

hcp 結晶の分子動力学解析結果を利用した c 面サファイアのアブレシブ摩耗特性の評価

Evaluation of Abrasive Wear Properties of c-plane Sapphire using Molecular Dynamics Analysis Results of hcp Crystals

茨城大・工（正）*清水 淳 茨城大・院（非）林 旺票 茨城大・院（非）矢野直彦 茨城大・工（非）周 立波
茨城大・工（非）小貫哲平 茨城大・工（非）尾島裕隆 茨城大・工（非）金子和暉 茨城大・工（非）山本武幸

Jun Shimizu*, Wangpiao Lin**, Naohiko Yano**, Libo Zhou*, Teppei Onuki*,

Hirofumi Ojima*, Kazuki Kaneko*, Takeyuki Yamamoto*

*College of Engineering, Ibaraki University, **Graduate School, Ibaraki University

1. はじめに

青色発光ダイオードをはじめ、次世代半導体として単結晶 GaN 基板の重要性は高い。単結晶 GaN のエピタキシャル成長基板には、(0001)面（c 面）単結晶サファイア基板が用いられており、その表面はナノオーダー以下で平坦に仕上げられる必要がある。しかしながら、単結晶サファイアは、高強度・高硬度かつ化学的に安定なことから、加工が難しく加工コストも高い。さらに、単結晶ゆえに機械的な特性をはじめ各種特性が結晶方向によって異なる。よって、サファイア基板の表面品質向上と加工コスト削減には、異方性を考慮した加工メカニズムの理解が重要である。

著者らの一部は、c 面サファイアのナノ加工機構の理解の一助として、ナノスクラッチ実験と並行し、結晶構造の似た hcp 結晶（亜鉛（Zn））に対するナノスクラッチの分子動力学解析を試みている¹⁾。前報²⁾では、c 面のスクラッチにおける結晶すべりの異方性を報告した。本報では、切りくずやバリ生成に及ぼす異方性の影響について報告する。

2. c 面サファイアのナノスクラッチ実験によるスクラッチ抵抗（接線抵抗）の異方性

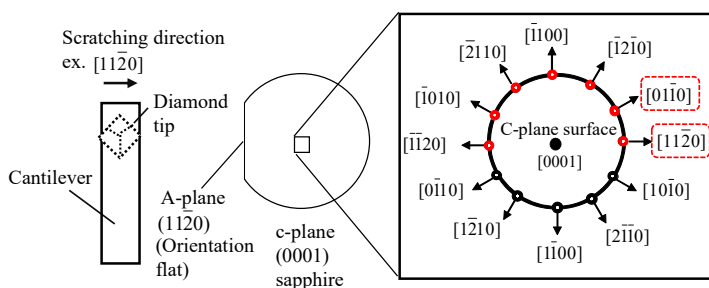
Fig. 1¹⁾の、(a)はc 面サファイア基板の単溝創成ナノスクラッチ実験における(0001)面（c 面）上のスクラッチ方向を、(b)はナノスクラッチ実験で得られたスクラッチ抵抗（接線抵抗）とスクラッチ方向との関係をそれぞれ示している。走査型プローブ顕微鏡の摩擦力顕微鏡機能を利用し、先端半径 100 nm の単結晶ダイヤモンドプローブを工具として、10 μN と 20 μN の垂直荷重でナノスクラッチした。Fig. 1(b)の接線抵抗からわかるように 60° 周期で接線抵抗は変化する異方性を示し、スクラッチ方向が加工レートや表面および亜表面品質に大きな影響を及ぼすと見積もられる。

