

液体封止法で育成される単結晶の応力*

岩城 敏博*¹, 小泉 邦雄*¹
佐々木 基文*¹, 竹越 栄俊*¹

Stress in a Liquid-Encapsulated Czochralski-Grown Single Crystal

Toshihiro IWAKI, Kunio KOIZUMI,
Motofumi SASAKI and Eisyun TAKEGOSHI

The thermal stress during pulling and the residual stress after pulling in a single crystal grown by the liquid-encapsulated Czochralski (LEC) technique are analyzed by a new method which changes the numerical solution of temperature to a theoretical one through the use of the least squares method. The method is proven to be valid. The thermal effect of the liquid encapsulant on the maximum stress which the crystal undergoes during the growth process is investigated. It is found that the cross-sectional pattern of a total of twelve resolved shear stresses and the resolved shear stress direction pattern obtained from the maximum stress agree qualitatively with the dislocation density and array patterns.

Key Words: Thermal Stress, Residual Stress, Liquid-Encapsulated Czochralski Growth, Dislocation, Resolved Shear Stress

1. ま え が き

電子デバイスの特性や寿命を低下させる転位の一因は、単結晶の育成過程において生ずる応力であるといわれ、これに関する研究が多数行われている⁽¹⁾⁻⁽⁷⁾。特に新しい基板材料として注目されているIII-V族化合物半導体単結晶は著しく高転位密度であることが大きな課題となっている⁽⁸⁾。著者らは、単結晶表面はニュートン冷却の式が適用できる熱伝達によって冷却され、そして単結晶の長さは増加するというモデルを用いて応力を解析し、育成過程において生ずる応力はペクレ数よりもピオ数に支配されることを明らかにした⁽²⁾⁽⁴⁾。このことは育成過程における単結晶表面の熱移動をより正確に知ることの必要性を示している。

実際の育成炉では熱的状況は単純でなく、ニュートン冷却の式を用いて得られる応力で育成過程を十分に理解できるかは明らかでない。特にガリウムヒ素単結晶やインジウムリン単結晶のような化合物半導体の育成には、ヒ素やリンの飛散防止のために、融液表面に液体封止剤(Liquid encapsulant)を浮かせて育成しているが(図1)、この液体封止剤は単結晶やるつぼの

回転によって種々の熱的効果を持つため状況はさらに複雑になっている。育成過程で生ずる応力は単結晶の長さより単結晶内の温度分布に大きく依存すること、また単結晶外周部の固液界面近傍に育成中に生ずる熱応力が育成過程における最大応力であること⁽²⁾⁽⁴⁾を考慮すると、液体封止剤は最大応力に影響を与えるものと考えられる。

以上のことを背景として、本報では、単結晶をガリウムヒ素とし、ふく射および液体封止剤の熱的効果の応力に及ぼす影響を明らかにした。さらに分解せん断応力の和の分布および分解せん断応力方向パターン⁽⁹⁾を求め、転位に関する従来の測定結果と定性的な比較検討をした。まず、ふく射および液体封止剤の熱的効果を考慮した温度の数値解を求め、次にこの数値解を理論解析で得られる関数で表現し、この関数を応力解析にそのまま適用するという方法で応力を解析した。ここでは計算時間を考慮して、単結晶を半無限円柱形状とし、前報⁽²⁾のニュートン冷却の式を用いて得られる結果と比較した。

2. 解 析 方 法

本解析では図1に示す軸対称なモデルを用いて解析する。単結晶は一定速度で成長する等方性弾性体とし、

* 原稿受付 平成4年8月6日。

¹ 正員、富山大学工学部 (〒930 富山市五福3190)。

単結晶内の温度変化は準定常的であるとする。固液界面は平面であり、融点 T_m に保たれているとする。単結晶と不活性ガスおよび液体封止剤間では対流熱伝達により、また単結晶と融液、つば、炉壁間ではふく射による熱の移動があるとする。ただし液体封止剤はふく射に対して吸収、屈折などの影響を与えないとする。物性値の温度による変化はなく、液体より固体へ相変化した層には応力は生じないと仮定する。また数値計算のために固液界面より十分に離れた上方に端面を仮想する。

2.1 温度場 熱伝導方程式は次式になる。

$$\Delta T = \frac{v}{\chi} \frac{\partial T}{\partial z} \dots\dots\dots (1)$$

ここで

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \dots\dots\dots (2)$$

v : 育成速度, χ : 温度拡散率である。また温度に対する境界条件は次式のようになる。

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\lambda}{a} Bi_e (T - T_e) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{mfom} (T^4 - T_m^4) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{foc} (T^4 - T_c^4) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{afoa} (T^4 - T_a^4) \quad (r=a, L_e \geq z \geq 0) \dots\dots\dots (3)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\lambda}{a} Bi_g (T - T_g) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{mfom} (T^4 - T_m^4) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{foc} (T^4 - T_c^4) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{afoa} (T^4 - T_a^4) \quad (r=a, z > L_e) \dots\dots\dots (4)$$

$$T = T_m \quad (z=0) \dots\dots\dots (5)$$

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\lambda}{a} Bi_g (T - T_g) + \sigma \epsilon_o \epsilon_{afoa} (T^4 - T_a^4) \quad (z=L_o) \dots\dots\dots (6)$$

