221 原子間ポテンシャルパラメータの制御によるシリコンウエハ機械・化学研削の分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Mechano-Chemical Grinding of Silicon Wafer with Control of Interatomic Potential Parameters

○正 清水 淳 (茨城大工) 正 周 立 波 (茨城大工) 非 山本武幸 (茨城大工)

Jun SHIMIZU, Ibaraki University, Nakanarusawa 4-12-1, Hitachi, 316-8511

Libo ZHOU, Ibaraki University, Nakanarusawa 4-12-1, Hitachi, 316-8511

Takeyuki YAMAMOTO, Ibaraki University, Nakanarusawa 4-12-1, Hitachi, 316-8511

This study aims to clarify the interaction between Si wafer and individual abrasive grains in an atomic level. This paper reports on the proposal of the molecular dynamics simulation in Si wafer grinding/polishing with the control of the interatomic potential parameters to consider the mechano-chemical and adhesion effects between an abrasive and a Si wafer. From the simulation results, the availability in proposed model was verified, because exactly same as the real grinding processes, it was confirmed that the assistance of chemical effect and reduction in adhesion are effective for the reduction in subsurface damages, grinding forces and tool wear, but accompanies with the reduction in material removal rate.

Keywords: silicon wafer, interatomic potential, mechano-chemical effect, chemo-mechanical effect, molecular dynamics

1. 緒 言

半導体デバイスの高集積化に伴い、シリコンウエハの大口径化が、一方で IC チップの普及に伴い、シリコンウエハの薄片化が進んでおり、加工ウエハの寸法・形状精度に対する要求はますます厳しくなっている。そのような中、とくにウエハ背面加工において、加工能率および形状精度向上を目的とし、ダイヤモンド砥石の適用が進められている。また、最終仕上げ加工における寸法・形状精度および表面品質の安定化をねらい、化学作用を援用した固定砥粒研削を提案し、良好な形状精度と CMP と同等の表面粗さを得た例もある⁽¹⁾。

本研究は、Si ウエハのダイヤモンド研削や化学作用を援用した仕上げ研削における個々の砥粒と Si ウエハ間の相互作用を原子レベルで解明することを目的としている。そのような化学作用を含んだ現象は、本来、第一原理的な扱いのもと解析されるべきであるが、それによると扱える原子数に制限があり、実研削現象を解析するのは困難である。そこで本報では、Si ウエハの研削現象に対し、分子動力学シミュレーションにおいて原子間ポテンシャルパラメータを制御することにより、化学作用援用研削および潤滑の影響を解析するモデルを提案し、それらによる検討を行なった結果を報告する。

2. 化学作用と凝着を模擬したシミュレーションモデル

シミュレーションモデルは、工作物に単結晶シリコン、砥粒にダイヤモンドもしくは剛性をダイヤモンドと同様とし、そこに化学作用を模擬して取り入れたものである。Si(100)を工作物表面とする。工作物原子の運動は、分子動力学計算 (Newton の運動方程式を解く) により求める。数値積分に蛙飛び法を用い、時間刻みは 1 fs とする。解析領域の境界には平均温度 300 K に保たれた温度制御層として 1 格子分の原子配列を設ける。その外側は完全剛体とし、内部解析領域から力学的エネルギーの伝播がある場合、温度制御層よりそれを散逸させることができる。Si 原子間と C 原子間の原子間相互作用の記述には、基本的に Tersoff ポテンシャル⁽²⁾を用いる。Si-C 間には以下に示す Morse ポテンシャル⁽³⁾を用いる。

$$\phi(r) = D * [\exp\{-2\alpha(r - r_0)\} - 2 \exp\{-\alpha(r - r_0)\}] \quad (1)$$

ここで、 ϕ は原子間ポテンシャル、 r は Si 原子-C 原子間の距離、

D^* は解離エネルギー、 r_0 は平行距離、 α はポテンシャル係数である。ここでは Fig. 1 に示すように、砥粒-工作物間の化学作用による凝着の強弱を考慮するために、文献値⁽³⁾の解離エネルギー D に対し、(a) D^* が等しい場合、(2) D^* を小さく凝着の影響を小さく見込む (潤滑性が良好な) 場合について比較検討する。

