

2017.2.13
修士論文審査会

原子スケールにおける 異種材界面の応力場・ひずみ場評価

鹿児島大学大学院 理工学研究科
機械工学専攻 固体力学研究室
修士課程2年 芝健太

発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

研究背景・目的

電子デバイスの微細化や積層化の著しい発展



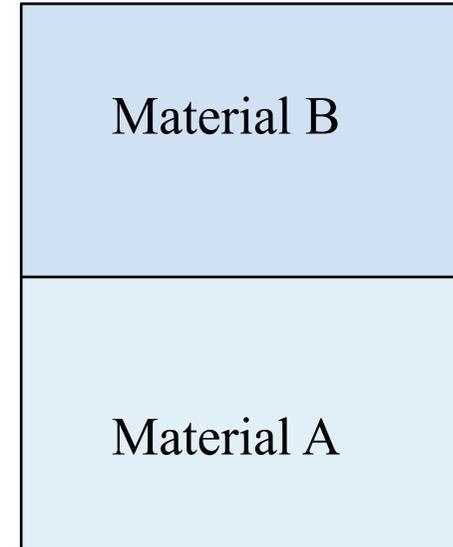
材料が積層され、多くの**異種材界面**が存在



格子定数の違いにより接合界面で**応力集中**が発生



破壊や剥離の起点となり、電子機器の破壊や故障の原因



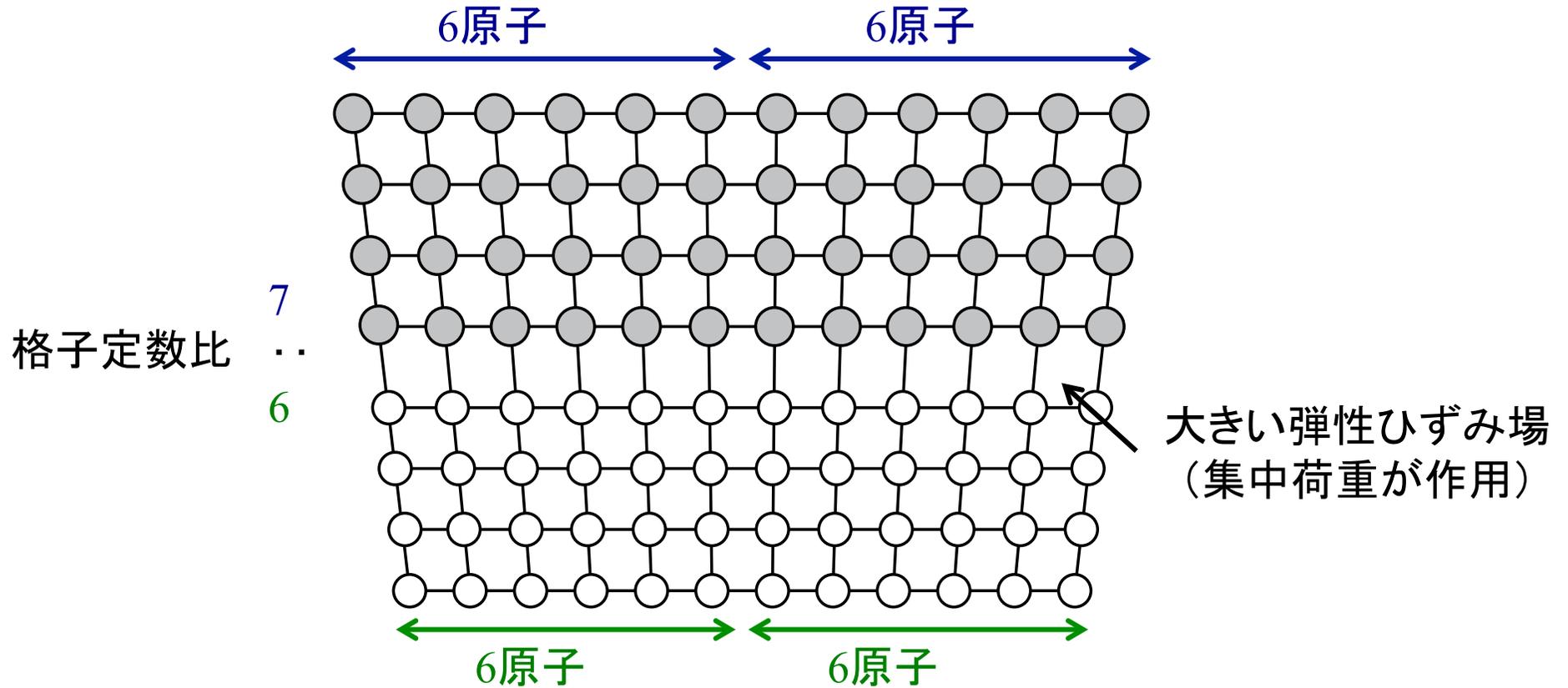
- デバイスの厚みや薄膜技術が**ナノスケールで制御**
- 積層されている電子デバイスのほとんどは**異方性材料**