ここで λ : 熱伝導率, a : 単結晶の半径, Bi : ビオ数, σ : ステファン・ボルツマン定数, ϵ : ふく射率, f : 形

態係数であり、添字 a, c, e, g, m および o はそれぞれ炉壁、つば、液体封止剤、不活性ガス、融液、単結晶を示す。また T_e および T_g は中西らの実測結果⁽¹⁰⁾ をもとにして、次式のように z の一次関数で近似した。

$$T_e(z) = T_m - 400z \dots\dots\dots (7)$$

$$T_g(z) = T_m - 400L_e - \frac{T_m - 400L_e - T_a}{L_o - L_e} \times (z - L_e) \dots\dots\dots (8)$$

なお前報⁽²⁾ では、温度に対する境界条件を次式のようにした。

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial r} = \frac{\lambda}{a} Bi (T - T_a) \quad (r=a, z \geq 0) \dots\dots\dots (9)$$

ガリウムヒ素単結晶の融点近傍の物性値、育成装置・操作に関するパラメータは必ずしも十分に知られていないが、Jordan の文献(11) およびこれまで行われている実験^{(12)~(14)}、数値解析^{(15)~(17)} をもとに推定した。その結果を表1に示す。

式(1)~(6)を差分方程式に変換し、これらの方程式を逐次反復法で解いた。解の収束性を加速するために、式(1)に対する差分方程式に加速リーブマン法を用いた。

式(1)を満たす一つの理論解として前報の次式が考えられる。

$$T - T_a = \sum_{n=1}^{n_T} A_n J_0 \left(\alpha_n \frac{r}{a} \right) \exp \left(q_n \frac{z}{a} \right) \dots\dots\dots (10)$$

ここで

$$q_n = (Pe/2) - \{ \alpha_n^2 + (Pe/2)^2 \}^{1/2} \dots\dots\dots (11)$$

$Pe = av/\chi$: ペクレ数である。差分法によって求めた単

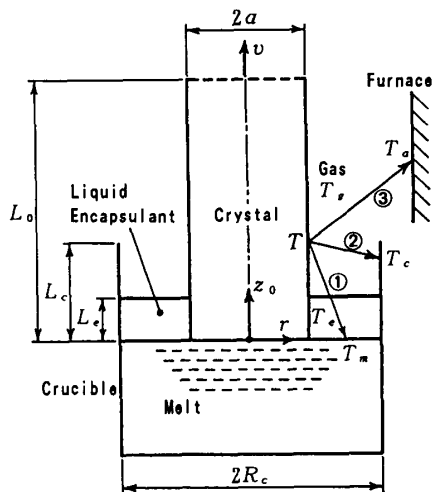


図1 液体封止法の概略図

表1 ガリウムヒ素の物性値と育成パラメータ

Melting point, T_m	1511K
Thermal conductivity, λ	$7.74 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$
Thermal diffusivity, κ	$3.54 \times 10^{-6} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$
Young's modulus, E	$1.2 \times 10^2 \text{ GPa}$
Poisson's ratio, ν	0.3
Thermal expansion coefficient, α	$1.0 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
Crystal radius, a	4cm
Hypothetical crystal length, L_o	20cm
Crucible radius, R_c	10cm
Exposed crucible wall height, L_c	4cm
Liquid-encapsulant height, L_e	1cm
Crucible temperature, T_c	1650K
Furnace wall temperature, T_a	500K
Biot number of ambient gas, Bi_g	0.018
Emissivity of crystal, ϵ_o	0.65
Emissivity of melt, ϵ_m	0.65
Emissivity of furnace wall, ϵ_a	1.00
Emissivity of crucible, ϵ_c	0.80
Growth rate, v	0.001cm/s

結晶内の温度分布を式(10)で近似表現できると仮定して、式(10)の係数 A_n および α_n を最小二乗法(SALS⁽¹⁸⁾)で決定する。一方、 n_r の値は任意である。前報との比較のために温度を次式で無次元表示することにする。

$$T^* = \frac{T - T_a}{T_m - T_a} \dots\dots\dots(12)$$

2・2 見かけのピオ数 式(10)より、 z が大きいとき、温度は次式で近似できる。

$$T - T_a = A_1 J_0\left(\alpha_1 \frac{r}{a}\right) \exp\left(\alpha_1 \frac{z}{a}\right) \dots\dots\dots(13)$$

(r, z_1) および (r, z_2) における温度をそれぞれ T_1 および T_2 とすると、 α_1 は式(13)より次式で与えられる。

$$\alpha_1 = \frac{a}{z_1 - z_2} \log_e \frac{T_2 - T_a}{T_1 - T_a} \dots\dots\dots(14)$$

式(11)より α_1 が求められ、さらに次式⁽²⁾

$$\alpha J_1(\alpha) - Bi J_0(\alpha) = 0 \dots\dots\dots(15)$$

より、ピオ数の近似値 Bi_a が次式で求められる。

$$Bi_a = \frac{\alpha_1 J_1(\alpha_1)}{J_0(\alpha_1)} \dots\dots\dots(16)$$

この近似値を見かけのピオ数と呼ぶことにする。

2・1節の最小二乗法の計算に必要な A_n および q_n の初期値は、この見かけのピオ数を用いて計算した。

2・3 応力場 ここで前報⁽²⁾の応力に関する理論解析結果の要点を述べる。応力 σ_{ij}^T を次式のように組立てる。

$$\sigma_{ij}^T(r, z) = \sigma_{0ij}(r, z) + \sigma_{Lij}(r, z) \quad (i, j = r, \theta, z) \dots\dots\dots(17)$$

