに生じる真性応力が考えられる。そこで応力解析では、生成する順に要素を付加する複数ステップ解析を行った。また、Poly-SiとSiNには生成時に 1.5 GPaの真性応力を与え、SiO<sub>2</sub>にはインプランテーション後のアニール時に 1.2 GPaの圧縮の真性応力を与えた。

この解析における温度変化とステップごとの状態をFig.3.12 に示す。ここで、温度を一度上昇させてから冷却するだけの過程は最終的な応力分布に影響しないので省略している。Step1 でシリコンの温度を一様 500 上昇させ、Step2 でSiO<sub>2</sub>を付加する。このとき、付加する温度ではシリコンとSiO<sub>2</sub>間に熱応力が発生しないようにする。これは以後のPoly-SiとSiNの場合にも同様である。Step3 で温度を一様 570 にする。Step4、Step5 でそれぞれPoly-Si、SiNを付加し、真性応力を与える。Step6 で温度を一様 1000 に上昇させ、SiO<sub>2</sub>に真性応力を与える。このような複数ステップを与え、解析をおこなった。

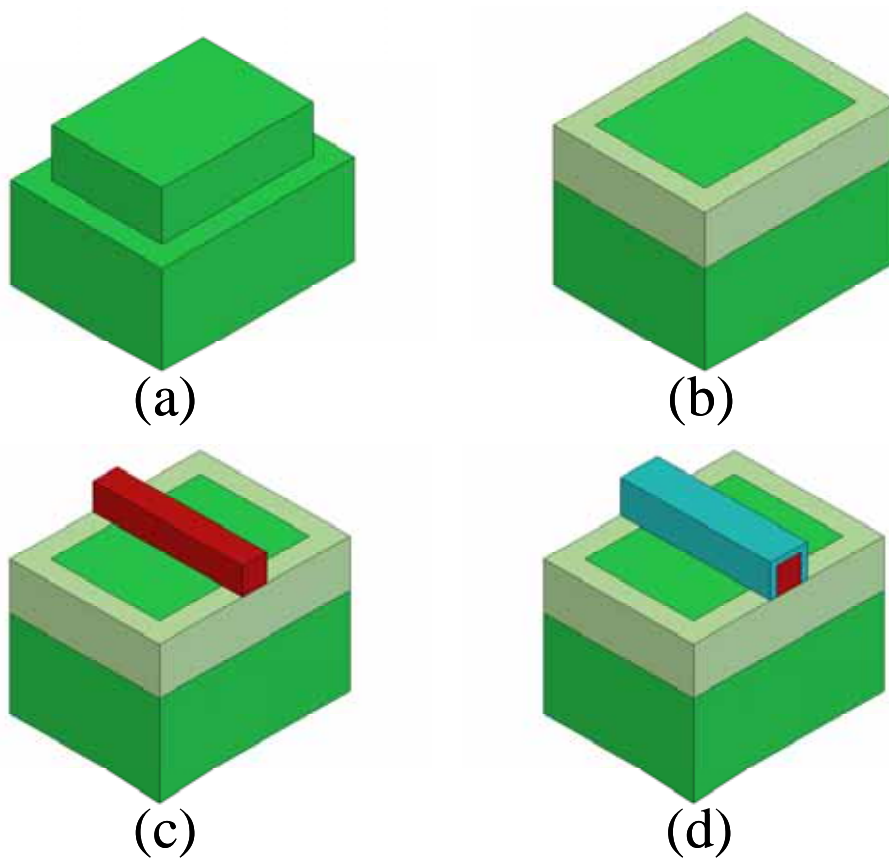


Fig.3.11 Fabrication process of STI structure

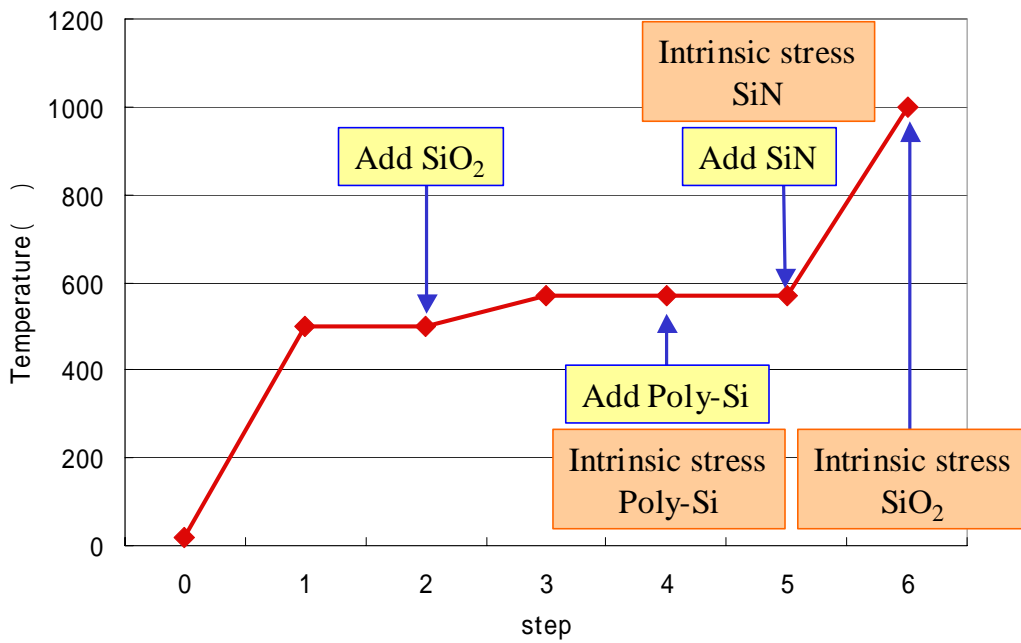


Fig.3.12 Step of FEM analysis

### 3.2.3.2 応力解析結果

モデル1について、Step6におけるシリコンの変形図と各応力成分をFig.3.13に示す。ここで変位はモデル最大長の5%となるように表示している。 $\sigma_x$ 、 $\sigma_y$ から分かるように、構造内はほぼ全体が圧縮の応力場となっている。また、SiとSiO<sub>2</sub>の境界は上に反りあがるように変形しているが、ゲート、側壁の下は変形が比較的拘束されている。そのため、この部分では圧縮の応力は他の部分よりも小さくなり、境界部ではせん断応力が大きくなっている。

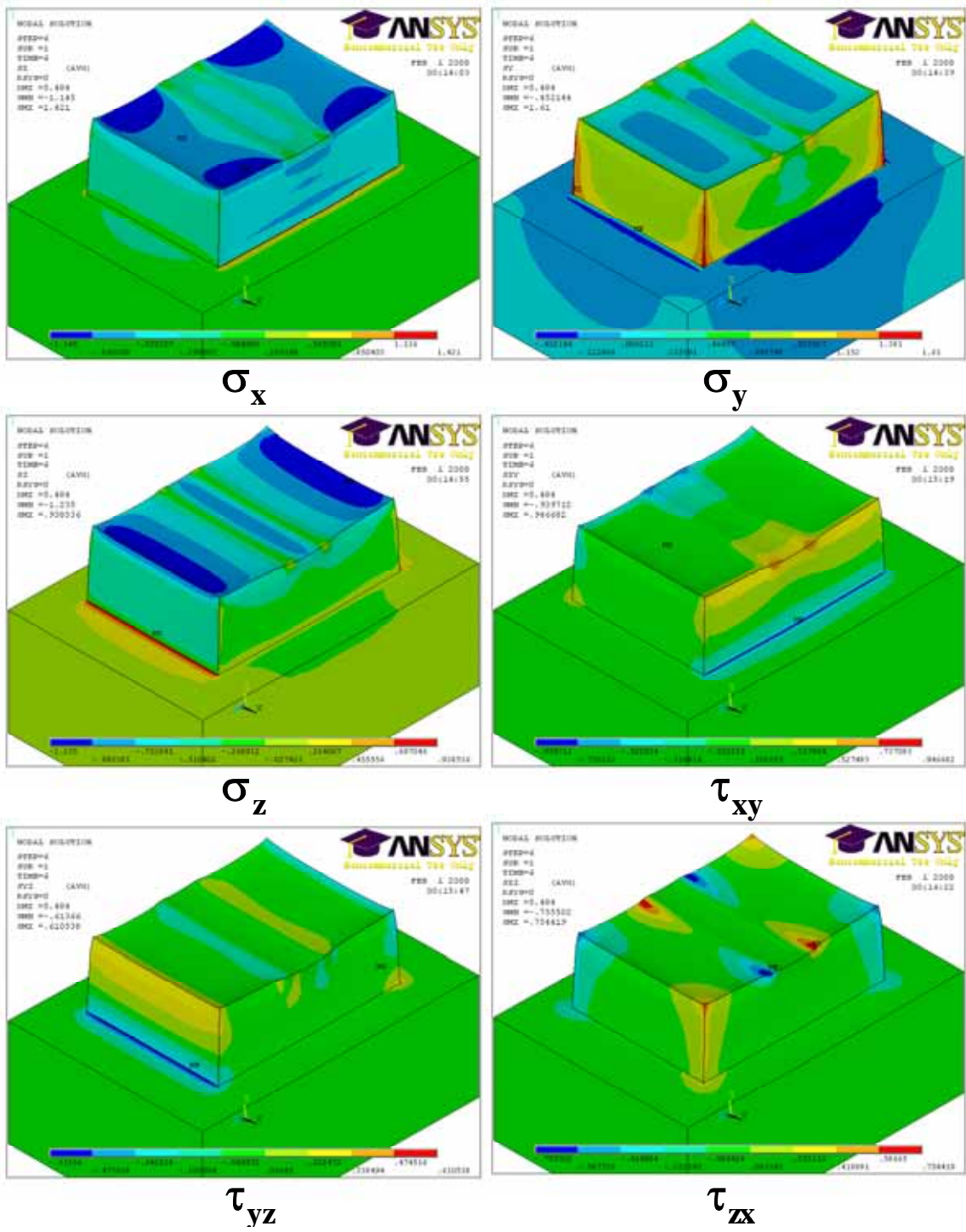


Fig.3.13 Stress distribution in STI structure.

