

固液界面近傍の熱応力が育成中Si単結晶の臨界 v/G 値に与える影響Effect of thermal stress on critical v/G value in growing single crystal Si

岡山県立大学 情報工学部 ○末岡 浩治, 神山栄治

Okayama Pref. Univ., Dep. Communication Eng., K. Sueoka, E. Kamiyama

E-mail: sueoka@c.oka-pu.ac.jp

【研究背景】ごく最近, Nakamura *et al.*は育成中Si単結晶内で生じている数MPa~20MPaの熱圧縮応力がVoronkovの臨界 v/G 値 (v : 結晶育成速度, G : 結晶軸方向温度勾配) を低下させ, 無欠陥Si結晶がV優勢に傾くことを実験により示した[1]. この結果は, 等方性応力を仮定した理論計算により定性的に予測されていた[2]が, 現実の結晶育成におけるSi結晶中心付近では, 固液界面の熱応力成分は平面圧縮応力に近いと推測されている[3]. 以上の背景から, 本研究では平面応力が点欠陥の形成エンタルピーに与える影響について第一原理計算を行い, 実験値と比較した.

【計算方法】完全結晶Siと点欠陥(原子空孔Vあるいは格子間Si原子I)を含む216原子の計算セルを用意した. x , y 方向のセル長を等しく維持し($L_x = L_y$), $L_x = L_y$ を変化させながら z 方向のセル長をフリーにして構造最適化を行い, セルの全エネルギー E_{tot} , 体積 V と平面応力 $\sigma_x = \sigma_y$ を求めた. なお, 第一原理計算法を用い, 計算セルには3次元周期境界条件を課している. さらに, これらの結果を用い, 点欠陥の形成エンタルピーと臨界 v/G 値の平面応力依存性を得た.

【結果と考察】 xy 面内の平面応力下において, さらにVが形成すると, x , y 方向のセル体積は減少し, z 方向のセル体積は増加した. 図1にV形成に伴う x , y 方向のセル体積減少量 $\Delta V_x^V + \Delta V_y^V$ と z 方向のセル体積増加量 ΔV_z^V の平面応力依存性(平均応力に換算)を示す. 平面圧縮応力 $\sigma_x = \sigma_y$ は x , y 方向のセル体積減少量 $\Delta V_x^V + \Delta V_y^V$ に作用し, Vの形成エンタルピーを低下させる. 一方, z 方向の応力は0であるため, z 方向のセル体積増加量 ΔV_z^V はVの形成エンタルピーに影響しない. 図2に平面応力と等方性応力による計算値をNakamura *et al.*の実験結果と比較した結果を示す. これより平面圧縮応力の方が等方性圧縮応力よりも臨界 v/G 値に与える影響が大きいことがわかる. また, 臨界 v/G の実験値は平面圧縮応力と等方性圧縮応力による計算値の間に分布した.

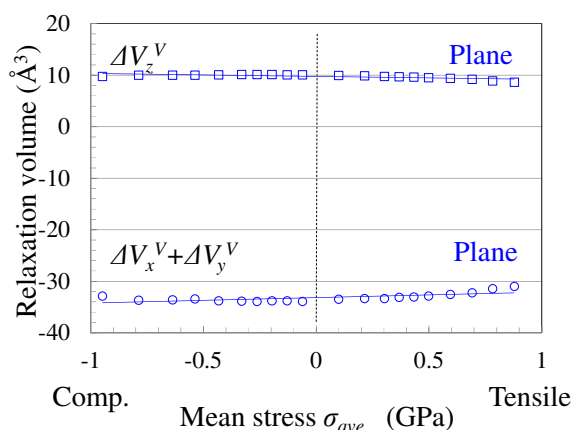
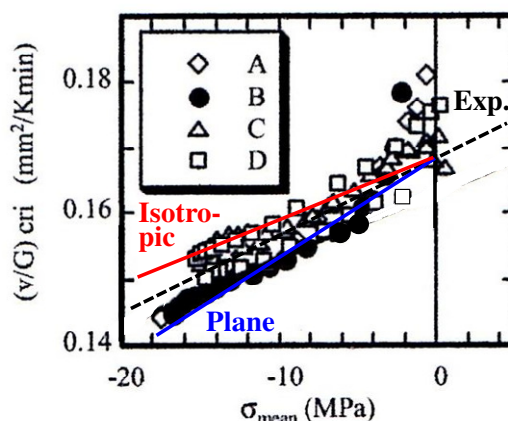


図1 V形成に伴う緩和体積の平面応力依存性

図2 臨界 v/G 値の計算と実験の比較
(シンボルはNakamura *et al.*の実験値)

参考文献

1. K. Nakamura, R. Suewaka and B. Ko, *ECS Solid State Letters*, **3** (2014) N5-N7.
2. K. Sueoka, E. Kamiyama and H. Kariyazaki, *J. Appl. Phys.*, **111** (2012) 093529.
3. K. Nakamura, Private communication.