

## 科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成25年 6月24日現在

機関番号：12401  
 研究種目：基盤研究（C）  
 研究期間：2010～2012  
 課題番号：22560103  
 研究課題名（和文） 超平滑化におけるメカノケミカル反応の第1原理電子状態解析と加工技術開発への適応  
 研究課題名（英文） The first principle electronic states calculation of an mechanochemical reaction for ultra-smoothing and applying to a development of processing technique  
 研究代表者 澁谷 秀雄（SHIBUTANI HIDEO）  
 埼玉大学・大学院理工学研究科・助教  
 研究者番号：80303709

## 研究成果の概要（和文）：

第一原理計算を用いた砥粒-加工物接触点近部の電子状態解析を行った。一般的に表面に付着した水酸基が加工の進展に寄与しているとされるシリカ粒子の場合、シリカ粒子を単結晶シリコン表面に接近させていっても単結晶シリコン内部の電子状態に大きな変化は見られなかった。一方、固相反応を生じるを考えられている酸化バリウムの場合、単結晶シリコンの最表面と2層目のSi原子間で電子密度の減少がみられた。

## 研究成果の概要（英文）：

In this study, the electronic state of an abrasive-work interface neighborhood was calculated by a first principles calculation. In these results, in case of Silica abrasives which the surface hydroxyl contribute the removal action of the Si wafer in a polish, the internal electronic states of the Si wafer were almost same when Silica abrasives were approaching to Si wafer surface. But, Barium oxide abrasives which act as the solid phase reaction in a polish, internal electronic states of the Si wafer, especially the first and second layer of Si wafer.

## 交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2010年度	1,600,000	480,000	2,080,000
2011年度	600,000	180,000	780,000
2012年度	600,000	180,000	780,000
年度			
年度			
総計	2,800,000	840,000	3,640,000

## 研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・生産工学・加工学

キーワード：超平滑化，メカノケミカル反応，第1原理計算，電子状態，研磨

## 1. 研究開始当初の背景

近年、半導体デバイス開発の分野において、ワイドギャップ半導体の一種であるシリコンカーバイド（SiC）基板の開発が盛んに行

われている。従来のシリコン（Si）半導体と比べて、SiCはバンドギャップが3倍・絶縁破壊にいたる電界強度が10倍程度と非常に

優れたデバイス特性を有している。さらに、熱伝導性、耐熱性・化学的安定性・機械的特性・放射線に対する耐性も優れている。このため、小型・低消費電力・高効率パワー素子、高周波素子、耐放射線に優れた素子への適応など、電力・輸送・家電といった民生分野から宇宙・原子力といった極限環境下用途まで幅広い分野での利用が期待されている。

一方、加工の観点から SiC をみると、優れた物理的・化学的特性を有するために非常に加工困難な材料である。このため、デバイス作製に必要な不可欠な平滑化加工には、非常に高い加工技術と膨大な時間を要しており、これが高コスト・普及を妨げる原因の一つとなっている。

今後、デバイス開発においては、デバイス特性には非常に優れる反面、加工特性に著しく劣る難加工材料の利用が益々増えてくると考えられ、その実用化には難加工材料の超平滑加工技術の確立が必要不可欠である。

これまでに、高硬度材料の超平滑化にはメカノケミカルポリシングが有効であると報告されている。これは、加工物に砥粒を擦り付けると砥粒の機械的作用で接触点局部に化学反応が誘起され、さらにその反応生成物が砥粒の機械的作用で除去されるとされ、被加工物よりも力学的に軟質な砥粒を用いることにより高能率に無ひずみ・超平滑な超精密加工が可能となる。

また、砥粒と加工物の接触部をマクロ的にみると、加工界面は常に新生面であり、しかもとくに加工接触点局部は瞬間的には高温・高圧状態にある可能性が高いために、きわめて化学的に活性な状態になっており、静的な化学反応とは異質の化学現象が加工を支配する場合が多いと考えられる。このため、SiC のような化学的に安定な材料であっても、加工界面でメカノケミカル作用は発現すると