### 分解せん断応力分布

転位に働く力はその応力場の分解せん断応力に依存する。よって、転位の発生、成長を考える上ではそれぞれのすべり系に対する分解せん断応力が重要となる。そこで、モデル1について、Step6 時のシリコン中の分解せん断応力をFig.3.14に示す。構造の対象性から  $(1-11)[10-1]$ 、 $(1-11)[110]$ 、 $(111)[10-1]$ 、 $(111)[-110]$ の4通りのすべり系について表示した。ここからSiN端とSi、SiO<sub>2</sub>が接している部分とSi上表面の角部に応力が集中していることが見て取れる。

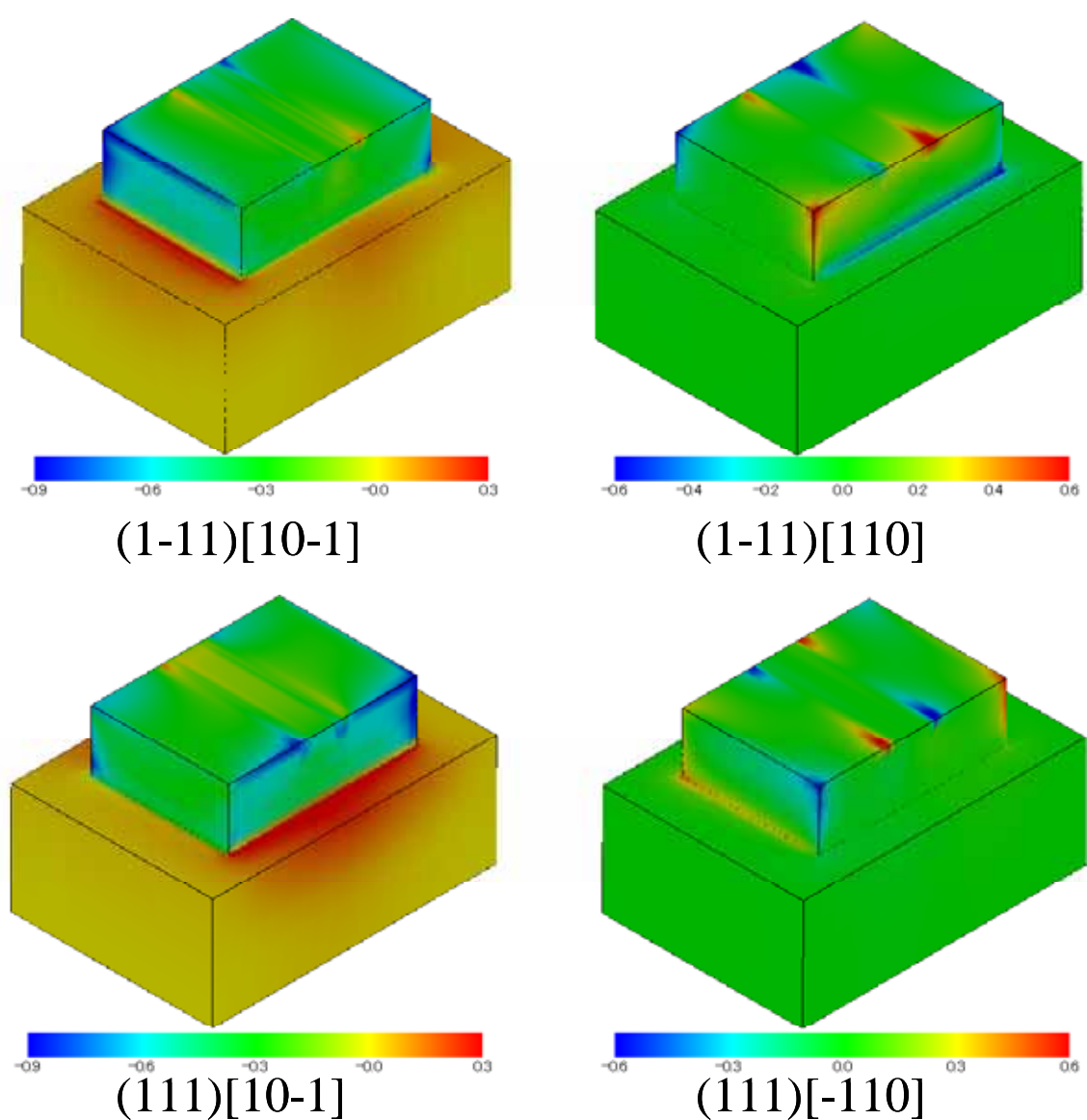


Fig.3.14 Resolved shear stress in STI structure.

## 3.2.4 転位動力学解析

### 3.2.4.1 転位の成長判定

応力分布の解析結果より Fig.3.15 に示す分解せん断応力が大きかったSiN端とSi, SiO<sub>2</sub>が接している部分(A)とSi上表面の角部(B)の二箇所を初期転位位置に設定する。この位置に半径 50nmの初期転位を配置し、この転位が成長するか調べた。50nmはイオンインプラネーション等により生じる微小な結晶欠陥に比べ大きい。しかし、今回初期転位位置のメッシュ精度が十分に細くないため、初期半径を大きくとった。この結果をTable 2 に示す。初期転位位置Aで5つ、初期転位位置Bで2つのすべり系で転位は成長をし、その他のすべり系では転位は成長せず、収縮、消滅した。Fig.3.16 に初期転位とそのすべり系における分解せん断応力を示す。今回使用した転位動力学シミュレータでは負の分解せん断応力場で転位は成長する方向に力を受ける。初期転位位置Aの(111)[10-1], (1-11)[10-1], (1-11)[110], 初期転位位置Bの(111)[01-1], (1-11)[0-1-1]のすべり系では初期転位の中心付近の方が転位線のある部分より応力が集中し、転位に大きな力が加わる。しかし、初期転位位置Aの(111)[01-1], (1-11)[0-1-1]のすべり系では初期転位の中心部は正の分解せん断応力場を持つ。よってこのすべり系において、転位は成長しないと考えられる。これらの転位は成長するに従い自己張力は小さくなるので分解せん断応力がゼロの位置付近まで成長し、酸素固着力により停止する。

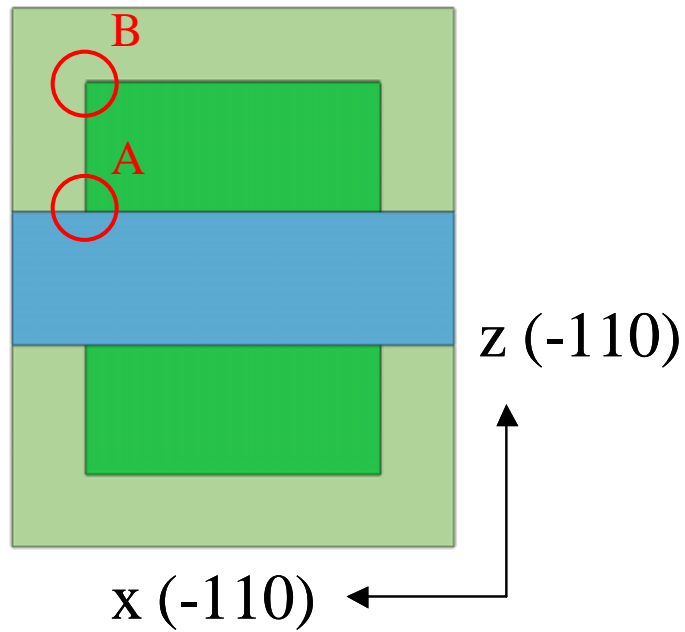


Fig.3.15 Initial dislocation position

Table 2 Whether initial dislocation grew or not in each case of different slip system

Slip plane	Slip direction		
(111)	[10-1]	[01-1]	[-110] ×
(1-11)	[10-1]	[0-1-1]	[110]
(-111)	[01-1] ×	[-10-1] ×	[110] ×

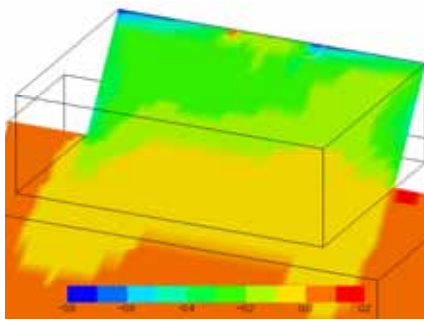
**Initial position A**

Slip plane	Slip direction		
(111)	[10-1] ×	[01-1]	[-110] ×
(1-11)	[10-1] ×	[0-1-1]	[110] ×

