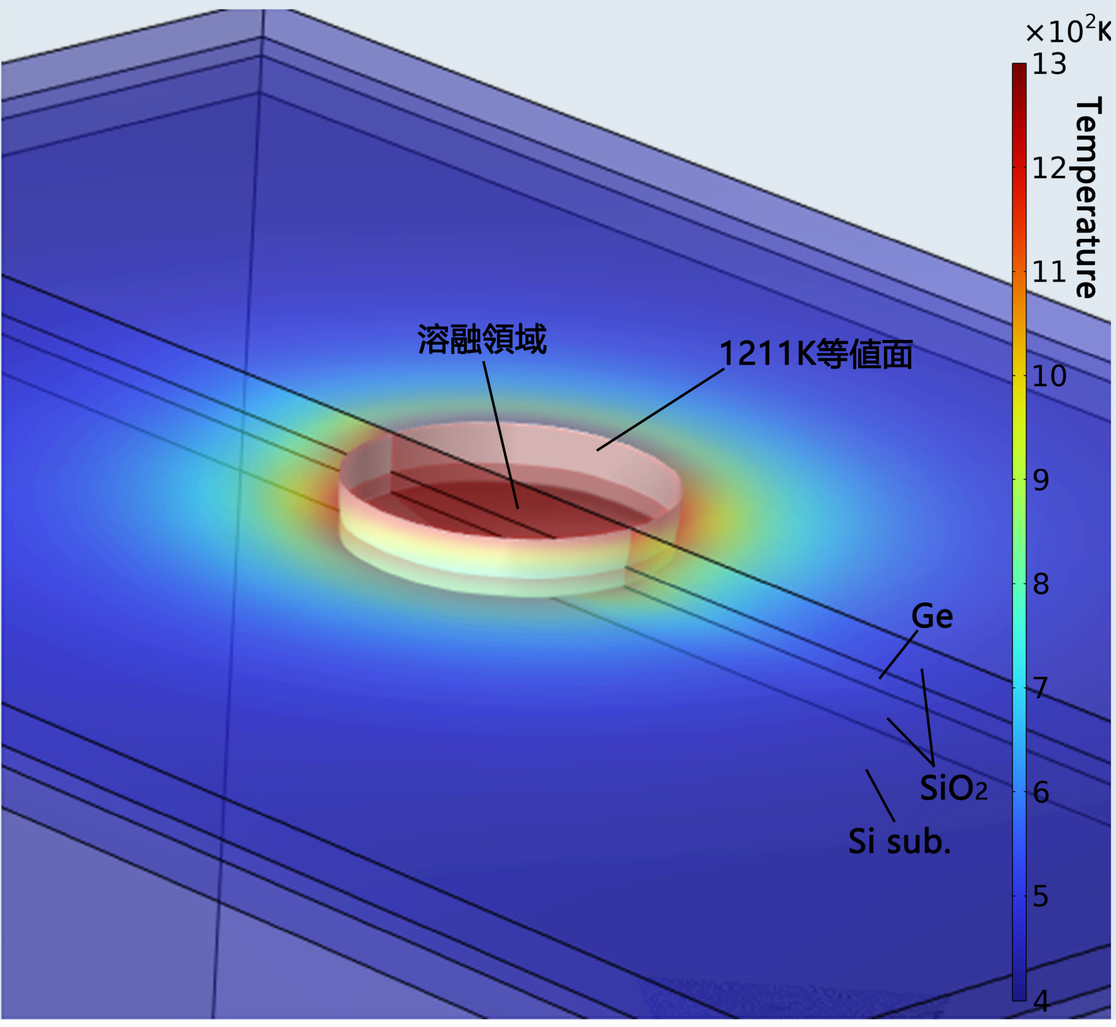


SiO_2封止Ge薄膜のレーザー誘起液相結晶化における熱・応力連成解析

Geは引張ひずみを導入するとバンド構造が変化し，発光に適した直接遷移型に近づく．その実現に向け，LLPC過程の温度と熱応力をCOMSOL®で連成解析し，引張応力の発生機構を評価する．

Yilong Zhang[1], Zitai Xian[1], 志村 考功[1]
早稲田大学大学院情報生産システム研究科，〒808-0135 福岡県北九州市．

背景および目的

AIやクラウドの普及に伴い，データセンターの消費電力が急増しており，情報を光で運ぶ光通信デバイスの省エネルギー化が求められている．その鍵はSiチップ上に集積できる光源であり，Siと親和性の高いゲルマニウム（Ge）が注目されている．しかしGeは間接遷移型半導体であり，そのままでは発光効率が低い．

Geに引張ひずみを導入するとバンド構造が変化し，発光に有利な直接遷移型に近づくことが知られている．レーザー誘起液相結晶化（LLPC）は，レーザー走査によりGe薄膜を局所的に溶融・再結晶させ，高品質な結晶を得る手法である [1-3]．さらに薄膜をSiO_2で封止した構造では，凝固後の熱収縮が拘束されることで引張ひずみが導入される．本研究では，この過程で生じる温度と応力をシミュレーションにより解析する．