**原子スケールにおける
異方性異種材界面の応力場・ひずみ場の評価が重要**

研究背景・目的

材料定数の違いにより応力が集中する原因

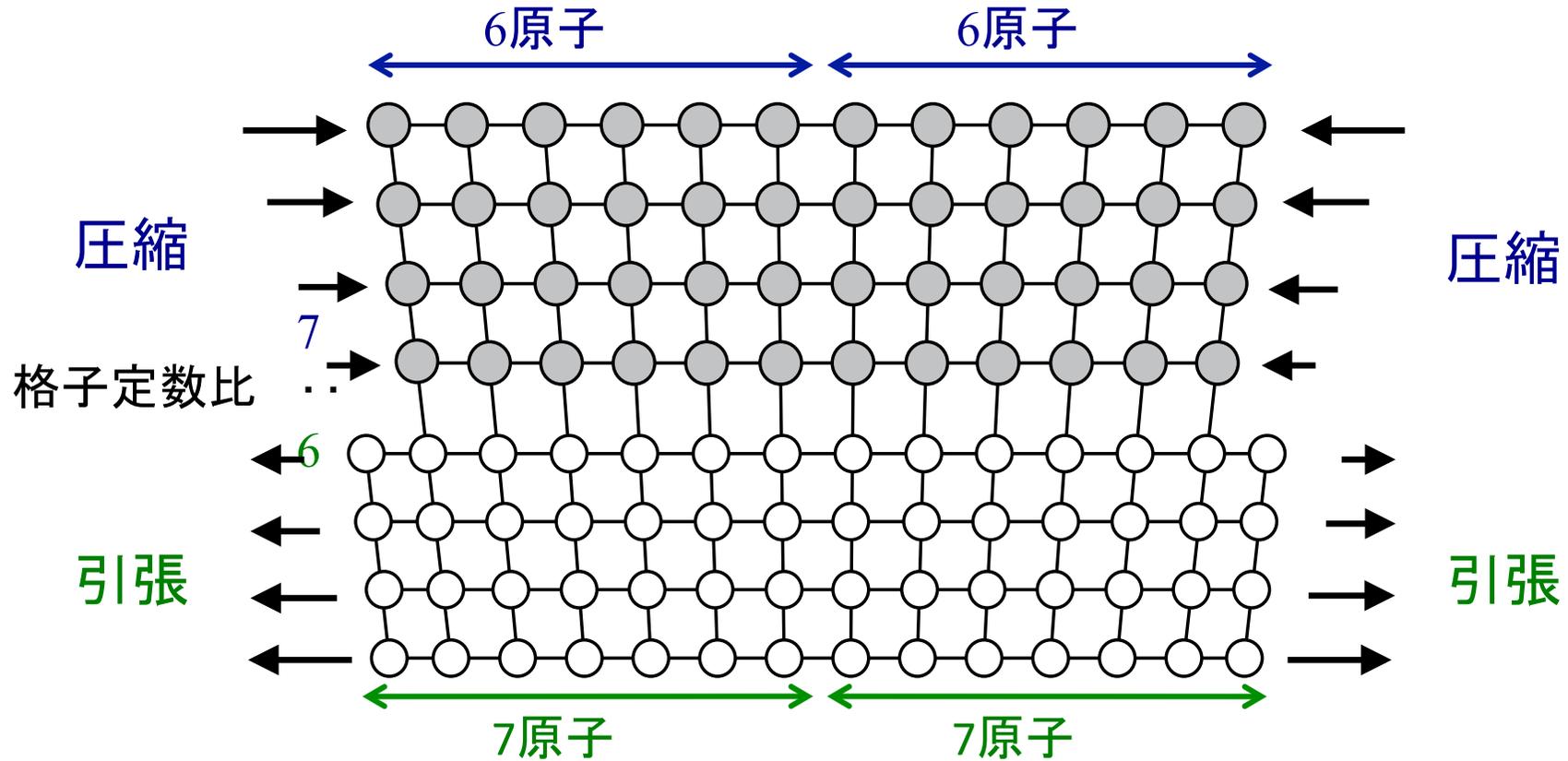