$\sigma_{0ij}(r, z)$ および $\sigma_{Lij}(r, z)$ はそれぞれ熱弾性変位ポテンシャル ϕ_0 および Love の応力関数 ϕ_L より求められる。このとき、 ϕ_0 および ϕ_L はそれぞれ次式を満足しなければならない。

$$\Delta \phi_0 = T - T_a \dots\dots\dots(18)$$

$$\Delta \Delta \phi_L = 0 \dots\dots\dots(19)$$

また ϕ_L に含まれる未定定数は力学的境界条件を満たすように定める。このようにすると、育成過程における応力は次式で与えられる。

$$\sigma_{ij}(r, z) = \sigma_{ij}^T(r, z) - \sigma_{ij}^T(r, 0) \dots\dots\dots(20)$$

2・1節に示したように式(10)の係数が決定できれば、式(18)の右辺に式(10)を代入し、前報における ϕ_0 および Love の応力関数の一部分 ϕ_L の無限級数を有限個 n_r とすれば、前報の応力に関する理論解析結果をそのまま応用することができる。前報との比較のために応力を次式で無次元表示することにする。

$$\sigma_{ij}^* = \frac{1-\nu}{(T_m - T_a) \alpha E} \sigma_{ij}(r, z) \dots\dots\dots(21)$$

育成過程における応力は次式で表されるミーゼスの応力で考察する。

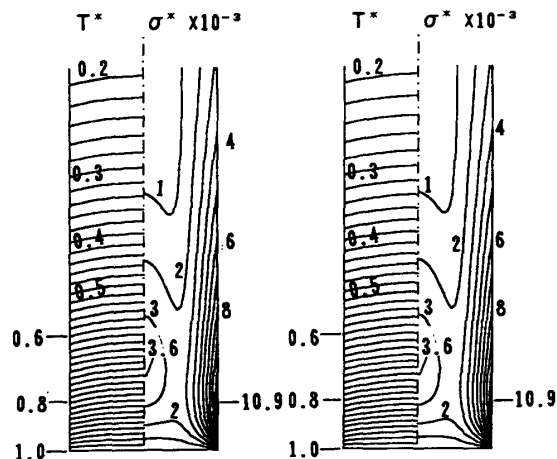
$$\sigma^* = \left[\frac{1}{2} \{ (\sigma_1^* - \sigma_2^*)^2 + (\sigma_2^* - \sigma_3^*)^2 + (\sigma_3^* - \sigma_1^*)^2 \} \right]^{1/2} \dots\dots\dots(22)$$

2・4 解析方法の妥当性 2・3節で述べた解析方法の妥当性を、ふく射の項を省き、 $T_e = T_g = T_a$ とし、 $Bi_g = Bi_e = 0.075$, $Pe = 0.065$ の例で検討した。図2(a)は本解析方法による結果であり、式(10)の n_r は前報の計算結果を参考にして20とした。このとき、単結晶の育成過程では固液界面近傍に最大熱応力が生ずること、さらに差分計算では上端面を仮想したことを考慮して、仮想した単結晶全長のうち下方部3/4長の領域における温度を最適に表現できるようにした。図2(b)は前報⁽²⁾による理論解析結果である。図2(a)と(b)はほとんど一致し、本解析方法の妥当性を示している。

3. 解析結果

ここでは、液体封止剤と単結晶間のピオ数 Bi_e を -0.8 , 0 および 0.8 として、液体封止剤の熱的效果およびふく射の影響を格討する。さらに、前報⁽²⁾のニュートン冷却の式を用いて得られる場合との相違を明らかにする。以下では液体封止法に関する結果を本モデルによる結果、前報から得られる結果を前報のモデルによる結果という。

3・1 温度および応力分布 差分法による温度分布の結果を図3に破線で示す。この温度分布を近似表現するように式(10)の係数を求めた。単結晶の下方部3/4長の領域において、式(10)による結果と差分法による結果の差の、温度の最大値 $T^*=1$ に対する最大相対誤差