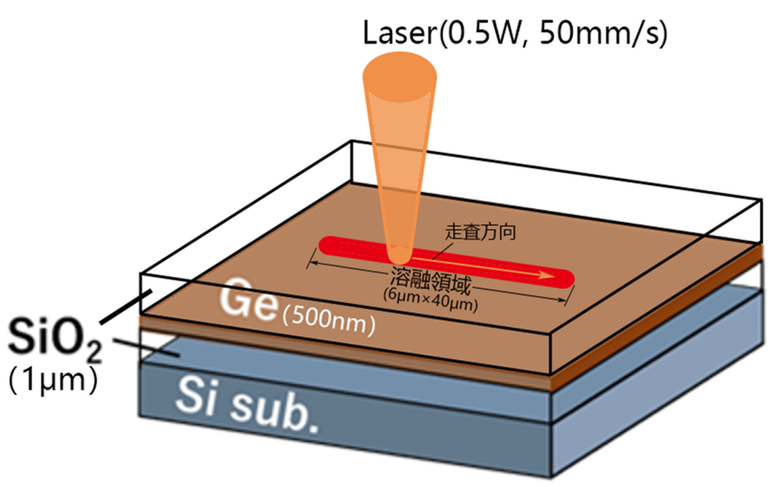


図1. LLPCの概念図．Si/SiO_2/Ge/SiO_2の四層構造に対しレーザーを走査し，Ge層を局所的に溶融させる．

解析内容

解析対象は，Si基板（30 μm）/ SiO_2（1 μm）/ Ge（500 nm）/ SiO_2キャップ（1 μm）の四層構造である．x = 0 を対称面とする半モデル（平面寸法20×60 μm，厚さ約32.5 μm）を用い，初期温度は400 Kとした．SiO_2はレーザーに対して透明であるため，レーザーはキャップ層を透過してGe層で吸収されるものとし，Ge層内の体積熱源として与えた．レーザーは径6 μm・出力0.5 W，走査速度50 mm/sである．

COMSOLの伝熱モジュールにより，融点1211 K・潜熱509 kJ/kgの相変化を含む温度場を解析し，MEMSモジュールで熱応力を連成した．溶融したGeは凝固した時点では応力をもたないと仮定したため，溶融した領域についてのみ，凝固後の冷却に伴うひずみを解析した．熱的には底面を400 Kに固定，側面を断熱とし，力学的には底面を固定拘束とした．

結果と結論

レーザー直下のGe層は融点1211 Kを超え，厚さ方向に完全に溶融した．ビーム通過後は熱が基板側へ拡散し，溶融領域は速やかに凝固する．

凝固後の冷却では，Geの熱収縮が上下のSiO_2とSi基板に拘束されるため，収縮しきれない分が弾性ひずみとして残る．冷却完了後のGe層には，走査経路に沿って最大約646 MPaの引張応力が生じ，これは約0.479%の引張ひずみに相当する（図2）．このとき構造全体の変位は最大でも数nm程度であり，巨視的な変形はほとんど生じない．

以上より，SiO_2封止構造におけるLLPCでは，溶融・凝固に伴い再結晶領域に引張ひずみが導入されることを，熱・応力連成計算により定量的に示した．

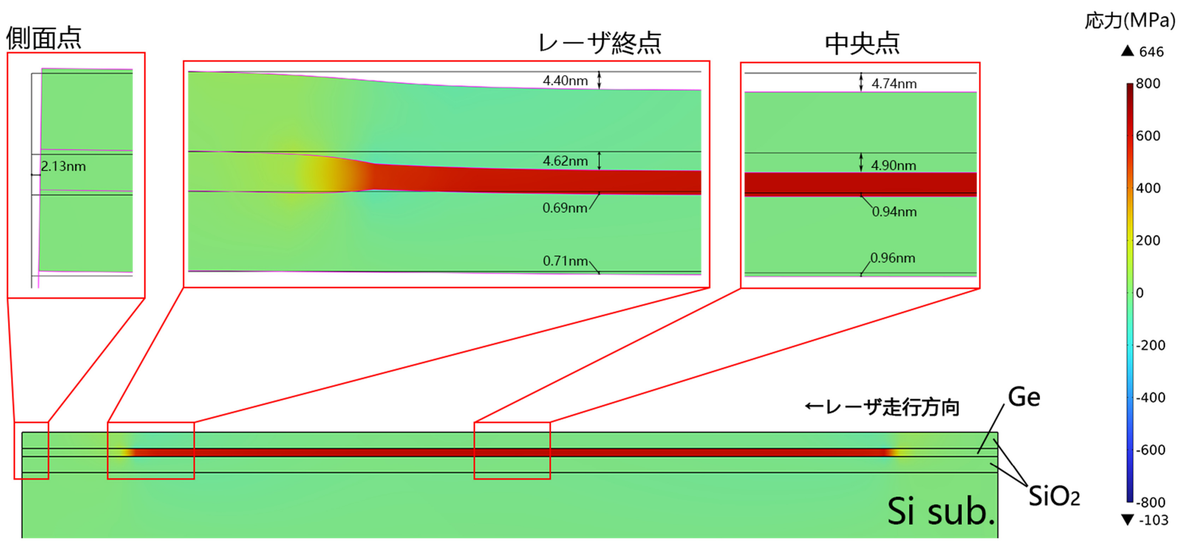


図2. 400 Kまで冷却した後のGe層内の応力分布（走査方向成分）．変形は50倍に拡大して表示しており，図中の数値は実際の変位量である．正の値が引張を示す．

参考文献

T. Shimura et al., "Enhancement of photoluminescence from n-type tensile-strained GeSn wires on an insulator fabricated by lateral liquid-phase epitaxy", Appl. Phys. Lett., 107, 221109, 2015.

2. T. Shimura et al., "Controllability of luminescence wavelength from GeSn wires fabricated by laser-induced local liquid phase crystallization on quartz substrates", Jpn. J. Appl. Phys., 62, SC1083, 2023.

3. T. Li et al., "Optical mode competition in tensile-strained Ge microdisks fabricated by laser-induced liquid-phase crystallization", Jpn. J. Appl. Phys., 65, 02SP12, 2026.

The Proceedings of the COMSOL Conference 2026 Tokyo より抜粋