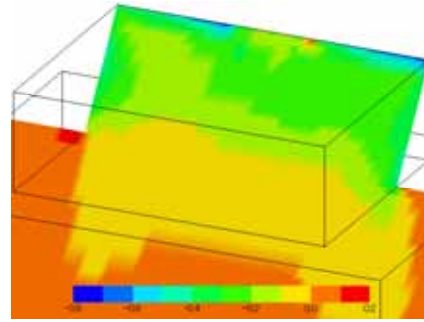
**Initial position B**

• • • Dislocation grew , × • • • Dislocation vanished

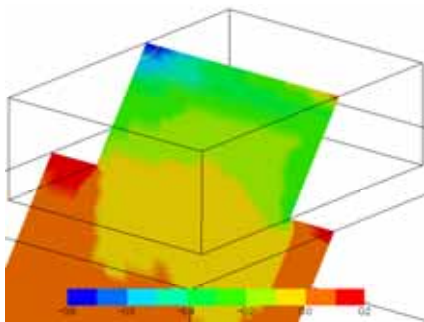
**Initial position A**



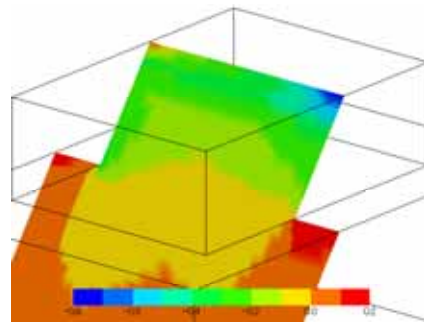
**(111)[10-1]**



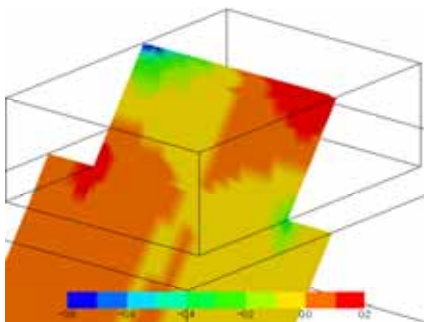
**(111)[01-1]**



**(1-11)[10-1]**

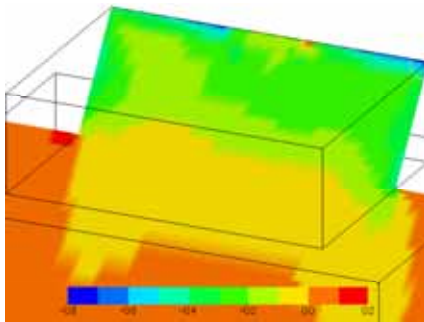


**(1-11)[0-1-1]**

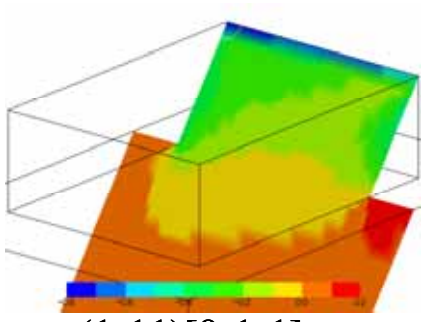


**(1-11)[110]**

**Initial position B**



**(111)[01-1]**



**(1-11)[0-1-1]**

**Fig.3.16 Initial dislocation loop and resolved shear stress**



### 3.2.4.2 拡張転位の解析

3.2.4.1 で成長が確認された転位について、その停止位置における拡張転位の解析を行う。ただし、Initial position A の(111)[10-1]と Initial position B の(111)[01-1]は対称な同一応力場を持っているのでまとめて考える。部分転位を考える際、発生位置における分解せん断応力が大きい方の部分転位が先行するとする。

#### 初期転位位置 A, (111)[10-1]すべり系, 初期転位位置 B, (111)[01-1] すべり系

Fig.3.17 にモデル 1 で解析した、(111)[10-1]のすべり系における部分転位の分解せん断応力を示す。部分転位のバーガスベクトルは[11-2], [2-1-1]の二通りである。初期転位位置 B, すべり系(111)[01-1]の転位は初期転位位置が C, すべり系(111)[10-1]の転位と見なす。初期転位位置 A, C において、どちらの部分転位の分解せん断応力も 0.8 ~ 0.9GPa 程度であり、今回行った応力解析の結果からではどちらが先行する部分転位か判断が困難である。そこで、今回は両方の場合について解析を行った。部分転位の解析結果を Fig.3.18 に示す。(a)はモデル 1 の結果、(b)はモデル 2 の結果である。位置 D, E は転位端を指している。先行する部分転位の違いにより、収縮する転位端に違いがでた。また、(a)の転位端が角部に来る場合、部分転位は完全に収縮したが、(b)においては転位端が傾斜部にあり、完全な収縮は見られなかった。両モデルで転位端において転位が収縮したのは先行する部分転位のバーガスベクトルが[2-1-1]での転位端 D と、先行する部分転位のバーガスベクトルが[2-1-1]での転位端 E であった。

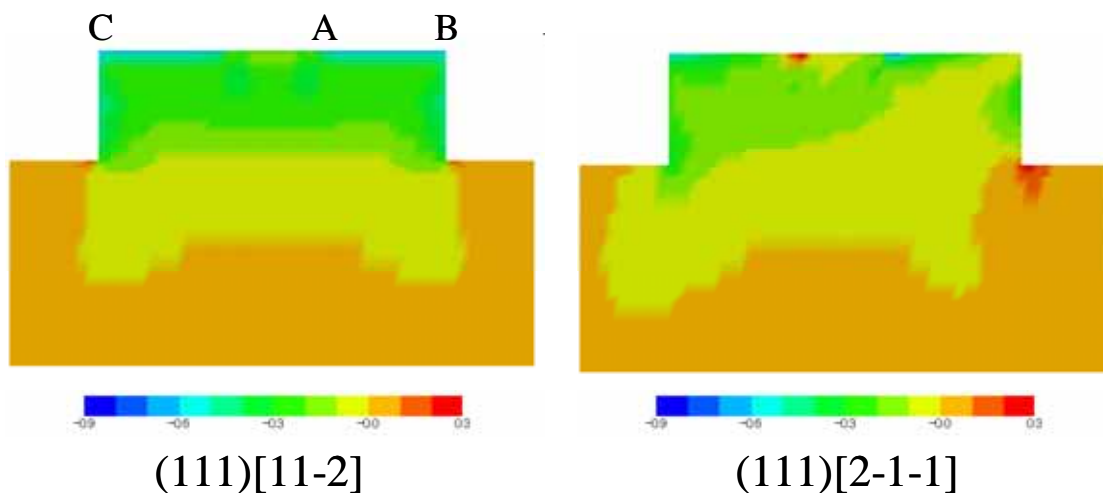


Fig.3.17 Resolved shear stress of partial dislocation of (111)[10-1] slip system

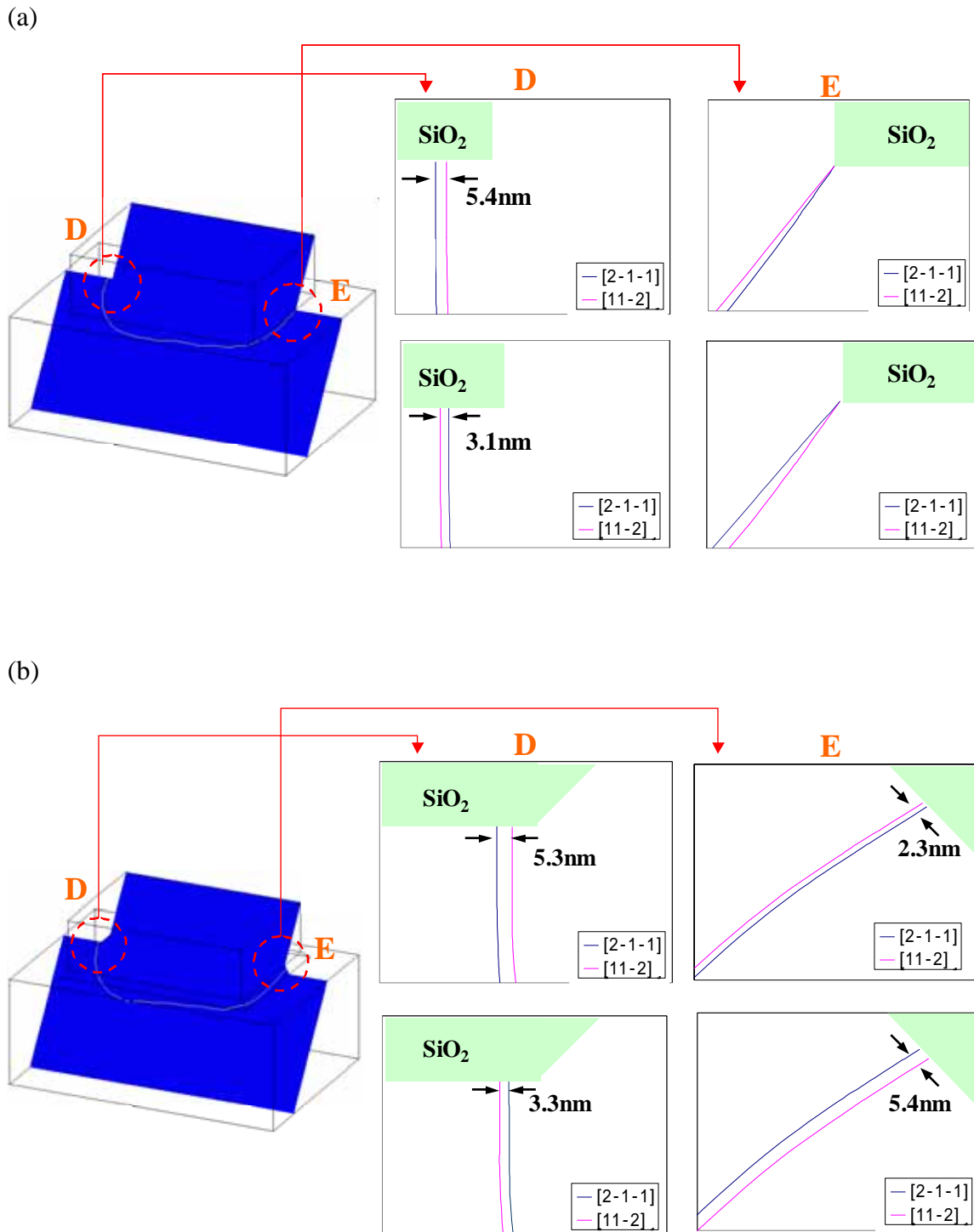


Fig.3.18 Simulation result of dislocations whose slip system is  $(111)[10-1]$ , and generation position is A and C . (a) model 1 , (b) model 2

