

単結晶育成過程の熱応力解析システム

九州大学工学研究科 宮崎 則幸

1. 緒言

各種半導体、酸化物等の機能性単結晶材料は電子/光デバイス用材料として重要であり、マクロな割れが無く、無転位あるいは低転位な高品位バルク単結晶が求められている。このような単結晶の品質にはその育成過程での熱応力が影響を及ぼしていることが知られている。高品位バルク単結晶の育成は技術者の経験と勘による試行錯誤により行われてきた。しかし、このような方法は時間とコストの点で無駄が多い。このような現状を背景に単結晶育成過程の総合的なシミュレーション技術を確立し、これと可視化技術を組み合わせて、ユーザーがあたかも実験室で単結晶育成を行っているような感覚をもてるような仮想実験室システムを開発することを目指す。本システムの全体構成を図1に示す。本助成により、このようなシステムのサブシステムとして、各種機能性単結晶として想定しうる各種結晶系について結晶異方性を厳密に考慮した単結晶育成過程の熱応力解析サブシステム、およびマクロな割れ評価サブシステムを有限要素法をベースとして構築するとともにこれらに関連したサブシステムを新たに開発した。

2. 開発内容

単結晶育成過程の熱応力解析サブシステム、およびマクロな割れ評価サブシステムのソルバーとしては九州大学工学研究科・宮崎研究室で開発された有限要素法解析コードCRYSTALを用いている。この解析コードは、結晶異方性すなわち弾性係数および線膨張係数に関する異方性を厳密に考慮し、これらにテンソル変換の手法を適用することにより任意の単結晶育成方向について熱応力解析を行い熱応力成分を求めることができる。さらに、この熱応力解析結果から単結晶の割れ評価応力として最大主応力、ミーゼス応力、結晶のへき界面に作用する応力を求めることができる。現在のところ適用できる結晶系は立方晶(cubic)、三方晶(trigonal)、単斜晶(monoclinic)、正方晶(tetragonal)、斜方晶(orthorhombic)の解析が可能である。その他の結晶系、すなわち三斜晶

(triclinic)、六方晶(hexagonal)についても今後追加する予定である。プリ・ポストプロセッサとしてPATRANを用い要素分割等インプットデータの作成および結果の可視化を行うことができる。また、単結晶体の熱応力解析に用いる温度分布の計算はPATRAN上でインプットデータを作成し汎用有限要素法解析コードMARC、NASTRANあるいは手持ちの適当な解析コードを用いて伝熱解析を行い、その結果をCRYSTALに引き渡して熱応力解析を行う。