(a) 本解析方法による結果 (b) 文献(2)による結果

図2 温度および応力分布

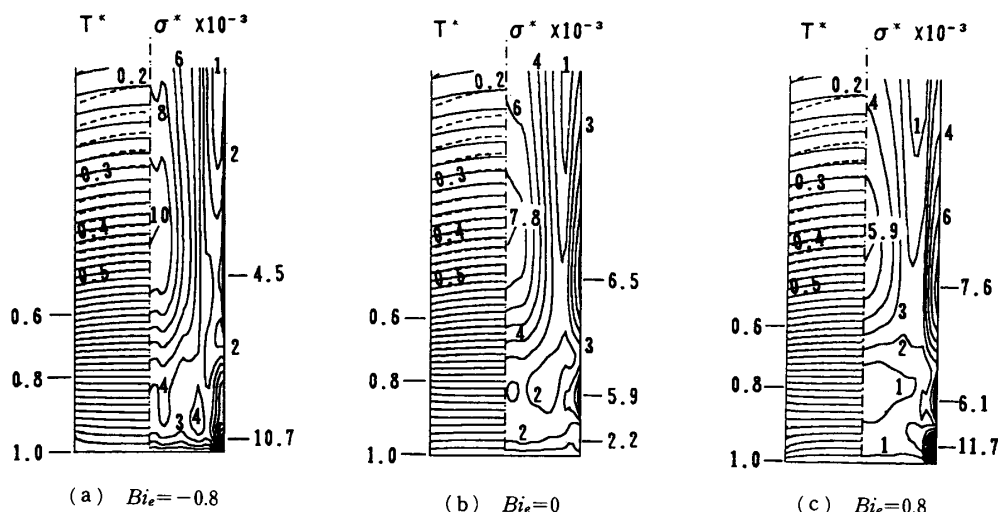


図3 温度および応力分布

$$E_m = \text{Max} \{ (T_{\text{式}(10)}^* - T_{\text{差分法}}^*) \div 1 \times 100 \} \quad [\%] \quad \dots\dots\dots (23)$$

を求めたところ、 $Bi_e = -0.8$ の場合 $n_r = 12$ のとき $E_m = 1.2\%$ となり、これは $n_r = 8 \sim 22$ のうちで最小値であった。同様に $Bi_e = 0$ および 0.8 のそれぞれに対し $n_r = 14$ および 12 のとき E_m は最小値であった。これらの結果を図3に実線で示す。いずれの場合も、単結晶の下方部 3/4 長における領域で、実線と破線はほとんど一致しており、式(10)にはふく射および液体封止剤の熱的効果の影響が含まれていると考えられる。したがって、式(10)をもとにして、育成過程における応力を求めると、この応力にはふく射および液体封止剤の熱的効果の影響が反映してくると考えられる。

Bi_e のいずれの値においても、見かけのピオ数は 0.075 となった。これは、液体封止剤の厚さが 1 cm と小さな値であるため、液体封止剤の熱的効果の単結晶全体の温度分布に及ぼす影響が比較的小さいことを示している。

温度分布について、 $Bi = 0.075$ としたときの前報のモデルの結果(図2、ペクレ数は図3と同一である)と比較すると、本モデルに関して次のことがいえる。

(1) 単結晶の下方部では、外周のごく近傍を除けば、軸方向および半径方向の温度こう配は小さい。(2) 単結晶の上方部では、軸方向の温度こう配は大きい、半径方向の温度こう配はほとんど同じである。(3) 液体封止剤上面近傍で等温線が局部的に湾曲し、 $Bi_e = -0.8$ および 0.8 の場合、 $Bi_e = 0$ に比べて湾曲が著しい。また $Bi_e = 0$ および 0.8 の場合、この湾曲は上に凸になっているのに対し、 $Bi_e = -0.8$ の場合は下に凸になっている。(1)および(2)はふく射および単結晶周

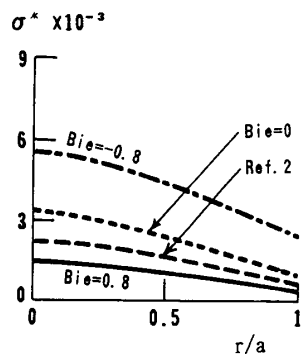


図4 残留応力分布

囲の温度(T_g および T_e)の軸方向変化によるものと考えられる。一方、(3)は液体封止剤の熱的効果によるものと考えられる。この局部的湾曲は Derby ら⁽¹⁵⁾⁽¹⁹⁾の数値解析結果にも示されている。

次に、式(10)をもとにした育成中の熱応力を図3の各図の右半分、育成後の残留応力($z = \infty$)を図4に示す。応力について比較検討すると、次のような特徴が認められる。

(1) 本モデルの場合も前報のモデルの場合も、ともに育成過程で生ずる最大応力は育成中の熱応力であり、その値は $Bi_e = 0$ の場合(前報のモデルの約 68%)を除いてほぼ同一である。すなわち、見かけのピオ数が前報のモデルにおけるピオ数と同一の値であれば、育成中の最大熱応力の値は両モデルとも同一のオーダーになることを示している。

(2) 育成中の熱応力に関して、本モデルの場合、極大値は外周部において三つあり、軸上においておおむね二つある。一方、前報のモデルの場合、外周部においても、軸上においても極大値は一つである。また本モデルの場合、 Bi_e の値によって軸上の最大熱応力は

外周の最大熱応力より大きくなることもあるが、前報のモデルの場合、常に外周の最大熱応力が大きい。育成後の残留応力については、中心の最大残留応力は Bi_e が小さいときほど大きな値になっている。ふく射および液体封止剤の熱的効果を考慮すると、育成過程において生ずる応力分布状態は、前報のモデルより著しく変化することを示している。

融液は $z/a=0$ の界面で単結晶となり、図3の熱応力を経て、 $z/a=\infty$ の断面に到達し、図4の応力が残る。したがって、単結晶が育成後も含めた育成過程で生ずる最大応力を知るには、図3および図4の中から r を一定として最大値を求めればよい。そのようにして得た結果を図5に示す。 $Bi_e=-0.8$ および 0 の場合、外周部と中心部にほぼ同程度の大きな応力が生じ、 $r/a=0.7$ 付近では応力は最小となっている。 $Bi_e=0.8$ および前報のモデルの場合、外周部に大きな応力が、中心部に中程度の応力が、外周部と中心部の中間部に最小の応力が生じている。すなわち、単結晶断面に生ずる最大応力の半径方向分布は Bi_e の値によって変化している。特に Bi_e の値が大きくなると、中心の応力は減少し、前報のモデルの値に近づく傾向にある。