### 初期転位位置 A , (1-11)[10-1] すべり系

Fig.3.19 にモデル 1 で解析した , (1-11)[10-1] のすべり系における部分転位の分解せん断応力を示す . 部分転位のバーガースベクトルは [1-1-2] , [21-1] の二通りである . 初期転位位置 A におけるすべり方向 [1-1-2] に対する分解せん断応力は 0.4GPa 程度 , すべり方向 [21-1] に対する分解せん断応力は 1.0GPa 程度である . この応力解析の結果から , 本解析では先行する部分転位のバーガースベクトルは [21-1] に定める . 部分転位の解析結果を Fig3.20 に示す . (a) はモデル 1 の結果 , (b) はモデル 2 の結果である . 位置 F,G は転位端を指している . (a) の 90 度の角部 , (b) の 45 度の角部において転位は完全に収縮した . F の転位端において両方のモデルで拡張転位が収縮した .

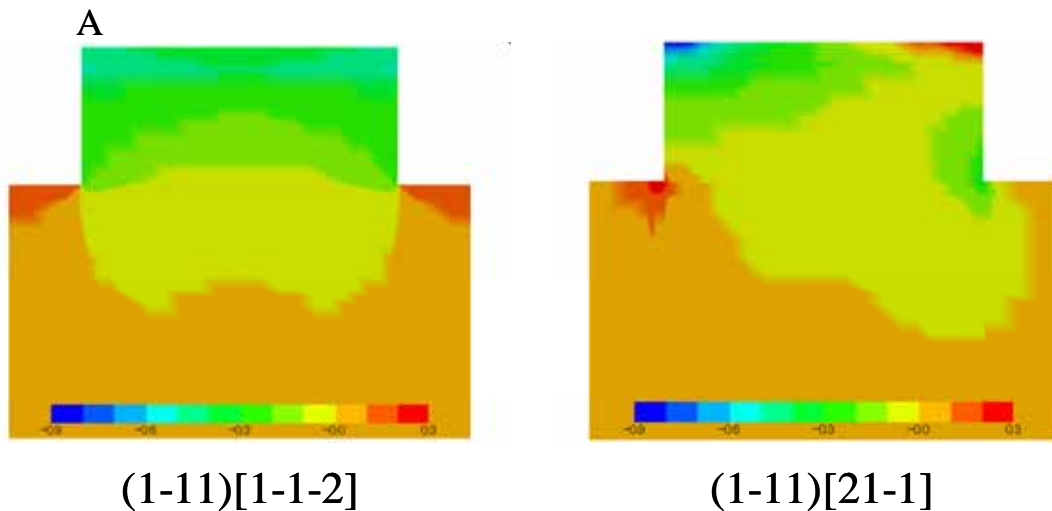


Fig.3.19 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[10-1] slip system

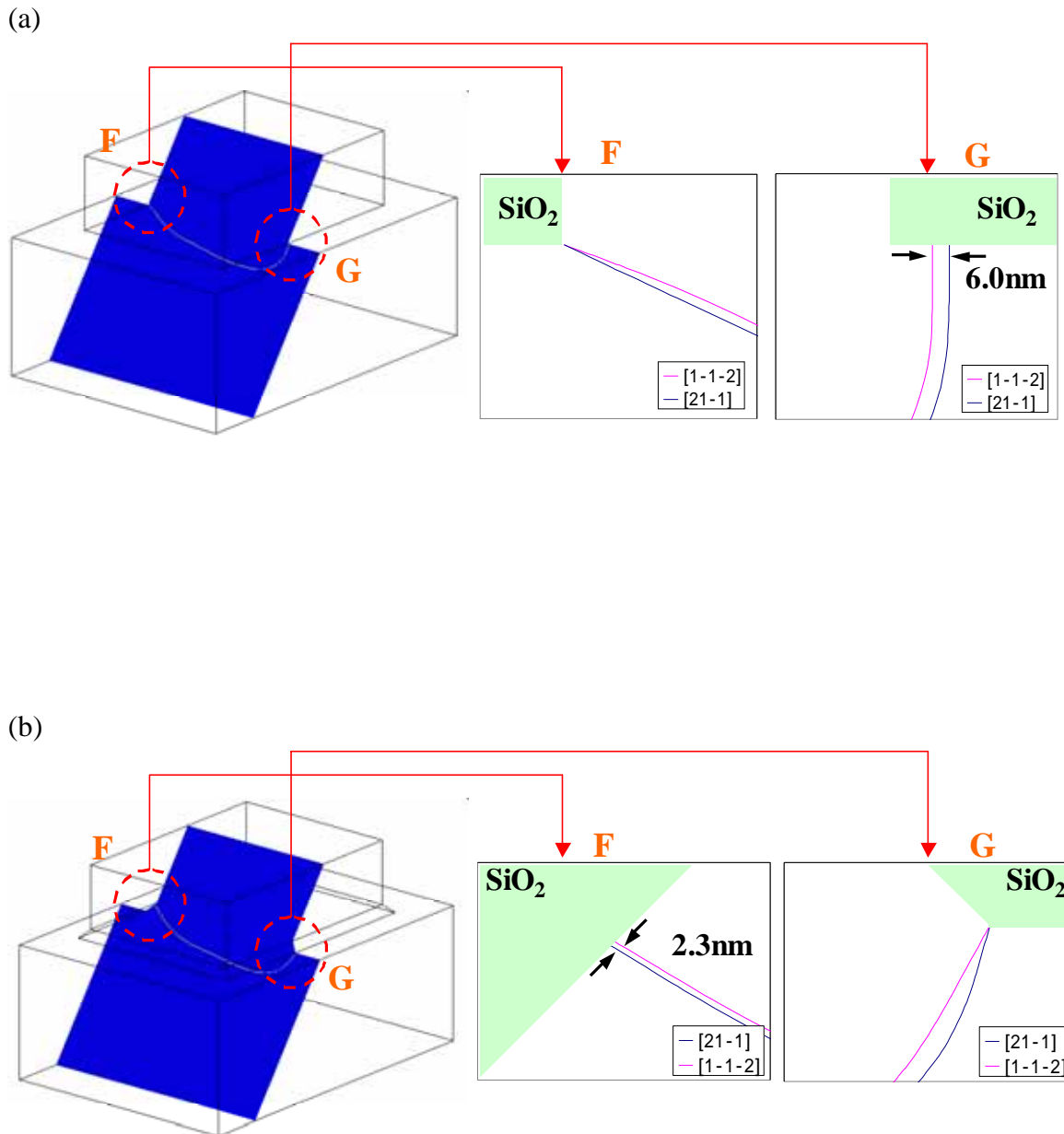


Fig.3.20 Simulation result of dislocations whose slip system is  $(1-11)[10-1]$ , and generation position is A. (a) model 1, (b) model 2

### 初期転位位置 A , (1-11)[110] すべり系

Fig.3.21 にモデル 1 で解析した , (1-11)[110]のすべり系における部分転位の分解せん断応力を示す . 部分転位のバーガースベクトルは[21-1] , [121]の二通りである . 初期転位位置 A において , すべり方向[21-1]に対する分解せん断応力は 1.0GPa 程度 , すべり方向[121]に対する分解せん断応力は 0.3GPa 程度である . この応力解析の結果から , 本解析では先行する部分転位のバーガースベクトルを [21-1]に定める . 部分転位の解析結果を Fig3.22 に示す . 位置 H,I は転位端を指す . このすべり系において , 転位は STI 底まで成長しなかった . よって , STI 底形状の影響は受けないのでモデル 1 についてのみ解析を行った . このすべり系においては H,I 両位置において , 転位の収縮は確認されなかった .