熱応力解析においては伝熱解析で用いたのと同じ有限要素メッシュを用いることもできるし、違うものを用いることもできる。後者の場合の解析の流れを図2に示す。

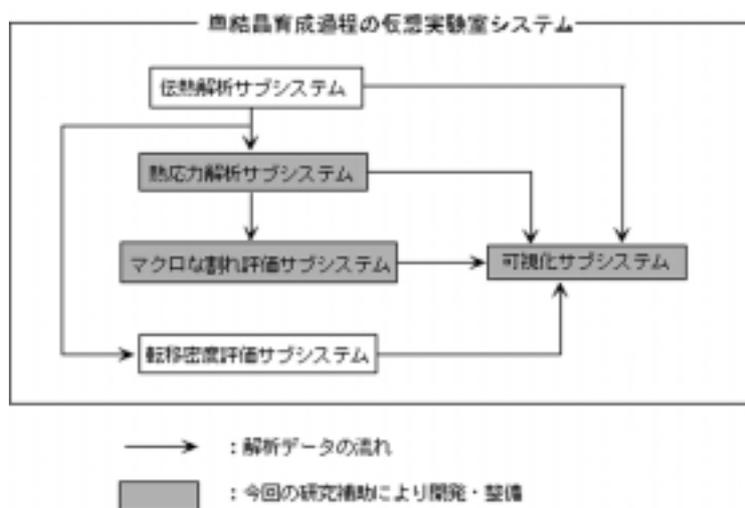


図1 研究の全体構成図

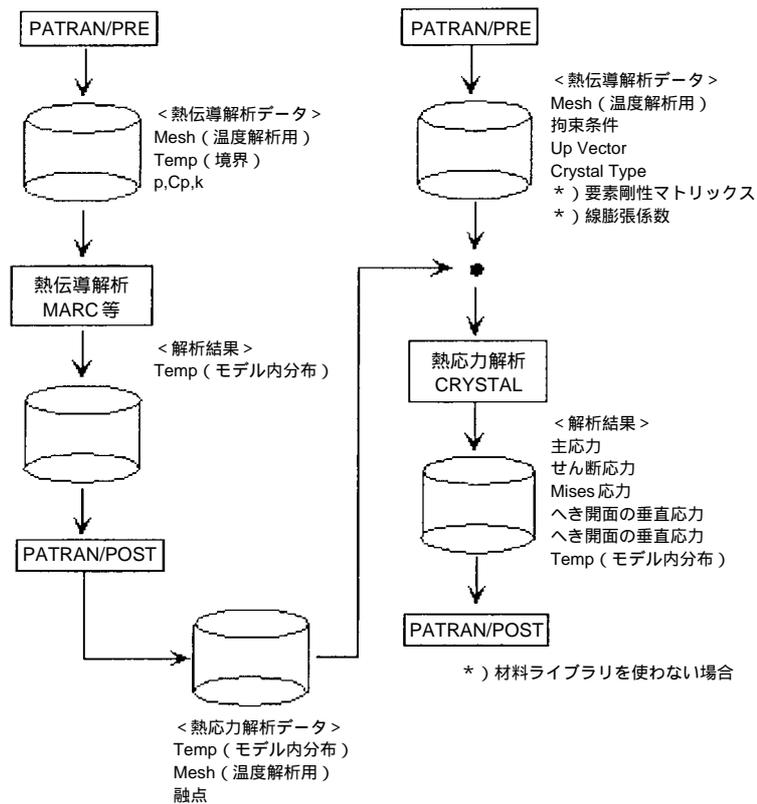
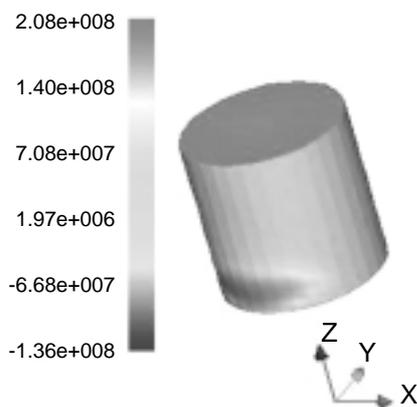
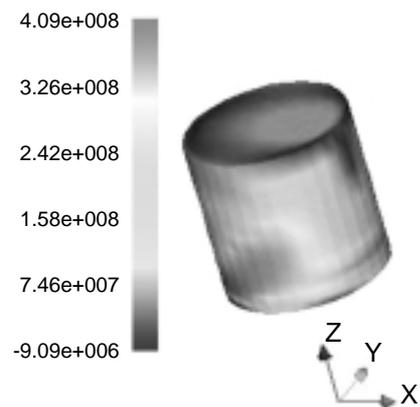


図2 解析の流れ図

3. 解析例 (PbMoO₄単結晶、a軸引き上げ)

図3 主応力 1[dyn/cm²]図4 Mises 応力[dyn/cm²] 10⁷dyn/cm²=1MPa

関連発表論文等

1. 宮崎則幸、他3名：日本機械学会論文集(A編) 58巻554号 (1992), pp.1942-1946.
2. 宮崎則幸、他4名：日本機械学会論文集(A編) 59巻567号 (1993), pp.2764 -2769.
3. 宮崎則幸、他4名：日本機械学会論文集(A編) 63巻612号 (1997), pp.1744-1749.
4. 宮崎則幸、白鳥正樹・編：計算力学 [ヲ] 電子デバイス/機器設計における計算力学の適用・第3章「単結晶の熱応力シミュレーション」(1999) 養賢堂.

これは平成12年3月9日に開催した
計算科学技術活用型特定研究開発推進事業
研究報告会（主催 科学技術振興事業団）
の予稿集から抜粋したものです。