

機関番号：13903

研究種目：基盤研究（C）

研究期間：2008～2010

課題番号：20560106

研究課題名（和文）拡張された解析解制御分子動力学による単結晶シリコンのマイクロ破壊機構の解明

研究課題名（英文）Analysis of micro fracture mechanism of mono-crystalline silicon by using extended analytical-solution-controlled molecular dynamics

研究代表者

稲村 豊四郎（INAMURA TOYOSHIRO）

名古屋工業大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：60107539

研究成果の概要（和文）：先在欠陥の無い単結晶シリコンのヘルツ押し込み試験においては、圧子接触部でシリコンのダイヤモンド構造がアモルファス構造に変化し、その際弾性波が周囲に放出される。この弾性波が表面を伝播する際の動的応力と、既に圧子周囲に存在するヘルツの静的引張り応力との重畳により表面の局所的な多結晶化が起こり、そこで交差すべりが起きる際、粒界でポイドが生成される。またシリコンのき裂進展は、進展に伴う動的効果の大きさによって、破面の3形態すなわちミラー、ミスト、ハックルが現れる。

研究成果の概要（英文）：In Hertz indentation of mono-crystalline silicon with no pre-existing defect, phase change from diamond to amorphous structures occurs beneath the indenter. Then the dynamic stress associating with the acoustic waves emitted from the amorphous area is combined with the static tensile stress around the indenter and causes local poly-crystallization so that voids are created when cross slips occur in the area. Three types of crack surfaces, mirror, mist and hackle appear depending on the amount of involved dynamic effect in crack propagation.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	2700000	810000	3510000
2009年度	500000	150000	650000
2010年度	500000	150000	650000
総計	3700000	1110000	4810000

研究分野：固体力学

科研費の分科・細目：機械工学・生産工学・加工学

キーワード：分子動力学、解析解、材料欠陥、破壊、マイクロダイナミクス、ブリーミング

1. 研究開始当初の背景

加工とは、材料の変形や破壊を制御しながら進行させる行為である。したがって加工の高精度化や微細化に伴い、加工プロセスで生じる材料の変形や破壊を制御するための、マイクロレベルでのより根源的な現象理解が

要求されることになる。特に高精度加工や微細加工は、シリコンなどの高機能高脆材料に対して要求されるから、脆性材料の破壊について、上述の要求は特別な重要性を持つ。

ところで脆性材料の破壊に関しては、グリフィス理論が広く知られている。グリフィス

によれば、破壊は材料内に先在する欠陥（微き裂）を起点とし、それが進展する形で起きるとされる。これは多くの材料について事実であろう。しかし単結晶シリコンなどでは、理論の前提になっている‘先在欠陥’そのものがほとんど無いことが知られており、にもかかわらず破壊が起きる。このことは、未知の欠陥生成プロセスが、グリフィス理論とは‘別に’あるいは‘先立って’あり得ることを窺わせる。またグリフィス理論自身は、き裂先端で生起する動的現象について何の描像も与えないから、破壊に伴う材料内の損傷範囲や、その範囲の制御法について何の知見も与えない。

以上は、グリフィス理論が、冒頭に述べた観点からは甚だ不完全であることを物語っている。材料内での欠陥の生成プロセスがあるとすれば、それはどのような力学的機構で起きるのか、また破壊時のき裂先端で、どのような動的現象が起きるのか、を知ることによって始めて破壊の詳細な制御が可能になるからである。

2. 研究の目的

本研究では、以上の背景と問題意識をもとに、無欠陥単結晶シリコンを対象として(i)破壊に先立つ材料内でのマイクロ欠陥生成機構の解明と、(ii)き裂先端場での動的なマイクロ力学現象の解明、とを目指す。

ところで加工における破壊はマクロ場の中で起き、我々はそれをミクロの分解能で観察できなければならない点に注意が必要である。これに対し、マクロ場での破壊の記述には、き裂先端場の解析解があるが、これはミクロの分解能がない。一方、最近注目されている分子動力学(MD)は、ミクロの分解能を持つが、マクロ場を用意できない。

そこで本研究では、解析解とMDの長所を

融合し開発した「解析解制御MD」を用いる。

3. 研究の方法

「解析解制御MD」のアイデアは、連続体力学の描像が、実際の物質を構成する原子集団の運動を疎視化して得られる、との認識にもとづく。この考え方にもとずき、MDを、疎視化プロセスを通して解析解に一致するよう制御しながら実行する。これによって、解析解に含まれる（無限体や半無限体など、通常のMDでは実現不可能な）マクロ境界条件をMDに採り入れることが可能になる。一方、疎視化プロセスを通して制御するため、MD内の個々の原子は自由に相対運動でき、通常のMDと同じミクロの現象記述分解能を持つ。

本研究では、MDの制御に使う解析解として(i)については「ヘルツ接触理論解」を、(ii)については「モードI型き裂先端場解」を用いる。

4. 研究成果

上記2の(i)について、ヘルツ押し込みの解析的応力場内にMDモデルを埋め込んだ様子を図1に示す。図中、緑色で示すMDモデルは、リングクラックが発生する圧子接触円外側の材料表面に埋め込まれている。