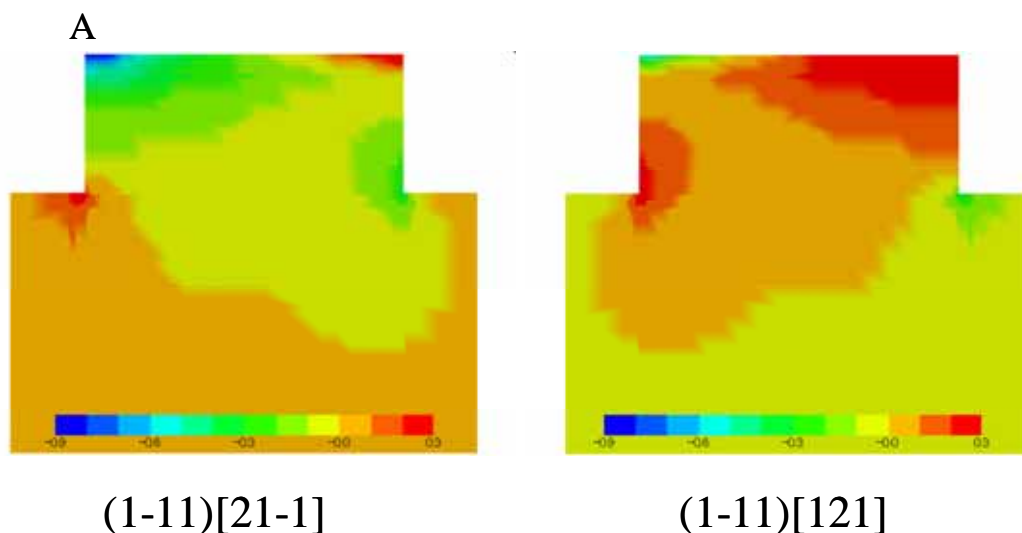


Fig.3.21 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[110] slip system

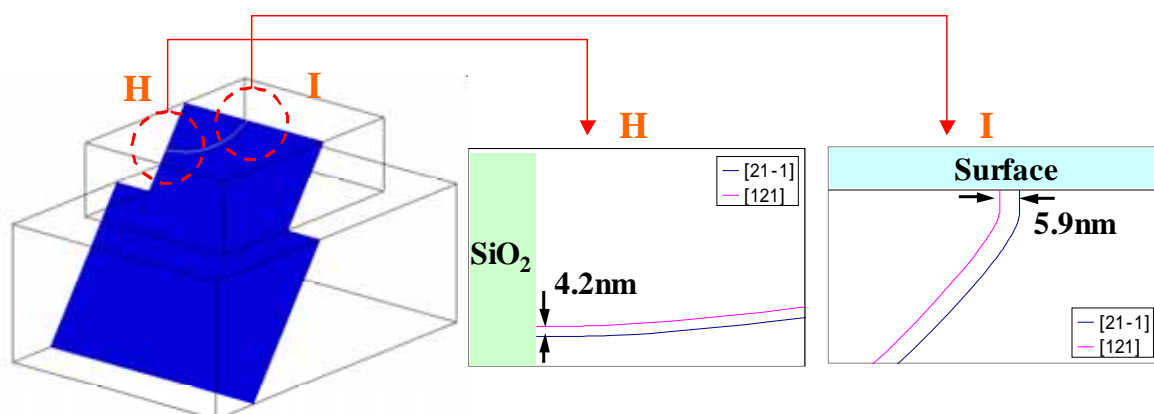


Fig.3.22 Simulation result of dislocations whose slip system is (1-11)[110], and generation position is A .

### 初期転位位置 B , (1-11)[0-1-1] すべり系

Fig.3.23 にモデル 1 で解析した (1-11)[0-1-1] のすべり系における部分転位の分解せん断応力を示す。部分転位のバーガースベクトルは [1-1-2] , [-1-2-1] の二通りである。初期転位位置 B において、すべり方向 [1-1-2] に対する分解せん断応力は 0.9GPa 程度、すべり方向 [-1-2-1] に対する分解せん断応力は 0.7GPa 程度である。この応力解析の結果から、本解析では先行する部分転位のバーガースベクトルを [1-1-2] に定める。部分転位の解析結果を Fig3.24 に示す。(a) はモデル 1 の結果、(b) はモデル 2 の結果である。位置 J, K は転位端を指す。(a) の K , (b) の J において STI 底の角部でそれぞれ転位が完全に一致した。(a) の J においては STI 底面でやや転位が収縮した。これより、両モデルで収縮したのは J の転位端である。

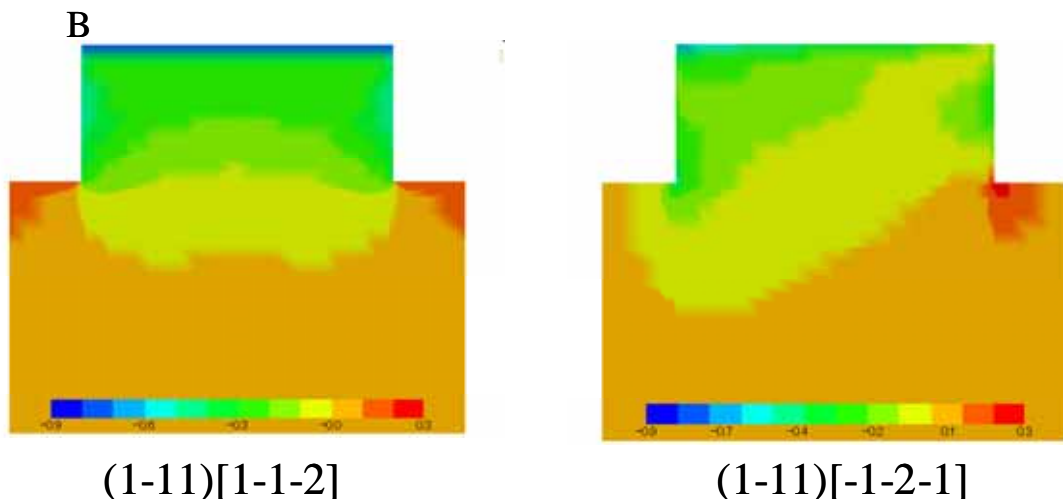
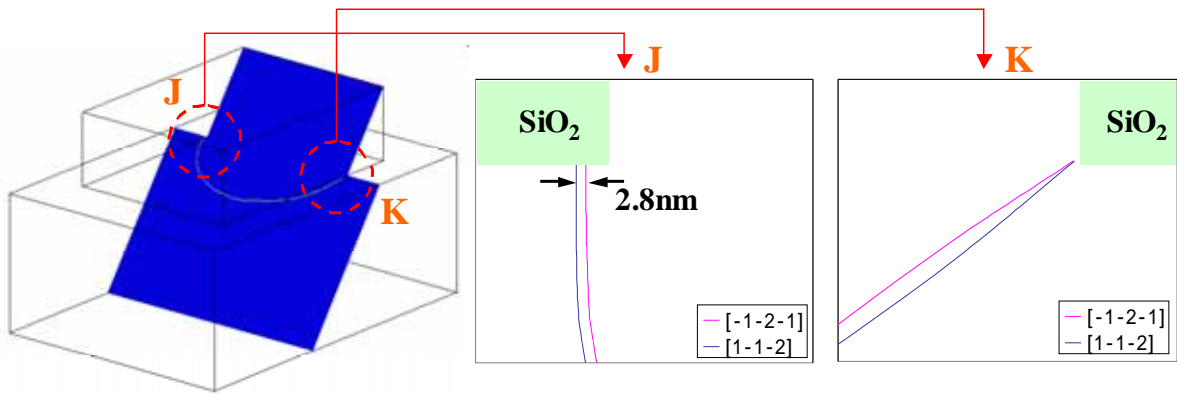


Fig.3.23 Resolved shear stress of partial dislocation of (1-11)[110] slip system

(a)



(b)

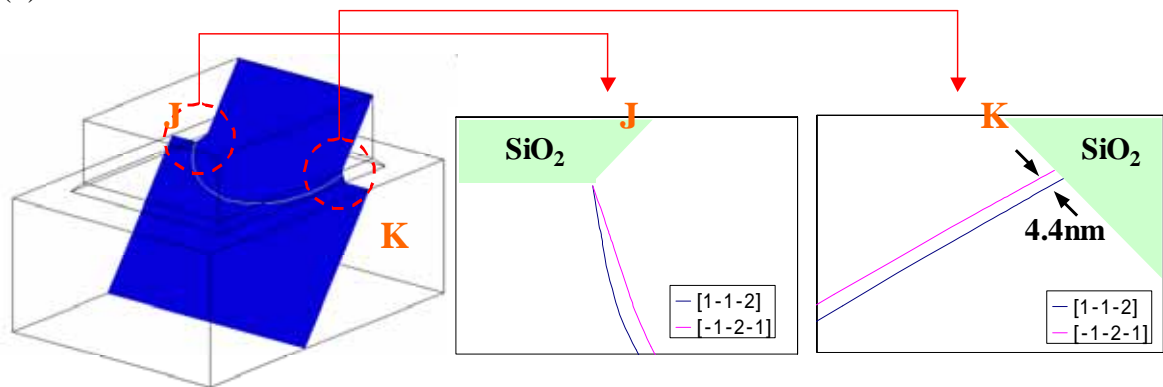


Fig.3.24 Simulation result of dislocations whose slip system is  $(1-11)[0-1-1]$ , and generation position is B .