異種材整合面



研究背景・目的

材料定数の違いにより応力が集中する原因

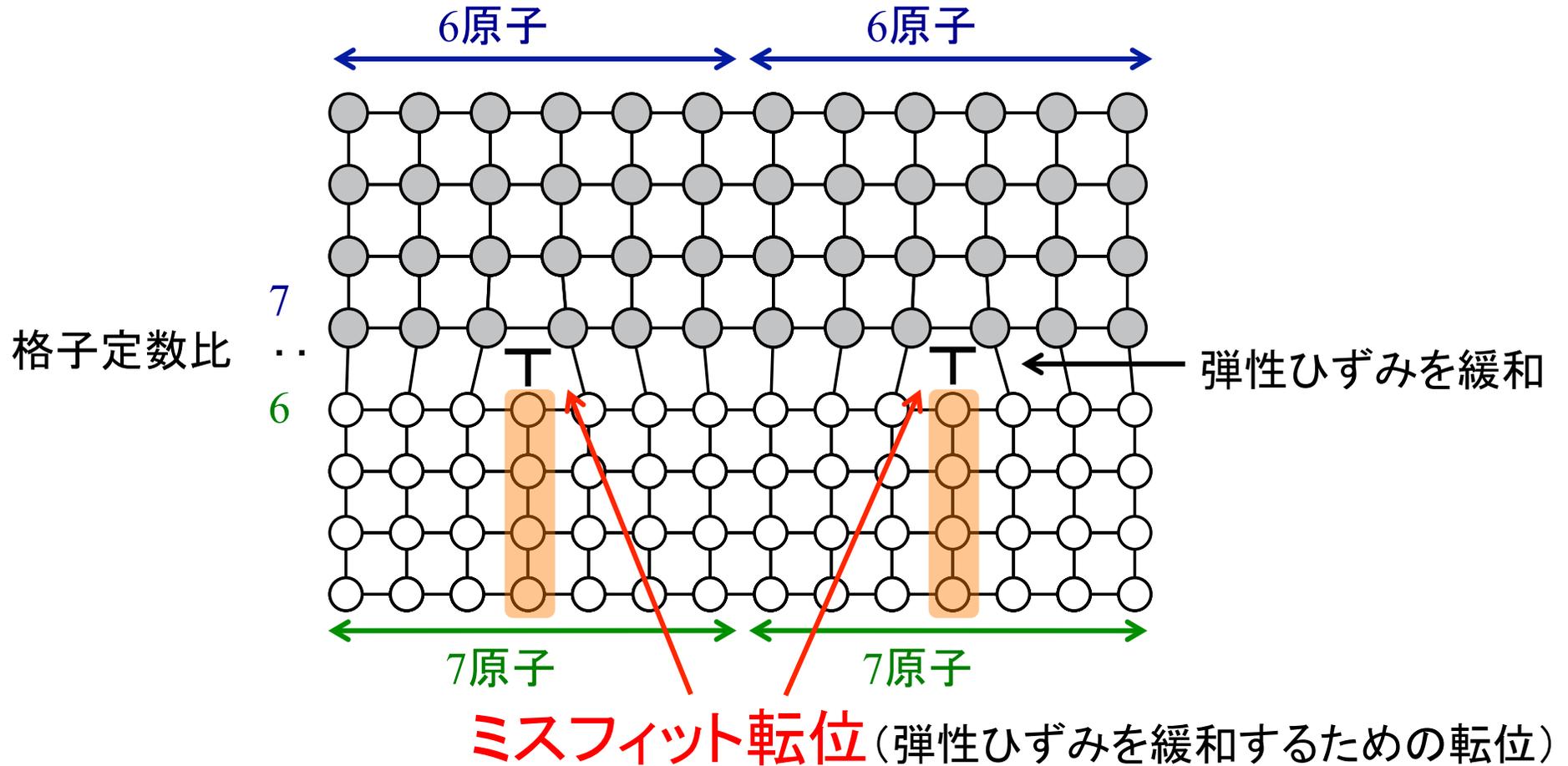
異種材整合面



研究背景・目的