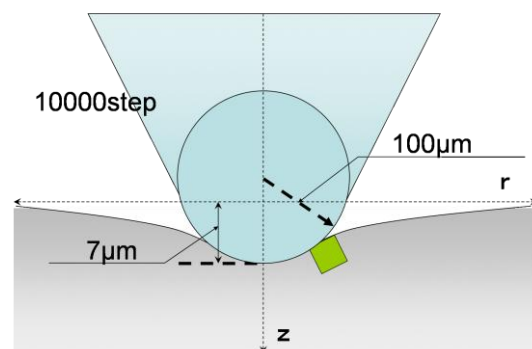


図1 ヘルツの解析的応力場内に埋め込まれたMDモデル

このモデルで圧子を押し込みながら解析解制御MDを実行した結果、以下の事実を明らかにした。すなわち先在欠陥の無い単結晶シリコンのヘルツ押し込み試験においては、圧子接触部周辺は、せん断応力によって結晶構造がダイヤモンド構造からベータ錫構造に先ず変化し、さらにベータ錫構造からアモルファス構造に変化する。アモルファス構造への変化は、せん断応力により引き起こされる交差すべりによる。しかしこれだけではクラック生成の引き金になる欠陥は生成されない。

しかしアモルファス化する際に弾性波が周囲に放出されることから、これが表面を伝播する際の動的応力と、既に存在するヘルツの静的引張り応力との重畳により局所的な多結晶化を引き起こし、そこでせん断応力に起因した交差すべりが起きる際、粒界でボイドが生成される事実が判明した。

先ず図2に、圧子接触円付近で観察された弾性波による材料の動的密度変化を示す。

また図3に、上記のボイド生成のメカニズムを、図4に生成されたボイドを示す。

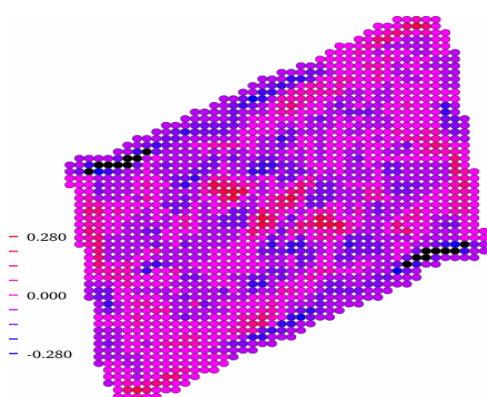


図2 アモルファス化の際放出された弾性波による材料の動的密度変化

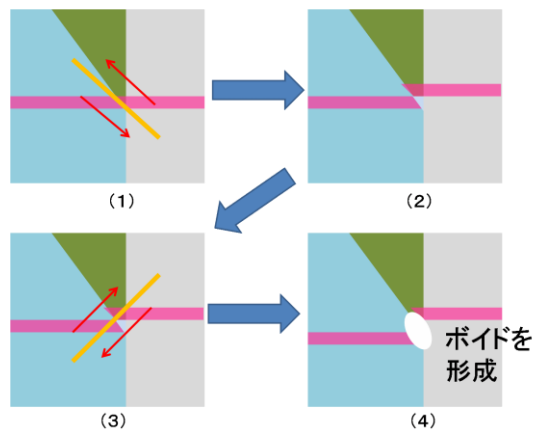


図3 多結晶化した後の交差すべりによりボイドが生成されるメカニズム

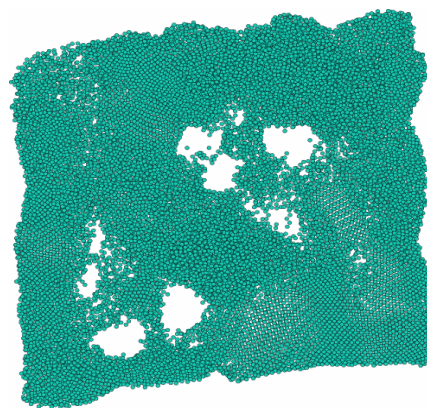


図4 生成されたボイド

この事実は、材料内の先在欠陥の存在を前提とする既存の破壊力学のパラダイムを根底から覆す新発見であり、同時に数十年來の謎を解明した成果でもある。

次に(ii)について述べる。一般にシリコンなどの脆性材料のクラック先端では、ミクロの動的現象が強く関与すると考えられる。しかしモードIの解析解変位場は動的効果を含まないため、解析解による制御を常時行くと、この動的効果を抑制する危険がある。そこで本研究では時間方向に連続的に解析解で制御するのではなく、所定の時間間隔に対して時間平均として解析解に従うよう制御する新しい方法を開発した。

次にこれを用いてシミュレーションを実行した結果、時間平均の長さすなわち採り入れる動的効果の大小によって、従来実験的に報告されていた破面の3形態すなわちミラー、ミスト、ハックルが再現されることが分かった。

