

単結晶 Si の直接通電加熱による低温変形とその分子動力学計算

Low temperature deformation of single crystal Si by direct electric heating and molecular dynamics calculation

徳弘 快¹、阪本 大樹¹、清水 雅弘¹、下間 靖彦¹、三浦 清貴¹、八戸 啓²

(1.京大院工、2.株式会社プラウド)

Kai Tokuhiro¹, Taiki Sakamoto¹, Masahiro Shimizu¹, Yasuhiko Shimotsuma¹, Kiyotaka Miura¹,

Satoru Hachinohe² (1. Kyoto Univ., 2. Proud Inc.)

E-mail: k.tokuhiro@func.mc.kyoto-u.ac.jp

【緒言】

単結晶 Si は脆性破壊を起こす材料として知られているが、近年、融点付近で加圧する、いわゆるホットプレス法 (温度 1200℃、保持時間 120 min) でプレス成型できることが報告された[1]。一方、我々は単結晶 CZ-Si を直接通電加熱法により加圧・加熱処理することで、融点よりも約 600℃低い 850℃、保持時間 10 min で塑性変形させることに成功した[2]。本研究では、単結晶 Si の変形を分子動力学計算で再現するため、まず電流は流さない状態で一軸圧縮を行った。また、幅 2 μm 程度の微細パターンを FIB 装置により描画したモールドを作製し、直接通電加熱法により単結晶 Si 表面にパターンが転写できることを確認した。

【実験および計算方法】

単結晶 Si (直径 6 mm 厚さ 4 mm) を直接通電加熱法により温度 1100℃、圧力 4.0 kN、保持時間 30 min で塑性変形させた。一軸圧縮を受ける結晶面は (100) (110) (111) である。分子動力学計算には LAMMPS パッケージを用いた。粒子数は 93312 粒子、一軸圧縮を受ける結晶面は (100) (110) (111)、使用したポテンシャルは Stillinger-Weber ポテンシャル[3]である。初期配置を完全結晶とし、1100℃で 10 ps 保持することで構造を平衡化した後、25 ps かけて 3.25 MPa で一軸圧縮を行った。さらに、FIB 装置でモールド (グラファイト) に幅 2 μm 程度の微細パターンを描き、直接通電加熱法 (温度 950℃、圧力 2.0 kN、保持時間 15 min) により Si 表面への転写を行った。転写後の Si 表面の観察は光学顕微鏡で行った。

【結果と考察】

Fig.1 は、直接通電加熱法による一軸圧縮後の Si の形状である。また、Fig.2 は、分子動力学計算による一軸圧縮後の Si を z 軸から俯瞰した形状である。緑色の部分は結晶、灰色の部分は結晶の周期性が乱れた領域である。構造が乱れている領域ではより大きい変形が確認でき、周囲の結晶を外に押し出すような挙動を示す。この挙動は実験結果 (Fig.1) を比

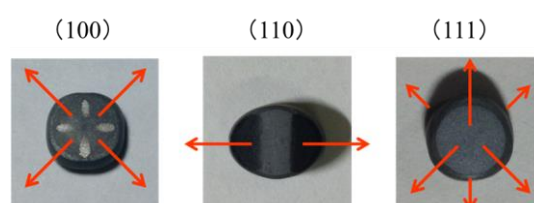


Fig.1 Shape of silicon after uniaxial compression by direct electric heating

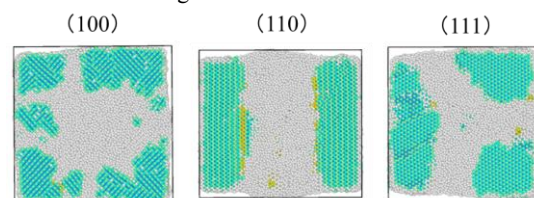


Fig.2 Shape of silicon after uniaxial compression by molecular dynamics simulation

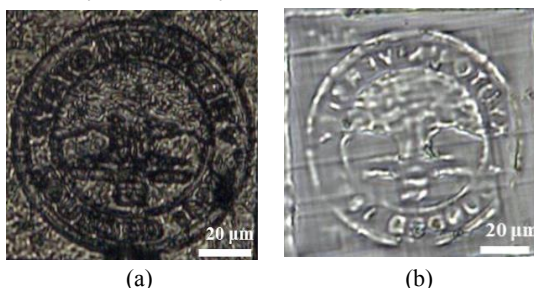


Fig.3 (a) graphite surface fabricated by FIB
(b) silicon surface after transfer process

較的良好に再現しており、結晶方位に依存する Si 結晶が押し出される方向も一致していることが確認できる。また、Fig.3 は、FIB 装置により微細パターンを描いたモールド表面(a)、と直接通電加熱処理によりモールドから転写された Si 表面(b)の光学顕微鏡像である。特に文字部分は幅 2.0 μm 程度の変形が起こっており、この結果は、通電加熱成型により高密度の転位が生成されていることを示唆する。

【参考文献】

- [1] K.Morishita et al., *Applied Physics Express* 4 (2011) 106501
- [2] K.Miura et al., *Material and Technology* 9, (2017) 51(3)493
- [3] F.H.Stillinger, T.A.Weber et al., *Physical Review B* 31 (1985) 5262-5271