単結晶内の応力が臨界応力（降伏応力より小さい）を越えると、転位は発生・増殖する。すなわち転位は単結晶の弾性範囲内でも発生・増殖し、その密度は応力に依存する⁽²⁰⁾⁽²¹⁾。このことから、図5の最大応力の分布より転位密度に関して次のような定性的な特徴があると考えることができる。(1) $Bi_e=0.8$ の場合、単結晶の横断面では外周部で高転位密度、中心部で中転位密度、中心部と外周部の中間部で低転位密度になり、直径方向にW形をした転位密度の分布形態になる。一方、不純物添加によって臨界応力を大きくしたときは、外周部のみに高転位密度がみられ、内部はほとん

ど低転位密度あるいは無転位となり、単結晶の横断面の直径方向にU形の転位密度の分布形態になる。(2) $Bi_e=-0.8$ および 0 の場合、外周部および中心部で高転位密度、中間部で低転位密度の分布形態になる。この定性的な特徴(1)は多数の研究者の実験結果^{(12)~(14)(22)~(24)}とも一致している。しかし、特徴(2)を示す実験結果⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾は少ない。

図5の半径方向の応力分布は Bi_e の値によって変化しているが、前報のモデルと比較して、その最大値は同一オーダーであり、また中間部で最小の応力となることは共通である。すなわち、見かけのピオ数と前報のピオ数が等しければ、前報のモデルの結果から液体封止法における転位分布の半径方向の特徴を推定することができる。

3.2 分解せん断応力の和の分布と分解せん断応力方向パターン分布

ウェハ面に観察される転位はある配列を示し、転位密度は方向性あるいは対称性を持ち、これらの配列、方向性、対称性は育成方向によって異なることを多数の実験結果は示している。これらの転位に関する特徴は分解せん断応力の和の分布および分解せん断応力方向パターンと定性的に一致することが明らかにされている⁽⁹⁾。ここでは文献(9)と同様の手法を用いて、育成過程における最大応力(図5)より分解せん断応力の和の分布および分解せん断応力方向パターンを求め、これらについて本モデルによる結果を前報のモデルによる結果と比較検討する。

ガリウムヒ素単結晶は面心立方格子で、図6のようにすべり系は正四面体で表され、分解せん断応力 τ_{mn}^* は次式で与えられる。

$$\tau_{mn}^* = \sum_i \sum_j a_{mi} a_{nj} \sigma_{ij}^* \dots\dots\dots (24)$$

ここで $m=1, 2, 3, 4$ はすべり面に垂直な方向を、 $n=1, 2, 3$ はすべり方向を示す。また a_{mi} は m 方向と i 方向の方向余弦で、単結晶の育成方向から決定される。

3.2.1 分解せん断応力の和の分布

ウェハ面の転位密度との関係を表すために、種々のパラメータが

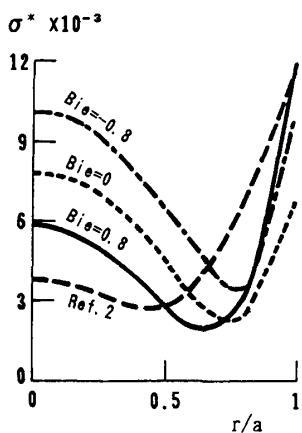


図5 育成過程における最大応力の分布

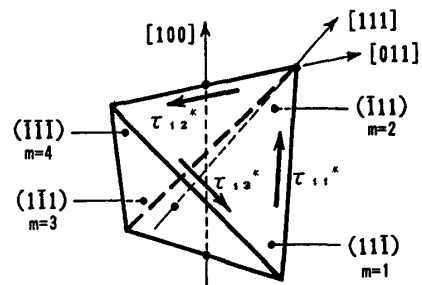


図6 面心立方格子の分解せん断応力

提案されているが⁽¹⁾⁽³⁾⁽⁵⁾⁽²⁷⁾, ここでは定性的な比較を目的としているので, 次式で示す 12 の分解せん断応力の和を用いる⁽²⁷⁾,

$$\tau^* = \sum_{m=1}^4 \sum_{n=1}^3 |\tau_{mn}^*| \dots\dots\dots (25)$$

図 7 および図 8 はおのおの [100] および [111] 育成方向単結晶の結果であり, 図 (a), (b), (c) および (d) はそれぞれ本モデルの $Bi_e = -0.8, 0, 0.8$ および前報のモデルの場合を示す。