考えられる。

しかしながら、これまでに報告されている既知のメカノケミカル反応は経験的・実験的に見つけ出されたものが大部分であり、そのメカニズムには依然として不明な点が多い。また、メカノケミカル反応が見いだされていない未知の材料に対して、じゅうたん爆撃的な実験による探索は非常に効率が悪く、また時間もかかる。このため、加工界面で生じる化学現象を理論的・定量的に取り扱う手法を確立することが必要不可欠である。

## 2. 研究の目的

そこで本研究では、第一原理計算を用いた砥粒-加工物接触点近部の電子状態解析を行い、電子レベルからみたメカノケミカル反応のメカニズムの検討を試みる。

## 3. 研究の方法

本研究ではアドバンスソフト株式会社製第1原理バンド計算ソフト・Advance/PHASEを用いてシミュレーションを行った。

第1原理計算とは物質中の電子状態や挙動と行った電子のふるまいを記述するシュレディンガー方程式を経験や他の実験から得られたパラメータを一切使用することなく純粋に量子論の原理にのみ基づいた計算法であり、Advance/PHASEは、密度汎関数法による、平面波と擬ポテンシャルを使用した第1原理計算ソフトウェアである。

本研究では、研磨メカニズムに関してこれまでに多くの報告がなされている単結晶シリコンウエハに対して、その表面に砥粒として作用する種々の物質が接触するモデルを構築し、計算を行う。

## 4. 研究成果

図1に計算に用いた単結晶シリコン表面モデルを示す。単結晶シリコンは(100)面とし、表面から5層シリコンを配置した。また、5

層目のシリコンの内部側は水素終端とした。

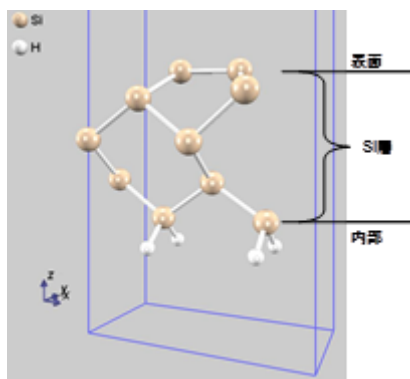


図1 単結晶シリコン表面モデル

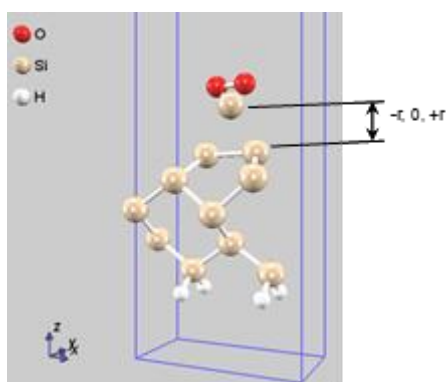


図2 砥粒にシリカを想定したモデル

図2に、砥粒にシリカ ( $\text{SiO}_2$ ) を想定したモデルを示す。シリカ砥粒は  $\text{O-Si-O}$  3原子分子として、Si原子が単結晶シリコン側になるよう配置した。そして、Si原子と単結晶シリコン間の距離を、 $0$  : 接触位置、 $-r$  : 接触位置から共有結合半径だけ単結晶シリコン側に近づけた位置、 $+r$  : 接触位置から共有結合半径だけ単結晶シリコン側に近づけた位置の3種類で計算を行った。

図3に、砥粒に炭酸バリウムと硫酸バリウムを想定したモデルを示す。上述のシリカの場合とは異なり、炭酸バリウムと硫酸バリウムは化学量論組成で対称性のある分子モデルを作製するのは困難である。そこで、本研究は  $\text{Ba}\cdot\text{O}$  2原子分子を砥粒と想定して、Ba原子が単結晶シリコン側になるよう配置した。そして、Ba原子と単結晶シリコン間の距離を、 $0$  : 接触位置、 $-r$  : 接触位置から