材料定数の違いにより応力が集中する原因

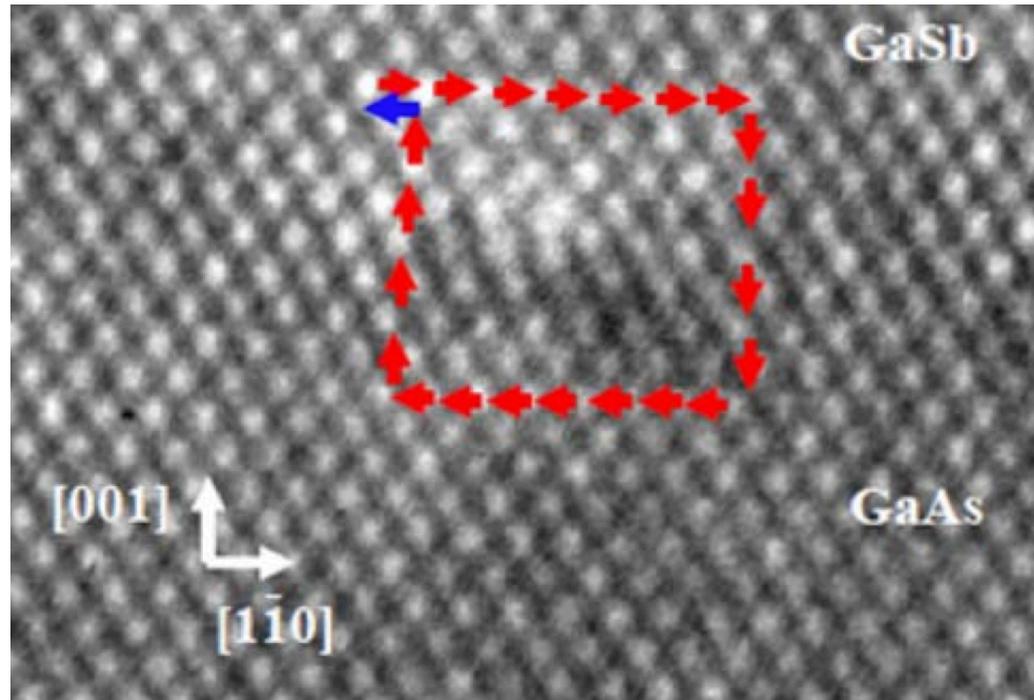
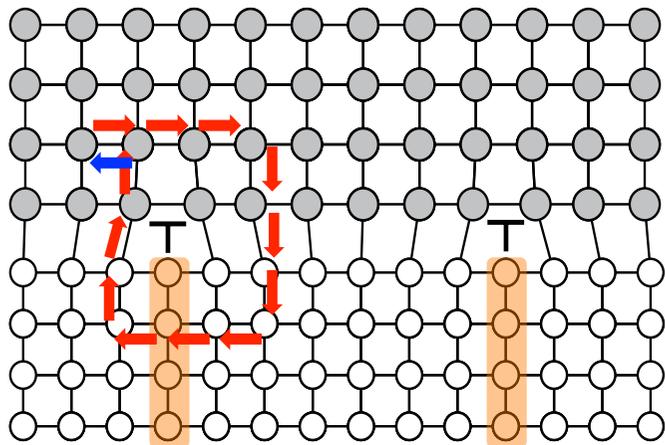
異種材半整合面