例えば, 図 7 (c) に示す $Bi_e = 0.8$ の場合, τ^* の半径方向の分布は, いずれの結晶方位においても, 外周部で最大, 中心部で中程度の値となり, 中心部と外周部の中間部では最小となっている。これは図 5 に示した σ^* の半径方向の分布形態と同一である。一方, $Bi_e = 0$ および -0.8 の場合は, 中心部の τ^* は増大し, 外周部の [011] 縁より大きな値となっている。しかし外周部において τ^* を平均的にみれば, やはり図 5 に示した σ^* の半径方向の分布と同一である。すなわち, 本解析に用いたモデルの場合においても, 単結晶の半径方向における転位密度の分布形態を定性的に知るためには τ^* と σ^* のいずれを用いてもよいことを示している。このことは図 8 の [111] 育成方向単結晶の結果についてもいえる。このように τ^* と σ^* の半径方向の分布形態が同一であることから, τ^* より転位密度に関して 3・1 節と同様の特徴 (1), (2) を導くことができ

きる。

次にウェハ面内の τ^* の分布について考察する。図 7 のいずれの場合も τ^* の分布は 4 回対称を示し, 外周の [010] 縁の τ^* の値は [011] 縁の 1.6~1.9 倍となり, 方向性があることを示している。Blunt ら⁽²⁸⁾ はクロムをドーブしたガリウムひ素単結晶を [100] 方向に育成し, ウェハ面の転位密度を実測して, その等高線図を示している。この転位密度の等高線図は 4 回対称であり, また [010] 縁の転位密度は [011] 縁の約 1.5 倍となっていて, 図 7 (c) の等高線図とよい対応を示している。

図 8 に示す [111] 育成方向単結晶の場合, 外周部では [100] 育成方向単結晶のような著しい方向性は認められない。この傾向は Brice⁽²⁹⁾ がガリウムひ素単結晶から得た転位密度の測定結果と定性的に一致する。また図 8 のいずれの場合も τ^* の分布は外周部では 6 回対称を示し, [011] 縁の τ^* の値は [112] 縁より大きく方向性があることを示している。一方, 中心部ではおおむね 3 回対称を示している。

[100] 育成方向単結晶におけるいずれの場合も, τ^* の値は同一オーダーであり, τ^* の等高線図, 対称性および方向性も類似している。すなわち, 見かけのピオ数を知ることができれば, 前報のモデルの結果を用いて液体封止法における τ^* の結果を推定することができる。このことは [111] 育成方向単結晶についても同様

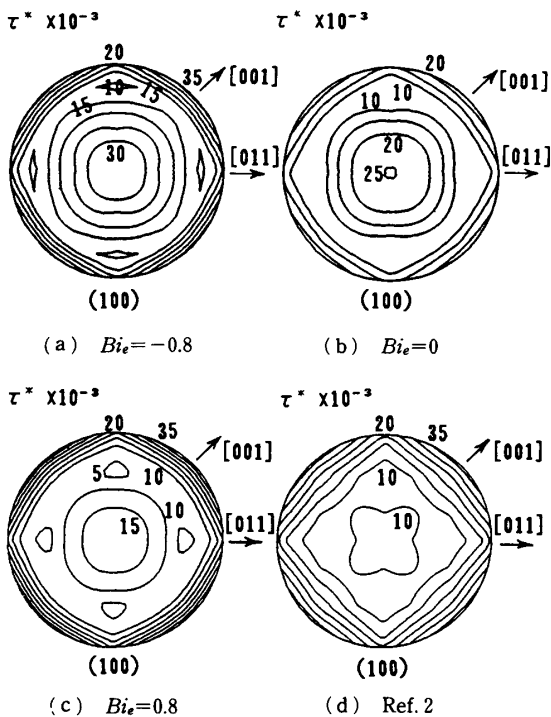


図 7 [100] 育成方向単結晶の τ^* の等高線図

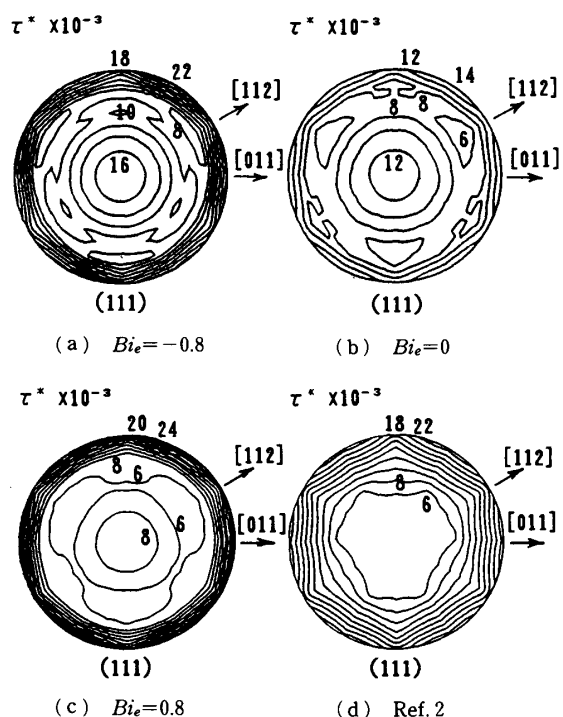


図 8 [111] 育成方向単結晶の τ^* の等高線図

である。

3・2・2 分解せん断応力方向パターン分布 図9および図10はおのおの[100]および[111]育成方向単結晶の結果であり、図(a), (b), (c)および(d)はそれぞれ本モデルの $Bi_e = -0.8, 0, 0.8$ および前報のモデルの場合を示す。直線はウェハ面とすべり面の交線を表し、太い直線と網掛けは式(26)~(28)で示す分解せん断応力が大きいことを定性的に表す⁽⁹⁾。すなわち、図6のすべり系において、[100]育成方向単結晶の場合、図9の[011]方向およびこれに垂直な方向の直線の太さはそれぞれ次式の値が大きいことを示し、

$$\tau_{s1}^* = \sum_{n=1}^3 (|\tau_{1n}^*| + |\tau_{3n}^*|) \dots\dots\dots (26)$$

$$\tau_{s2}^* = \sum_{n=1}^3 (|\tau_{2n}^*| + |\tau_{4n}^*|) \dots\dots\dots (27)$$

