

Si 対向探針で形成した単一真実接触部のせん断過程におけるアモルファス原子分布の効果

薄膜・表面物性研究室 中嶋 佑樹

S111102 Yuki NAKAJIMA

背景と目的

近年、電子/機械デバイスの微細化に伴いナノトライボロジー特性の評価が要求されている。これまでに我々は、透過電子顕微鏡(TEM)を用いて微小電気機械素子(MEMS)のシリコン対向探針で形成した単一真実接触部におけるナノスケール特有のせん断現象の観察に成功した。本研究ではこのシリコンの凝着/せん断現象を摩擦の原子スケール素過程として捉え、せん断の特性量である剛性率にアモルファス的な結合状態にある原子がどのような効果を及ぼすか調べた。アモルファス原子の配置(量・位置)を様々に変更し、剛性率への影響を解明することを目的とした。

計算モデルと手法

図1で示す直径6.00 nm、高さ4.89 nm、原子数7114個のSi円柱モデルを用いた。アモルファス原子を含む円柱としては、次のようなモデルを用いた：アモルファスの割合を系統的に変化させたモデル、アモルファスをせん断方向に対して平行に配置したモデル、それを90°回転させた垂直モデル、アモルファス層の高さを変化させたモデル、アモルファスを中心近く(内側)あるいは表面近く(外側)に配置したモデル。せん断過程をシミュレートするため、ステップ(せん断距離)ごとに共役勾配法を用いて構造安定化を行った。原子間ポテンシャルには、シリコン共有結合を表現したStillinger-Weberポテンシャルを用いた。

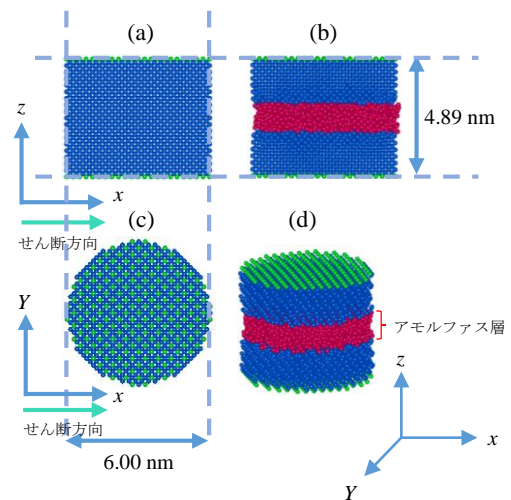
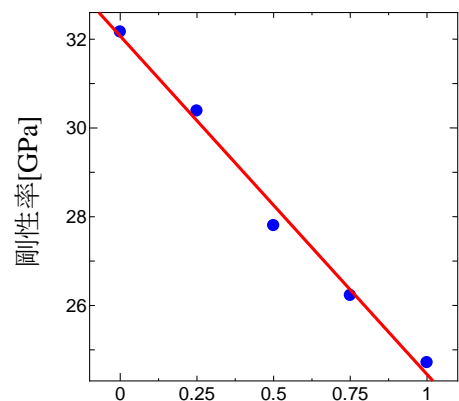


図1. 計算モデル

- (a)完全結晶モデル、(b)アモルファスモデル
- (c)円柱上面図、(d)円柱モデル全体図

結果および考察

完全結晶モデルとアモルファスモデルを比較すると、アモルファスモデルの方が剛性率は低くなった。図2は、アモルファス層内におけるアモルファス原子の割合に対する剛性率の関係である。割合が増加すると、剛性率はほぼ線形的に減少した。アモルファス層の位置については、平行に配置したモデル、回転させたモデル、アモルファス層の高さを変化させたモデルのいずれでも、剛性率はほぼ一定であった。しかし、アモルファスを内側に配置したモデルは、外側に配置したモデルよりも剛性率が低くなった。つまり、剛性率はアモルファスの量に依存し、位置については中心からの距離にのみ依存する事がわかった。



アモルファス層内におけるアモルファス原子の割合[-]

図2. アモルファス原子の割合に対する剛性率