### 3.2.4.3 交差すべり解析

3.2.4.2 において，モデル1，モデル2の両モデルで拡張転位が収縮した条件に対して，交差すべりの解析を行う．交差すべり発生位置は収縮が起こった転位端とし，モデルは実際の STI 形状に近いモデル2を用いる．

すべり系(111)[10-1]の転位端 D，すべり系(111)[10-1]の転位端 E，すべり系(1-11)[10-1]の転位端 F，すべり系(1-11)[10-1]の転位端 J において交差すべりを発生させた解析結果をそれぞれ Fig.3.25，Fig.3.26，Fig.3.27，Fig.3.28 に示す．それぞれ交差すべり発生地点を赤点線で示し，すべり面を青色の平面で表示している．右側の図は同時刻における上から見た図である．Fig.3.26, Fig.3.27 のように転位端から単位セルの内側に向かうすべり面に交差すべりが発生した場合，転位は STI 壁を直角につなぐような形で停止した．Fig.3.25，Fig.3.28 のように転位端から単位セルの外側に向かうすべり面に交差すべりが発生した場合，転位は単位セル間の STI 溝が交差する位置付近で停止した．Fig.3.29 に東芝での実験において交差すべりが発生した転位の形状をイラストで示す．この実験においては Peierls-valley による転位の拘束は確認されていない．この実験結果から，Fig.3.26 が(a), Fig.3.27 が(b)の結果をよく再現している．



