

フェーズフィールド・クリスタル法による 加圧ボンディングプロセスのシミュレーション

茨城大学 篠嶋 妥, 小野澤 亮祐, 畠山 慎悟, 岩本 知広

近年、材料組織の時間発展を計算する手法としてフェーズフィールド法が開発され、材料開発に積極的に利用されている。フェーズフィールドとはある相の状態をパラメータ化して時間・場所の関数として表したものである。また、Elder らによって創始されたフェーズフィールド・クリスタル法によれば、結晶構造を安定に実現するフェーズフィールドモデルにより原子レベルで材料解析を可能にした。

加圧ボンディングは異なる材料を低い温度で接合できるほか、特殊な技術がいらず簡単にできるというメリットがある。近年の半導体デバイスプロセスなどへの適用では原子レベルの制御が必要であり、最適の加圧ボンディング条件を決めるにあたって、計算機によるシミュレーションが重要である。

そこで本研究では、原子レベルでの解析が可能なフェーズフィールド・クリスタル法を用いて加圧ボンディングプロセスのシミュレーションを試みた。系は2次元系とし、方位が異なり正弦波の表面を持つ2つの結晶を相対させ、その最上層部・最下層部をチャック部として徐々に近づけた。結晶間の方位差・相対位置、圧着速度と原子構造や系のエネルギー変化の相関関係を調べた。数値計算における空間分割メッシュの長さを単位長さ(mesh)、時間分割の時間を単位時間(step)としてチャック部の移動速度 V (mesh/step) を設定する。 T (step) ごとにチャック部を1(mesh)だけ近づけ、フェーズフィールドの時間変化を計算した($V=1/T$)。

表面の正弦波の凸部が重なる位置で、チャック部を $V=1 \times 10^{-4}$ mesh/step で動かした場合はボイドが残ったままになり、 $V=0.2 \times 10^{-4}$ mesh/step で動かした場合はボイドが塞がった。また、チャック部の移動距離に対する系の自由エネルギー変化は、いずれのチャック部移動速度においても原子が接触した時点でエネルギーが急激に減少した。また、 $V=0.2 \times 10^{-4}$ mesh/step では、 $V=1 \times 10^{-4}$ mesh/step の場合よりもエネルギー値は低く、ボンディング状態がより良好だと考えられる。すなわち、良好なボンディング状態を実現するチャック部移動速度には上限値（工学的には最適値）が存在する。