図10の[111]育成方向単結晶の場合、3方向の直線の太さは次式の値が大きいことを示す。

$$\tau_s^* = \sum_{n=1}^3 (|\tau_{mn}^*|) \quad (m=1, 2, 3) \dots\dots\dots (28)$$

図9および図10をそれぞれ図7および図8と比較すると、式(26)~(28)で示される分解せん断応力の大きさは、式(25)で示される分解せん断応力の和の大きさと定性的に一致する。ウェハ面における転位密度の分布形態を定性的に知るためには τ_s^* と τ^* のいずれを用いてもよいことを示している。

[100]育成方向単結晶の本モデルの場合、次の特徴を得ることができる。(1) 分解せん断応力方向パターン

は4回対称である。(2) 外周の[001]縁では[011]縁より直線が多く交差している。(3) 太い線あるいは細い線の内側の端を結んだ曲線(網掛けの内側)は八角形を形成し、その角は[011]と[001]方向にある。これらの分解せん断応力方向パターンの特徴は、ウェハ面にみられる(1) 転位配列パターンが4回対称で、転位配列の方向が[011]方向にあり⁽¹³⁾⁽³⁰⁾、(2) 外周の[001]縁では転位配列が交差し⁽¹³⁾⁽³¹⁾、(3) X線トポグラフ写真で得られる外周部の高転位密度の部分が八角形を形成し、その角は[011]と[001]方向にある⁽³⁰⁾⁽³²⁾ ことと類似している。

本モデルについて[111]育成方向単結晶の場合は次の特徴を得ることができる。(4) 二つの三角形を、一方を他方に対し60°回転して重ねたパターンであるが、両三角形のパターンは異なっている。すなわち6回対称より、むしろ3回対称である。(5) 外周の[011]縁では[112]縁より直線が多く交差している。分解せん断応力方向パターンの特徴(4)はウェハ面にみられる転位配列パターンが3回対称であり、転位配列の方向が[011]方向にある⁽³³⁾⁽³⁴⁾ ことと類似している。

以上より、単結晶のウェハ面における転位配列の特徴は、分解せん断応力方向パターンより知ることができると考えられる。また、このことはガリウムヒ素単結晶バルク中にみられる転位の主要原因は育成過程で生ずる分解せん断応力であることを示している。

前述した分解せん断応力方向パターンは図(d)と類

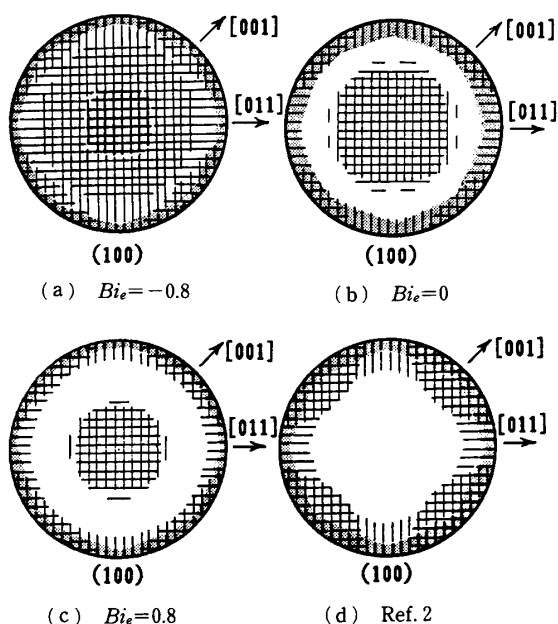


図9 [100]育成方向単結晶の分解せん断応力方向パターン

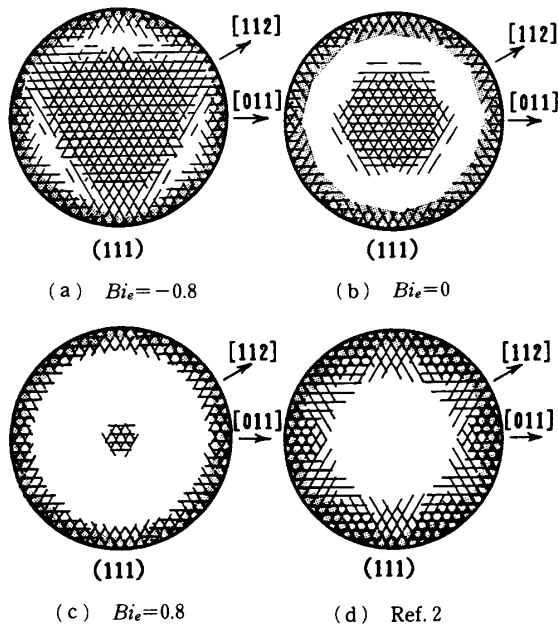


図10 [111]育成方向単結晶の分解せん断応力方向パターン

似している。すなわち、見かけのピオ数を知ることができれば、前報のモデルの結果を用いて液体封止法における分解せん断応力方向パターンの結果を推定することができる。

4. む す び

液体封止法で育成されるガリウムヒ素単結晶の温度、熱応力、残留応力、12の分解せん断応力の和および分解せん断応力方向パターンを理論的に求めた。本報ではふく射および液体封止剤の熱的効果の応力に及ぼす影響と、前報のニュートン冷却の式を用いた応力との相違を明らかにした。その結果、次のような結論が得られた。