研究背景・目的

ミスフィット転位とは・・・

異種材間の格子定数が異なることが原因で生じる
弾性ひずみを緩和させるため、**界面に周期的に発生する転位**



透過型電子顕微鏡 (TEM) 画像^[1]
格子定数が異なる異種材界面 (**半整合面**)

[1] A. Jallipalli, et al., Nanoscale research letters (2009).

研究背景・目的

先行研究

- 森山らが**仮想モデル**における異方性異種材界面・角部で、
- 分子静力学解析より、ミスフィット転位が破壊靱性値に及ぼす影響を評価
 - 分子静力学法(MS法)と異方性弾性解の結果を比較し、格子定数差が小さいときは両者が比較的一致していたと、**ミスフィット転位の影響を評価** [2].



目的

実材料に生じるミスフィット転位の応力場・ひずみ場を
弾性論と解析から**定量的に評価**
→**積層材料の信頼性向上を図る**

[2] 森山真樹, ミスフィット転位が存在する異方性異種材界面および界面角部の応力・ひずみ場, 京都大学修士論文, (2014).

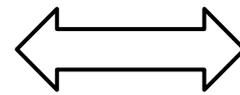
研究背景・目的

評価方法

異方性弾性論^[3]による 応力場・ひずみ場の評価

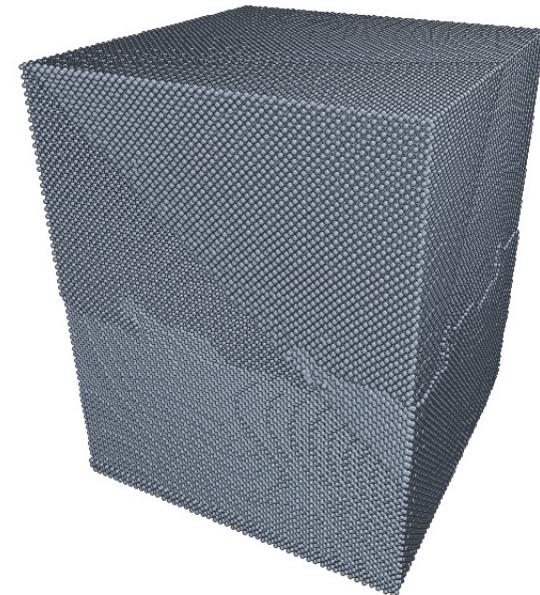
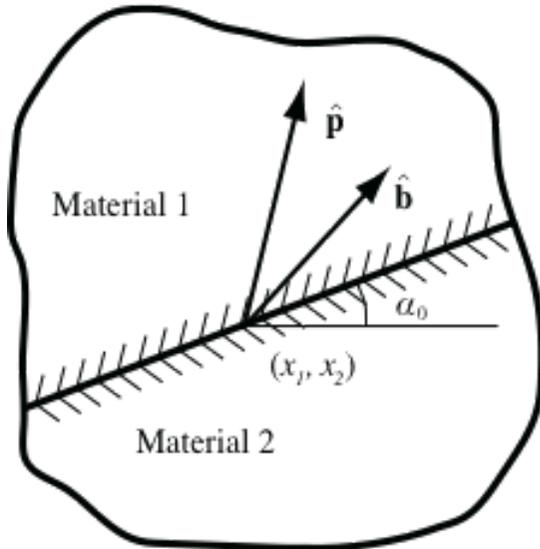
- 先行研究では仮想モデルのみの評価であり, 実材料を仮定していない
- 弾性論の見地からの評価は積層材料の信頼性向上に必要