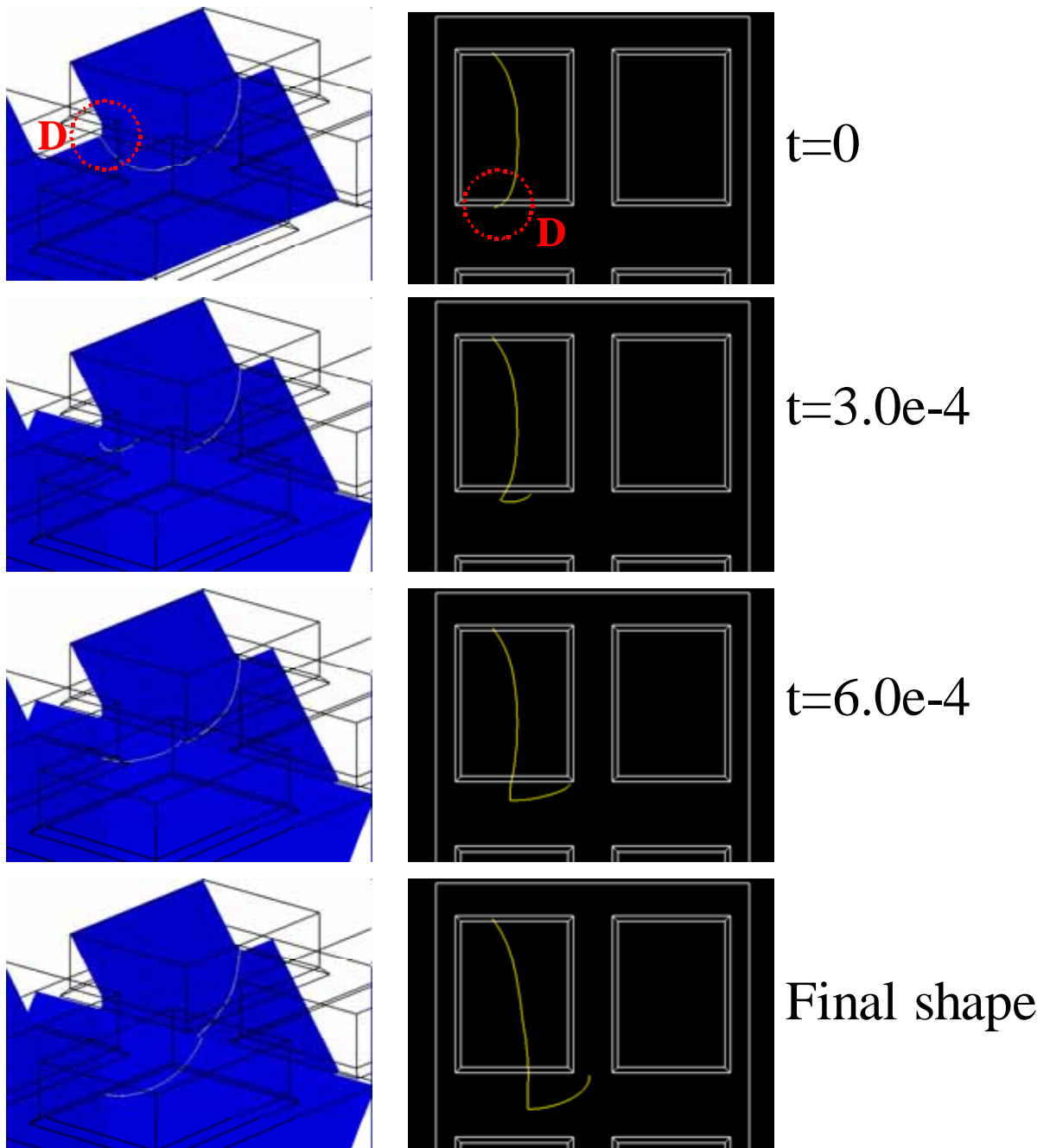


Fig.3.25 Simulation result of cross-slip which occurred at point D

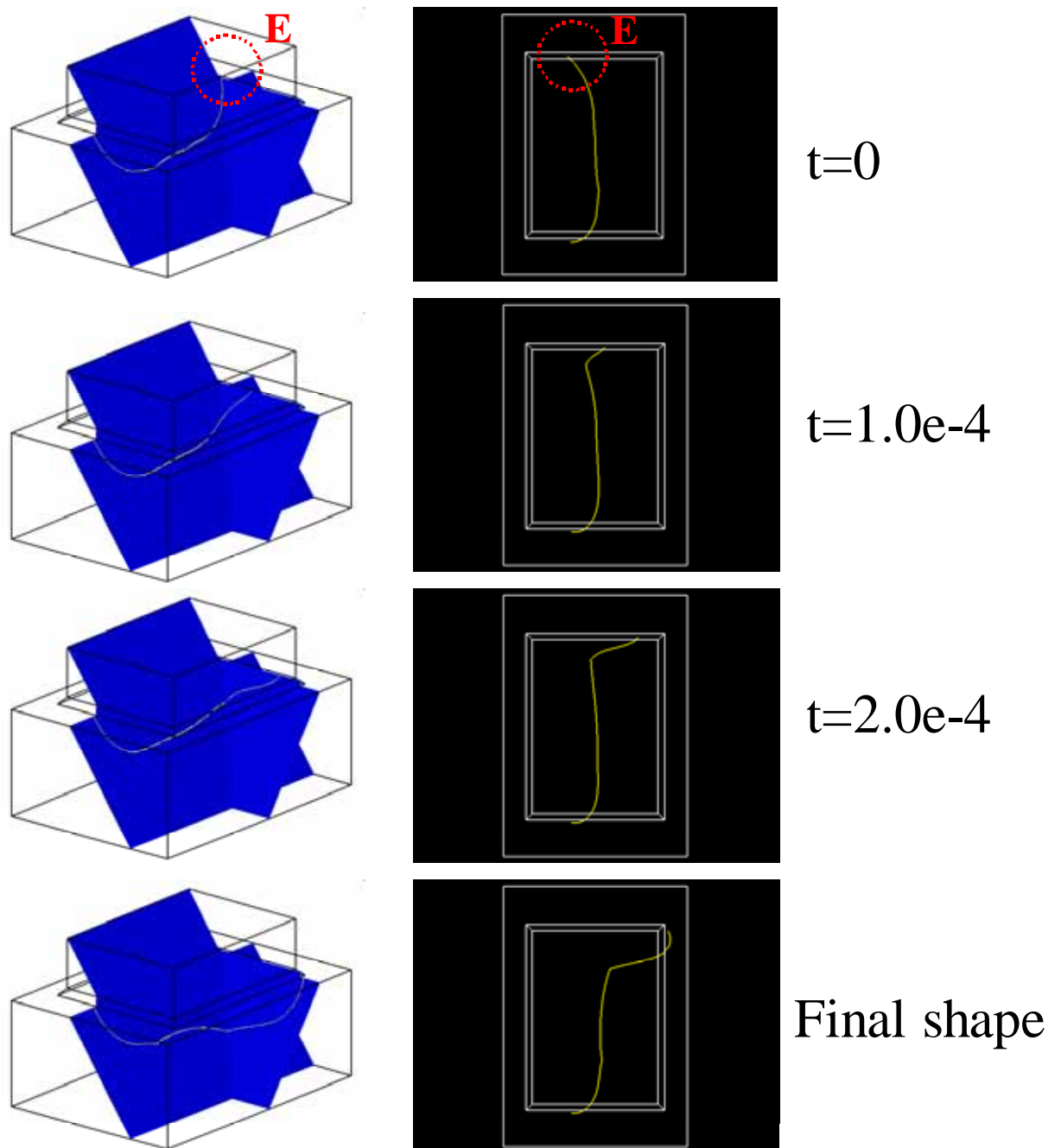


Fig.3.26 Simulation result of cross-slip which occurred at point E

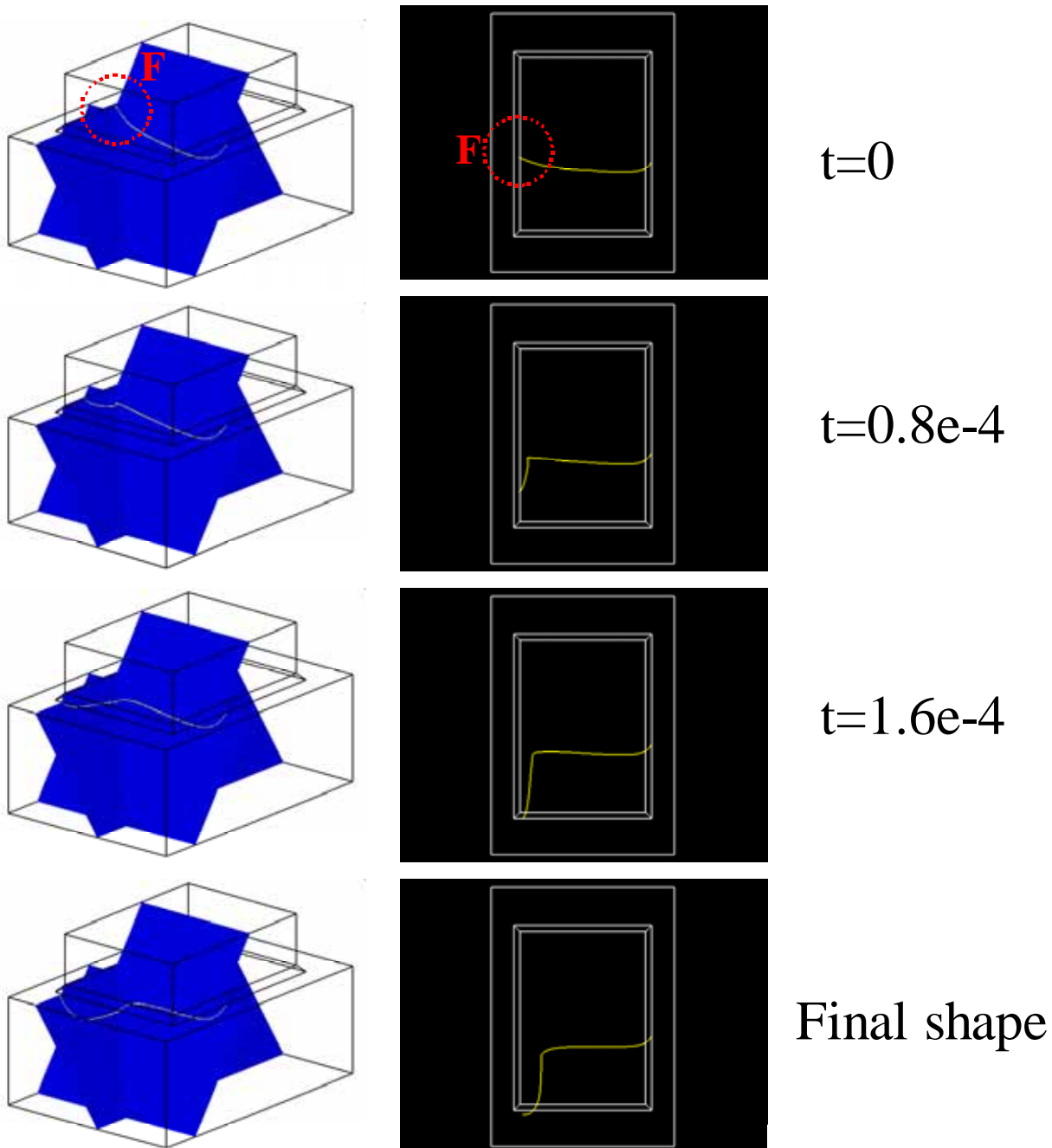


Fig.3.27 Simulation result of cross-slip which occurred at point F

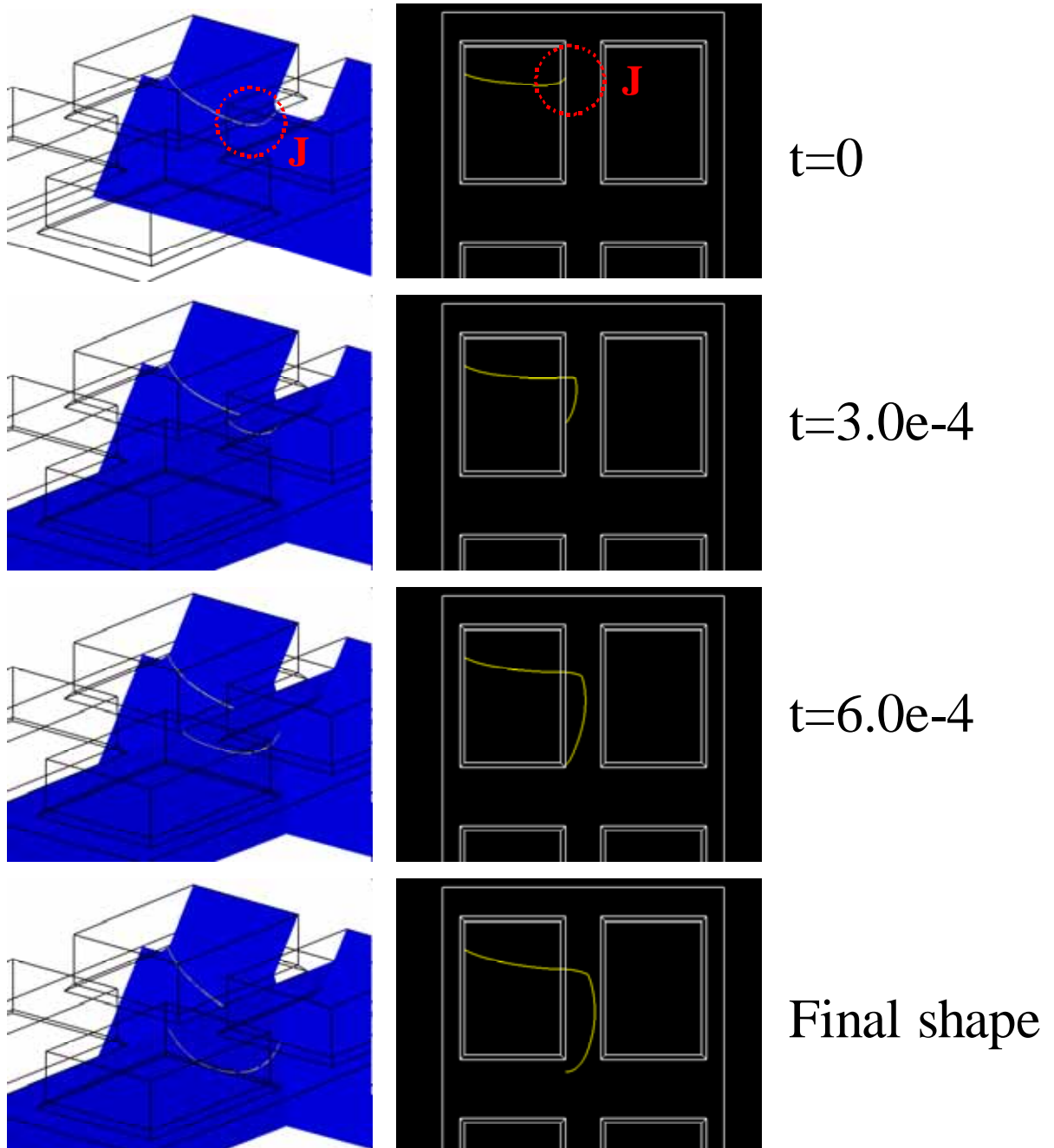


Fig.3.28 Simulation result of cross-slip which occurred at point J

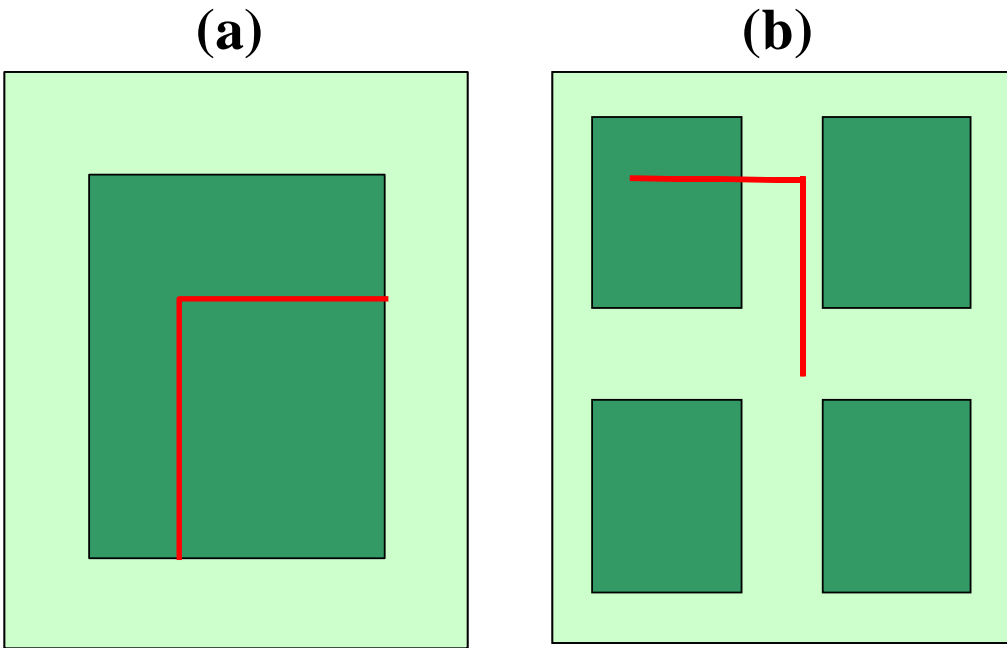


Fig.3.29 Sketch of experiment result

### 3.2.5 考察

STI 構造中における拡張転位の収縮について大きく分けて二種類の収縮が確認された。一つは応力場による拡張転位の収縮である。この拡張転位の収縮はモデルに対する依存性が少なく、すべり系(111)[10-1]の転位端 D，すべり系(111)[10-1]の転位端 E，すべり系(1-11)[10-1]の転位端 F，すべり系(1-11)[10-1]の転位端 J において確認された。この応力による拡張転位の収縮は応力分布の変化により起こり、初期転位位置における分解せん断応力が小さいほうの部分転位が転位停止位置付近でもう一方に比べ大きい場合、もしくはもう一方の部分転位の分解せん断応力が転位の成長を妨げる方向に働くために起こる。もう一つは構造による拡張転位の収縮である。この場合、急激に拡張転位が収縮する反面、モデル依存性が大きく一方のモデルにおいて収縮してももう一方ではまったく収縮していない結果がみられた。また、この収縮は必ず2つの部分転位の転位端がモデルの90度角、もしくは45度角にトラップされる形で起こった。よってこの収縮はモデルの影響と考えられ、この影響を完全に取り除くには局面を持つ構造に対しても解析を可能とする必要がある。また、実際の STI 底部は緩やかにカーブしているため、この収縮は起こらないと考えられるが、転位が構造中に存在する何らかの障害物によって運動が妨げられた場合、転位が収縮し、交差すべりが起こることは考えられる。