3. c 面亜鉛のナノスクラッチの分子動力学シミュレーション

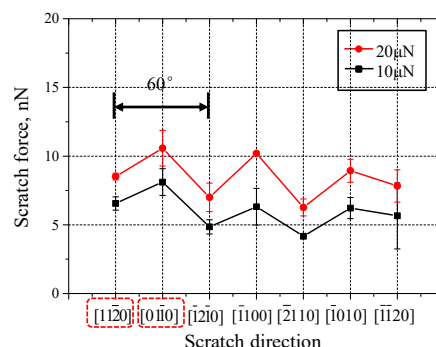
Fig. 2 に分子動力学モデルを示す。工作物を単結晶亜鉛（Zn）、工具を単結晶ダイヤモンド（C）、工作物表面を Zn(0001)面として解析領域およびその境界に温度制御層、外側に剛体層を設け、円柱状の工作物モデルとした。工作物原子の初期配列は欠陥を含まないものとし、表面は原子レベルで平坦なものとした。工具チップは、上から剛体層、温度制御層、解析領域の順に構成される。解析領域内部から力学的エネルギーの伝達があれば温度制御層において散逸し、剛体層の影響は極力排除される。解析領域におけるそれぞれの原子の運動を分子動力学計算によって求める。原子間相互作用については、Zn-Zn 間および Zn-C 間にはモースポテンシャル³⁾を用いる。後者におけるパラメータは不明なため混合則⁴⁾から割り出した。ただし、工具－工作物間の太気による潤滑作用を考慮し、Zn-C 間の解離エネルギー D を $D = 0.1D$ とした。工具のダイヤモンドチップを構成する炭素間の相互作用には Tersoff ポテンシャル⁵⁾を用いた。

4. シミュレーション結果および考察

工具を工作物に押し込んだ後、一定の深さを維持し水平移動させスクラッチする。Fig. 1 中に四角い破線で囲んだ(a) 0° ([11 $\bar{2}$ 0])方向と(b) 30° ([01 $\bar{1}$ 0])方向にスクラッチし異方性の要因を調べた。シミュレーション条件を Table 1 に示す。



(a) Scratch directions on C-plane of sapphire wafer substrate



(b) Relationship between scratch direction and force

Fig. 1 Representative nanoscratch results of c-plane sapphire¹⁾

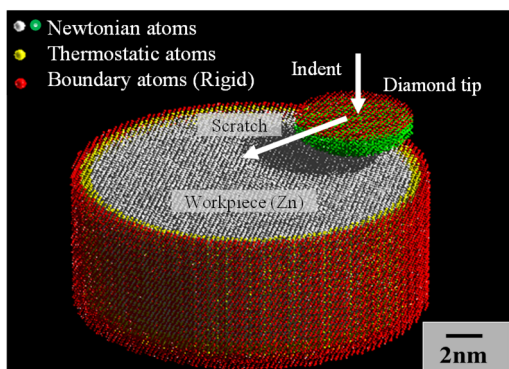


Fig. 2 Molecular dynamics model for nanoscratch

Table 1 Simulation conditions

Workpiece	Monocrystalline zinc (Surface: Zn(0001))
Analysis area	Radius: 8.1 nm, Height: 6.7 nm
Tool tip	Monocrystalline diamond
Tip radius	4.5 nm (Height: 2.2 nm)
Potential function	Morse (C-Zn) Tersoff (Diamond, C)
Integral calculation	Leap flog method
Time step	0.2 fs
Initial temperature	300 K
Scratch speed	20 m/s
Indentation depth	1.3 nm
Sliding distance	8 nm
Scratch direction	(a)[11 $\bar{2}$ 0], (b)[01 $\bar{1}$ 0]

Fig. 3 に、8 nm スクラッチ後の断面を工作物原子の移動距離（カラースケール）とともに示す。

Fig. 3(a) 0° ([11 $\bar{2}$ 0]) 方向のスクラッチでは、左水平方向の矢印で示したように、工具直下で(0001)面がスクラッチ方向へすべり変形 (Basal slip) している。そのすべりが左斜め上方へ抜けるようにして、切りくずを形成している。それに対し、Fig. 3(b) 30° ([01 $\bar{1}$ 0]) 方向のスクラッチでは、工具の左斜め下の領域において、実線で記したように、結晶面のズレが生じており、双晶変形の様相を示している。切りくず生成まで至らない様子もわかる。

Fig. 4 には Fig. 3 の状態における上面図を示す。(a) 0° ([11 $\bar{2}$ 0]) 方向では工具の前面に多くの Zn 原子が堆積し切りくずを形成するのにに対し、(b) 30° ([01 $\bar{1}$ 0]) 方向では工具の前面よりも側方へ Zn 原子が堆積しており、バリの形成が顕著になっている。Fig. 3 と 4 の結果から、すべり変形 (Basal slip) する方向に変形しやすいことがわかる。

Fig. 5 にスクラッチ方向と接線抵抗の関係を示す。この結果は、Fig. 1(b) に示した実験結果と同じ傾向を示している。([11 $\bar{2}$ 0]) 方向は Basal slip して切りくず生成が円滑なため接線抵抗が低いことがわかる。