(1) ふく射および液体封止剤の熱的効果を考慮して得た温度の数値解を理論解析で得られる関数で表現し、この関数を応力解析に適用するという解析方法を提案し、その有効性を示した。

(2) 液体封止剤のピオ数の絶対値が大きくなると、液体封止剤上面近傍で等温線が局所的に湾曲する。

(3) 育成過程で生ずる最大応力は育成中の熱応力である。

(4) 育成過程における最大応力および12の分解せん断応力の和に関して、それらの最大値は液体封止剤の熱的効果にかかわらず同一オーダーである。中心部におけるそれらの値は液体封止剤のピオ数が大きくなると小さくなる。

(5) 分解せん断応力の和の分布および分解せん断応力方向パターンは、それぞれ単結晶のウェハ面の転位密度および転位配列の特徴と一致する。

(6) 単結晶の半径方向における転位密度の分布形態を定性的に知るには、ミーゼスの応力と分解せん断応力の和のいずれを用いてもよい。

(7) 液体封止法における見かけのピオ数を知ることができれば、前報のニュートン冷却の式に基づく応力を用いて液体封止法の場合の最大応力、分解せん断応力の和および分解せん断応力方向パターンを推定することができる。

文 献

- (1) Jordan, A. S., ほか2名, *The Bell System Tech. J.*, **59-4** (1980), 593.
- (2) Iwaki, T. and Kobayashi, N., *Trans. ASME, J. Appl. Mech.*, **48-4** (1981), 866.
- (3) Duseaux, M., *J. Crystal Growth*, **61** (1983), 576.
- (4) Iwaki, T. and Kobayashi, N., *Int. J. Solids Struct.*, **22-3** (1986), 307.
- (5) Motakef, S. and Witt, A. F., *J. Crystal Growth*, **80** (1987), 37.
- (6) Lambropoulos, J. C., 文献(5)の245ページ.
- (7) 宮崎・ほか4名, *機論*, **57-536**, A(1991), 858.
- (8) 宮澤, *応用物理*, **52-3**(1983), 227.
- (9) 岩城・ほか2名, *機論*, **58-549**, A(1992), 731.
- (10) 中西・ほか2名, *応用電子物性分科会研究報告*, (1984), 19, 応用物理学会.
- (11) Jordan, A. S., *J. Crystal Growth*, **49** (1980), 631.
- (12) Chen, R. T. and Holmes, D. E., 文献(3)の111ページ.
- (13) Elliot, A. G., ほか5名, *J. Crystal Growth*, **70** (1984), 169.
- (14) Shimada, T., ほか3名, *Japanese J. Appl. Phys.*, **23-1** (1984), L23.
- (15) Derby, J. J., ほか4名, *J. Electrochem. Soc.*, **132-2** (1985), 470.
- (16) Schvezov, C. E., ほか2名, *J. Crystal Growth*, **92** (1988), 489.
- (17) Sabhapathy, P. and Salcudean, M. E., *J. Crystal Growth*, **97** (1989), 125.
- (18) 中川, 小柳, 最小二乗法による実験データ解析, (1983), 1, 東京大学出版会.
- (19) Derby, J. J. and Brown, R. A., *J. Crystal Growth*, **74** (1986), 605.
- (20) Mil'vidskii, M. G. and Bochkarev, E. P., *J. Crystal Growth*, **44** (1978), 61.
- (21) Mil'vidskii, M. G., ほか2名, *J. Crystal Growth*, **52** (1981), 396.
- (22) Barrett, D. L., ほか4名, 文献(13)の179ページ.
- (23) McGuigan, S., ほか5名, *J. Crystal Growth*, **76** (1986), 217.
- (24) Okada, H., ほか3名, *J. Crystal Growth*, **75** (1986), 319.
- (25) Iwasaki, K., ほか2名, *J. Crystal Growth*, **103** (1990), 257.
- (26) Fornari, R., ほか3名, *J. Crystal Growth*, **84** (1987), 266.
- (27) Iwaki, T. and Kobayashi, N., *J. Crystal Growth*, **82** (1987), 335.
- (28) Blunt, R. T., ほか2名, *IEEE Trans. MTT*, **30** (1982), 943.
- (29) Brice, J. C., *J. Crystal Growth*, **7** (1970), 9.
- (30) 松井・ほか3名, *日本結晶成長学会誌*, **13-2/3**(1986), 39.
- (31) Ono, H., *J. Crystal Growth*, **89** (1988), 209.
- (32) Jacob, G., ほか6名, *J. Crystal Growth*, **57** (1982), 245.
- (33) Fornari, R., ほか3名, *J. Crystal Growth*, **63** (1983), 415.
- (34) Jordan, A. S., ほか2名, 文献(13)の555ページ.