一方、機械・化学作用を模擬した研削では、Fig. 2 に示すように、砥粒-Si ウエハ間の距離 r_{ix} が減少するにつれて、Si 間の結合 (2 体項) が弱体化する効果を取り入れる。ここで、試みとして $f_A(r_{ij})$ に $\{1 - \exp(-0.7 \times r_{ix})\}$ を掛け、弱体化を表現する。

Fig. 1 Potential function for evaluation of adhesion effect

Fig. 2 Assumption of mechano-chemical effect

Table 1 Simulation conditions

Workpiece	Silicon (Si (100))
Abrasive	Diamond or else
Dimension of workpiece	$40a \times 20a \times 10a$ ($a = 0.534$ nm)
Tip radius of abrasive	0.7 nm
Initial temperature	300 K
Depth of cut	0.5 nm
Scratching length	12 nm
Scratching speed	100 m/s

Fig. 3 Snapshots after 12 nm scratching and traveling distance of Si atoms **Fig. 4** Wear of abrasive grains after 12 nm scratching and traveling distance of abrasive atoms **Fig. 5** Comparison of scratching forces in average

3 シミュレーション結果および考察

Table 1 にシミュレーション条件を示す。ここでは、Si の格子定数(0.543 nm)程度の切込みを与えて単粒研削した。

Fig. 3 に a)ダイヤモンド研削($D = D^*$)、b)凝着が弱いダイヤモンド研削($D = 0.5D^*$)、c)機械・化学研削を行なった際の 12 nm 引っかき後における状態と Si 原子の移動量をカラースケールで表現した結果をそれぞれ示す。a)と b)を比較すると、b)の方が Si ウエハ内部への物理的作用が小さい様子がわかる。さらに c)では、Si ウエハ内部への影響は b)より小さく、切りくずが細かく分離して比較的容易に排出されている。

Fig. 4 は、12 nm 引っかき後における砥粒先端の摩耗の様子を、**Fig. 3** と同様な加工法の順序で示した結果である。この結果から、a)ダイヤモンド研削($D = D^*$)、b)凝着が弱いダイヤモンド研削($D = 0.5D^*$)、c)機械・化学研削の順に原子摩耗が小さくなる様子がわかる。

Fig. 5 は、上述の三手法による単粒加工における引っかき力の平均の比較である。この結果も工作物変形と砥粒摩耗の結果とよく似ており、とくに c)の加工抵抗は極めて低い。

これらの結果から、c)機械・化学研削における工作物変形と砥粒摩耗、加工抵抗低減の効果が、化学作用援用の効果をよく模擬していることがわかる。これは、実験結果⁽¹⁾とも定性的によく一致しており、凝着の効果についてもあてはまる。

4. 結 言

Si ウエハの化学作用援用研削現象およびダイヤモンド研削における潤滑効果の解明を目的とし、ポテンシャルパラメータの制御による方法を提案し、化学作用と凝着の効果を模擬した分子動力学シミュレーションを試みた。その結果、実験結果と同様に、機械・化学研削および潤滑性良好の研削における Si ウエハ表面へのダメージ、砥粒摩耗、加工抵抗低減の効果が明らかになり、本提案モデルの有効性が示された。

謝 辞

本研究を遂行するにあたり、茨城大学大学院博士前期課程岡部秀光氏（現：(株)SUMCO）のご協力に感謝申し上げる。

参考文献

- (1) L. Zhou, H. Eda, J. Shimizu, S. Kamiya, H. Iwase, S. Kimura, *Annals of the CIRP*, **55**, 1 (2006) 313.
- (2) J. Tersoff, *Phys. Rev. B.*, **39**, 8 (1989) 5566.
- (3) W. C. Dcheong, L. C. Zhang, *Nanotechnology*, **11**, (2000) 173.