5. おわりに

c 面単結晶サファイア基板の加工異方性の理解のため、結晶構造のよく似た hcp 結晶の一つである亜鉛の(0001)面 (c 面) のナノスクラッチの分子動力学シミュレーションを試みた。その結果、Basal slip しやすい方向 (60° おきに存在) とスクラッチ方向が一致する場合は切りくずが生成しやすく接線抵抗も低くなることが明らかになった。それに対し、Basal slip しやすい方向とスクラッチ方向が異なると、バリの形成および接線抵抗が増加することが明らかになった。

謝 辞

本研究の一部は、学振の科研費 No. 20K04235 を受け実施されたことを記し、ここに感謝申し上げる。

文 献

- 1) W. Lin, N. Yano, J. Shimizu, L. Zhou, T. Onuki, H. Ojima: Analysis of Nanoscratch Mechanism of C-Plane Sapphire with the Aid of Molecular Dynamics Simulation of Hcp Crystal, *Nanomaterials*, 11, (2021) 1739.
- 2) 清水・林・矢野・周・小貫・尾嵩・金子・山本: hcp 結晶の分子動力学解析を用いた c 面サファイアのアブレジブ摩耗特性の考察, *トライボロジー会議予稿集*(松江), (2021) 144-145.
- 3) N. V. Hung: A Method for Calculation of Morse Potential for fcc, bcc, hcp Crystals Applied to Debye-Waller Factor and Equation of State, *Communications in Physics*, 14, 1 (2004) 7-14.
- 4) M. Imafuku, Y. Sasajima, R. Yamamoto, M. Doyama: Computer simulations of the structures of the metallic superlattices Au/Ni and Cu/Ni and their elastic moduli, *J. Phys. F, Met. Phys.* 16, (1986) 823-830.
- 5) J. Tersoff: Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems, *Phys. Rev. B*, 39, 8 (1989) 5566-5568.

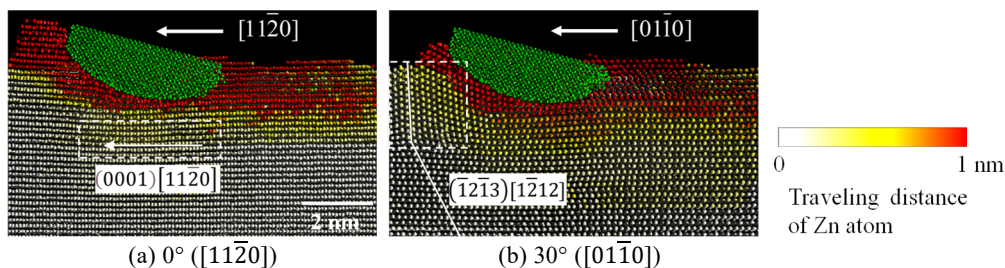


Fig. 3 Cross-sections after 8 nm long scratch where the color bar shows traveling distance of Zn.

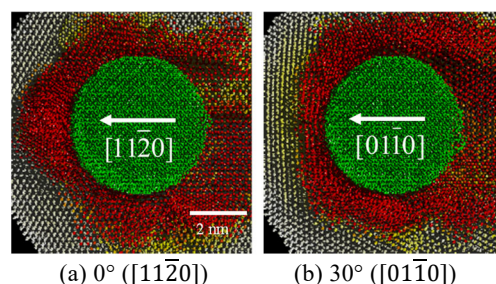


Fig. 4 Top-views after 8 nm long scratch where the same color bar in Fig. 3 is used.

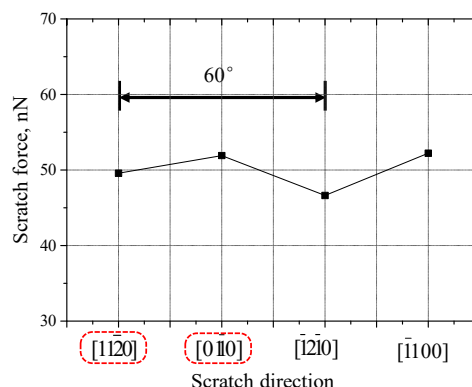


Fig. 5 Scratch direction vs. scratch force