比較



原子シミュレーションを用いた 解析

- Ge/Siブロックモデルを作成し, 原子シミュレーション(分子静力学)から応力・ひずみ場を算出.



[3] C. Hwu, Anisotropic Elastic Plates, Springer Science+Business Media, (2010), pp. 53-113.

発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

解析理論(異方性弾性論)

ミスフィット転位を含む異種材界面(半整合面)の応力

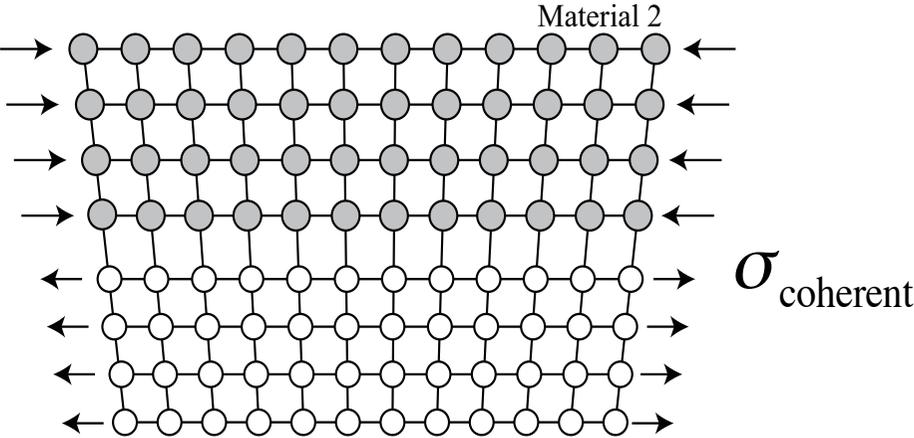
$$\sigma_{\text{semicoherent}} = \sigma_{\text{coherent}} + \sum \sigma_{\text{dislocation}}$$

半整合面における応力 整合面における応力 転位周りの応力の重ね合わせ

整合面(coherent)

整合面における応力

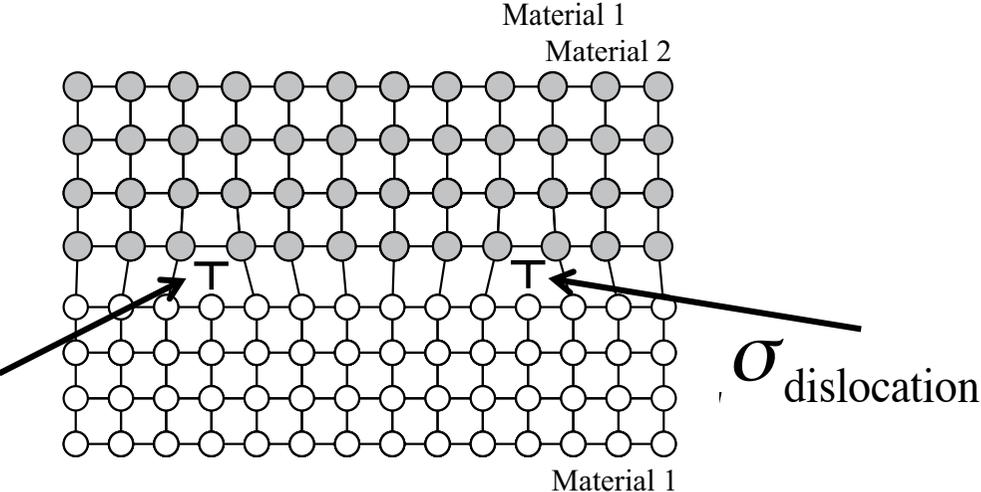
σ_{coherent}



半整合面(semicoherent)