本研究の解析において転位が収縮することは確認できたが、その拡張幅の解析精度にはまだ改善の必要があると考えられる。それは部分転位の解析時における離散化精度、応力解析における精度が原因である。離散化については拡張幅が数 nm であるのに対し、素片の長さも1~2nmに制限される。この解析精度の向上のためにメッシュ精度の向上や分子動力学法の利用が望まれる。

また、交差すべり解析においては交差すべりの発生回数が1回の比較的単純な場合の再現はできたので、交差すべりが二回以上発生していると考えられるより複雑な形状についても同様のことが言えるか調べる必要がある。

## 第4章 結論

転位停止位置において転位を部分転位に分解し，その挙動をもとめるプログラムを作成し，構造に対し応用した．

その結果，本研究における条件では，一様引っ張り応力下では拡張転位の収縮が起こらなかった．次に行ったSTI構造中の拡張転位の挙動を解析では，Si-SiO<sub>2</sub>界面にある転位端での拡張転位の収縮を確認した．この収縮の要因は応力場が転位を収縮させる方向に働くことであると考えられる．この解析において，拡張転位の収縮が確認された転位端で交差すべりを発生させたところ，実験結果に近い転位形状を解析によって再現することができた．

## 参考文献

- [1] 志村忠夫．半導体シリコン結晶工学．丸善，1993
- [2] 三宅威生．転移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．
- [3] 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,pp62-69 , 2005 .
- [4] E.Adler , J.K.DeBrosse , and , S.F.Geissler et al . The evolution of ibm comc dram technology . (<http://www.research.ibm.com/journal/rd/391/adler.html>) . *International Business Machines Corporation* . Vol.39.p.12 , 1998 .
- [5] 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
- [6] N.Tuchiya ,O.Fujii ,K.Umezawa ,M.Iwase ,and ,Y.Ushiku .The origin of extended dislocation induced by high-dose ion implantation . *IEEE TRANSACTIONS ON SEMICONDUCTOR MANUFACTURING* . Vol.18,No.1,pp19-25.2005
- [7] G.Z.Pan , K.N.Tu , and , Prussin . Size-distribution and annealing behavior of end-of-range dislocation loops in silicon-implanted silicon . *J.Apply.Phys.* , Vol.81,No.1,pp.78-84,1997.
- [8] G.Z.Pan , K.N.Tu , and , Prussin . Microstructural evolution of  $1 \times 1 \times 3$  rodlike defects and  $1 \times 1 \times 1$  dislocation loops in silicon-implanted silicon . *Apply.Phys.Lett* , Vol.71,No.4,pp.659-661,1997.
- [9] J.P.Hirth and J.Lothe . *THEORY OF DISLOCATIONS* Second Edition . Willey . New York,1982
- [10] D.ハル．転位論入門．共立善処．1978．
- [11] 加藤雅治．入門転位論．裳華房，1999
- [12] 鈴木秀次．転位論入門．アグネ，1969
- [13] K.Sumino . *Handbook on Semiconductors Completely Revised Edition Volume 3 Chapter 2 Mechanical Behavior of Semiconductors* . Elsevier Science B.V , 1994
- [14] 小林尚司．転移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．東京大学修士論文，2005．
- [15] W.Puschel . Model for dislocation cross-slip in closed-packed crystal structures : a critical review , *Prog.Mat.Sci.* , Vol47,pp.415-461 , 2002
- [16] M.Rhee,H.M.Zbib,J.P.Hirth,H.Huang,and,T.de.la.Rubia , Models for long-/short-



- range interactions and cross-slip in 3D dislocation of BCC single crystal  
Modeling Simul.Mater.Sci.Eng. , Vol.6 , pp.467-492 , 1998
- [17] M.S.Duesbery , Dislocation motion, constriction and cross-slip in fcc metals  
Modeling Simul.Mater.Sci.Eng. , Vol.6 , pp.35-49, 1998
- [18] Seiichi Isomae , Stress distributions in silicon crystal substrates with thin films ,  
J.Appl.Phys. , Vol.52 , 1981
- [19] J.Vanhellemont and S.Amelinckx , Film-edge-induced dislocation generation in  
silicon substrates. I. Theoretical model , J.Appl.Phys. , Vol.61 , 1987
- [20] Wei Cai, Vasily V. Bulatov, Jinpeng Chang, Ju Li, and Sidneu Yip , Dislocation Core  
Effects on Mobility , Dislocations in solids, Chapter 64 , Vol.12, 2004
- [21] J.Rubier, M.F.Denanot, J.L.Demenet, P.Cordier , Plastic deformation by shuffle  
dislocation in silicon , Mat.Sci.and.Eng.A387 , pp.124-128 , 2004
- [22] A.Moulin, M.Condat, and L.P.Kubin , Simulation of Frank-Read sources in silicon ,  
Acta mater. , Vol.45, No.6, pp.2339-2348, 1997
- [23] K.W.Schwarz , Dislocation dynamics near film edges and corner in silicon  
J.Appl.Phys. , Vol.85 , No.10 , 1999
- [24] K.W.Schwarz , Simulation of dislocation on the mesoscopic scale. I. method and  
examples. J.Appl.Phys. , Vol.85 , No.1 , pp.108-119, 1999
- [25] A.George and G.Champier , On the cross-slip of isolated dislocations at the surface  
of silicon crystals. Scripta Metallurgica, vol.14, pp.399-403 , 1980
- [26] H.M.Zbib, M.Rhee, J.P.Hirth, On plastic deformation and the dynamics of 3d  
dislocations. Int.J.Sci. , Vol.40, No.2-3, pp.113-127 , 1998
- [27] H.M.Zbib, M.Rhee, 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
- [28] M.O.Peach and J.S.Koehler, The force exerted on dislocations and the stress fields  
produced by them. Phys.Rev.B. Vol 80, pp.436-439. 1950
- [29] L.M.Brown , Phil.Mag. , Vol.15, p.363, 1967
- [30] 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
- [31] D.Maroudas and R.A.Brown , Model for dislocation locking by oxygen gettering in  
silicon crystal. Appl.Phys.Lett. , Vol.58 , pp.1842-1844, 1991
- [33] 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
- [34] A.Moulin, M.Condat , Perfect and partial Frank-Read sources in Silicon: a  
simulation , Phil.Mag.A, Vol.79 , No.8 , pp.1995-2011

- [35] H. Gottschalk , Motion of Partial Dislocations, J. Phys., 40, C6, 127, 1979
- [36] Udo Schwalke, Progress in devices isolation technology, Microelectronics Reliability, 41, pp.483-490, (2001)
- [37] 黒田忠弘 , LSI 設計に必要なデバイス基礎知識 ,  
<http://www.kuroda.elec.keio.ac.jp/classes/EE-LSI-1/pdf/class2.pdf>
- [38] 斉藤直人,坂田信二,清水翼,磯前誠一,増田弘生 ,  
薄膜多層構造体応力解析プログラム SIMUS2D/F の開発 ,  
日本機械学会論文集(A 編),55,515,pp.1652-1656,1989
- [39] H.J.Moller,H.Ewaldt,and P.Haasen , Cross slip of single dissociated screw dislocations in silicon and germanium. Phys. stat. sol. (a) , Vol.55, pp.469-478 , 1979

## 謝辞

本研究を進めるにあたり，修士の二年間，ご指導いただいた酒井信介教授，泉聡志准教授には深く感謝いたします．助教の原先生は研究を進めるにあたりなくてはならない存在でした．ありがとうございました．

共同研究をさせていただいた東芝セミコンダクター社の方々には大学では得がたい貴重な実験結果，議論の場を提供していただき大変お世話になりました．特に，土屋氏にはお忙しいなかメールでも相談にのっていただき大変感謝しています．

久保寺くんは堅実な研究姿勢で M2 を引っ張って行ってくれました．武くんは厳しい指摘をしてくれました．川口君は気分転換に欠かせない存在でした．井藤くん(旧姓，前くん)は安心感とサプライズをくれました．この同期 4 人をはじめ，酒井・泉研究室の皆様には研究・生活面を含め，多くの場面でお世話になりました．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した．

以上

p.1~60 完

修士論文

平成 20 年 2 月 8 日提出

66211 杉本有正