共有結合半径だけ単結晶シリコン側に近づけた位置、 $+r$  : 接触位置から共有結合半径だけ単結晶シリコン側に近づけた位置の3種類で計算を行った。

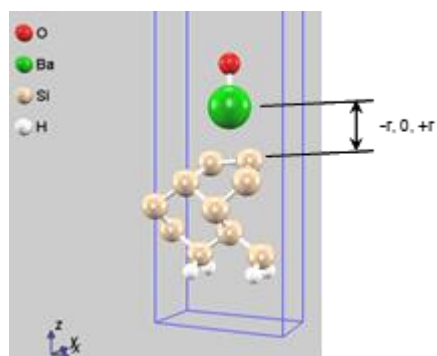


図3 砥粒に炭酸バリウム、硫酸バリウムを想定したモデル

計算に用いたスーパーセルは  $7.68 \times 3.84 \times 24.44 \text{ \AA}$  とし、H原子、Si原子、Ba原子の擬ポテンシャルには交換相関汎関数に GGA-PBE96 を用いたノルム保存型擬ポテンシャル、O原子の擬ポテンシャルには交換相関汎関数に GGA-PBE96 を用いた超軟擬ポテンシャルを用いた。波動関数および電荷のカットオフ値はそれぞれ  $25.0 \text{ Ry}$ 、 $225.0 \text{ Ry}$  とした。また、計算の収束判定は、計算前後の全エネルギーの差分を求めて  $10^{-7} \text{ Hartree}$  以下が3回続いた時点で収束したと判定した。

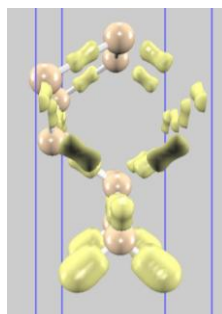
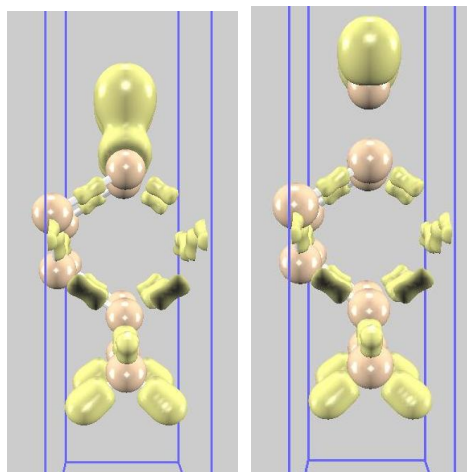


図4 Si(100)の電子密度 (等値面)

図4に砥粒を配置していない Si (100) の電子密度分布 (等値面) を示す。Si原子間に

電子密度の高い領域がみられる。

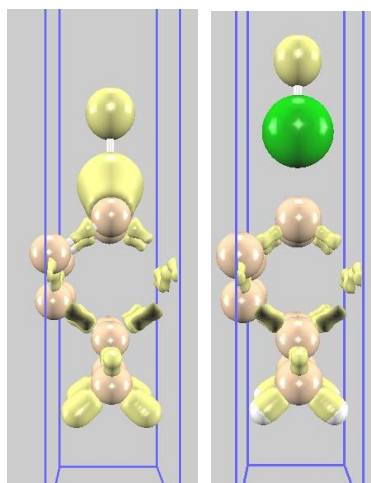


原子位置:-r

原子位置:0

図5 O-Si-Oを配置した場合の電子密度(等値面)

図5にO-Si-Oを配置した場合の電子密度分布(等値面)を示す。O-Si-Oを-r位置に配置することによりSi原子と単結晶シリコン表面のSi原子との間に電子密度の高い領域が出現するが、単結晶シリコン内部のSi原子間電子密度に大きな変化はみられない。



原子位置:-r

原子位置:0

図6 Ba-Oを配置した場合の電子密度(等値面)

一方、図6にBa-Oを配置した場合の電子密度分布(等値面)を示す。Ba-Oを-r位置に

配置することによりSi原子と単結晶シリコン表面のSi原子との間に電子密度の高い領域が出現するとともに単結晶シリコンの最表面と2層目のSi原子間で電子密度の減少がみられた。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計0件)

[学会発表] (計1件)

1. 2012年度精密工学会秋季大会学術講演  
(九州工業大学 2012.09/14-16)  
F16(2012.09.14)

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
出願年月日：  
国内外の別：

○取得状況 (計0件)

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

[その他]

ホームページ等

#### 6. 研究組織

(1) 研究代表者

澁谷 秀雄 (SHIBUTANI HIDEO)

埼玉大学・大学院理工学研究科・助教

研究者番号：80303709

(2) 研究分担者

( )

研究者番号：

(3)連携研究者  
( )

研究者番号：