図5に、時間平均をしない場合、すなわち準静的にき裂が開いていく場合の結果を示す。この場合は、動的効果がないため、応力腐食割れなどによるき裂の進展に相当する。これはミラー、ミスト、ハックルなどの通常観察される破面とは別のものと考えられる。

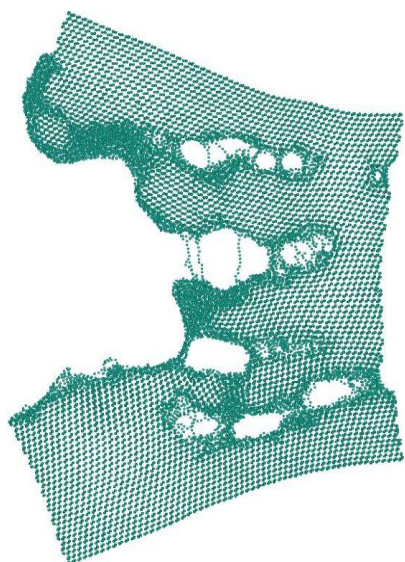


図5 時間平均なしの場合のシリコン単結晶モードIき裂先端場

図6は、MDの計算ステップの100倍の時間平均で解析解に従うよう制御した場合の結果である。この結果では、破面周辺でのボイド生成もなく、破面も比較的滑らかであることから、ミラー破面に相当すると考えられる。

さらに図7に、MDの計算ステップの150倍の時間平均で解析解に従うよう制御した場合の結果を示す。

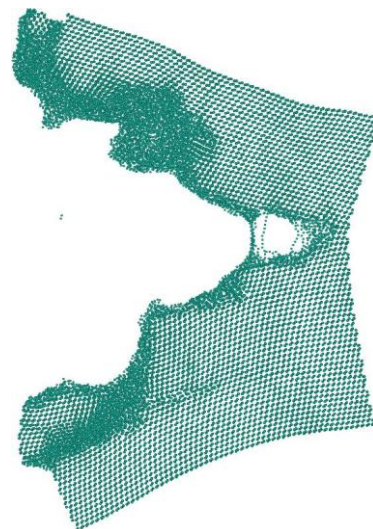


図6 100ステップ時間平均で制御した場合のシリコン単結晶モードIき裂先端場（ミラー破面）

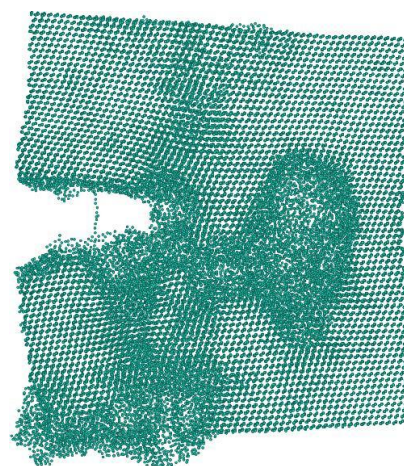


図7 150ステップ時間平均で制御した場合のシリコン単結晶モードIき裂先端場（ミストあるいはハックル破面）

この場合は、動的効果によって破面が激しく破壊されながら進展しており、ミストやハックルと呼ばれる破面が生成されていると考えられる。

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4件)

- ① T.Inamura, Y.Shishikura, N.Takezawa,
Mechanism of ring crack initiation
in Hertz indentation of monocrystalline
silicon analyzed by controlled
molecular dynamics, CIRP Annals-
Manufacturing Technology, 査読有、
Vol.59, No.1, 2010, pp.559-562.
- ② 宍倉由記子、武澤伸浩、稲村豊四郎、
解析解制御 MD による単結晶シリコン押し込み時のリングクラック生成メカニズム解析、精密工学会誌、査読有、Vol.76, No.4, 2010, pp.420-427.
- ③ T.Inamura, Y.Shishikura, N.Takezawa,
Ring crack initiation in
micrometer-scale Hertz indentation
simulated by controlled molecular
dynamics, The international journal of
nanomanufacturing, 査読有、Vol.6, No.1,
2010, pp.12-21.
- ④ T.Inamura, Y.Shishikura, N.Takezawa,
Digital microscope observation of the
initial stage of cutting monocrystalline
silicon, CIRP Annals Manufacturing
Technology, 査読有, Vol.58, No.1, 2009,
pp.69-72.

[学会発表] (計1件)

- ① 宍倉由記子、大久保正慈、伊藤正樹、武澤伸浩、稲村豊四郎、有限要素解で制御された MD による単結晶 Si の切削メカニズム解析、精密工学会、2008年9月19日、東北大学工学部

[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

稲村 豊四郎 (INAMURA TOYOSHIRO)
名古屋工業大学・大学院工学研究科・
教授

研究者番号 : 6 0 1 0 7 5 3 9

(2) 研究分担者

武澤 伸浩 (TAKEZAWA NOBUHIRO)
名古屋工業大学・大学院工学研究科・
助教

研究者番号 : 5 0 2 3 6 4 5 2