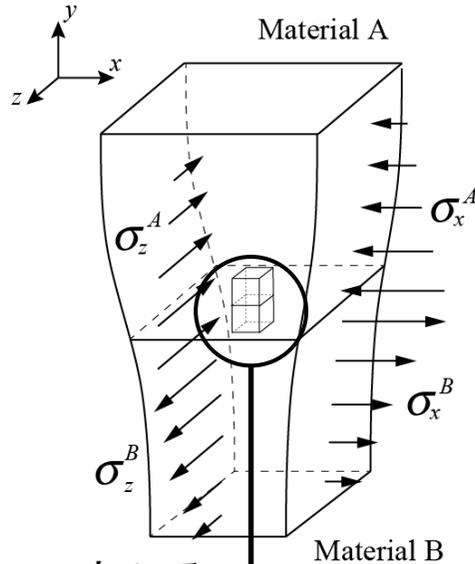
ミスフィット転位周りの応力

$\sigma_{\text{dislocation}}$

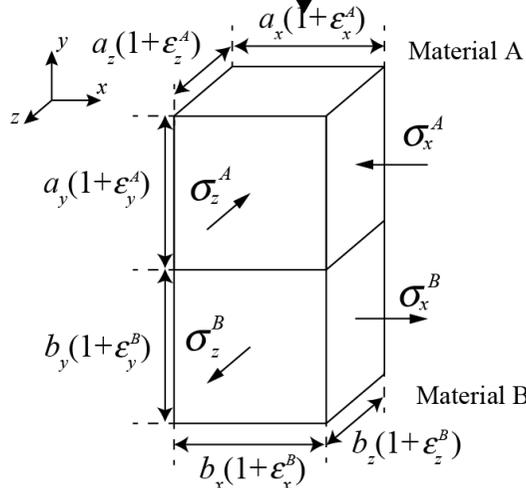


整合面における応力 (異方性弾性論)

整合面における応力 σ_{coherent}



単位格子で考える



条件

・側面の応力は接合面から生じている

$$\sigma_A + \sigma_B = 0$$

・上下面は自由

$$\sigma_{yA} = \sigma_{yB} = 0$$

・材料A, Bの一辺の長さは等しくなる

$$a(1 + \epsilon_A) = b(1 + \epsilon_B)$$

・フックの法則が成立する

$$\epsilon_A = \frac{1}{E_A}(\sigma_A - \nu_A \sigma_A) \quad \epsilon_B = \frac{1}{E_B}(\sigma_B - \nu_B \sigma_B)$$

E : ヤング率

ν : ポアソン比

S : 弾性コンプライアンス

$$\sigma_x^A = -\sigma_x^B = \frac{(a_x - b_x)(a_z S_{zz}^A + b_z S_{zz}^B) - (a_z - b_z)(a_x S_{xz}^A + b_x S_{xz}^B)}{(a_x S_{xz}^A + b_x S_{xz}^B)(a_z S_{xz}^A + b_z S_{xz}^B) - (a_x S_{xx}^A + b_x S_{xx}^B)(a_z S_{zz}^A + b_z S_{zz}^B)}$$

等方性材料と考えると

$$\sigma_A = -\sigma_B = \frac{E_A E_B (b - a)}{(E_A + E_B)(1 - \nu)}$$

σ_{coherent}

転位周りの応力 (異方性弾性論)

ミスフィット転位における応力 $\sigma_{\text{dislocation}}$

境界条件 (Boundary Condition)
(転位を原点とする極座標系)

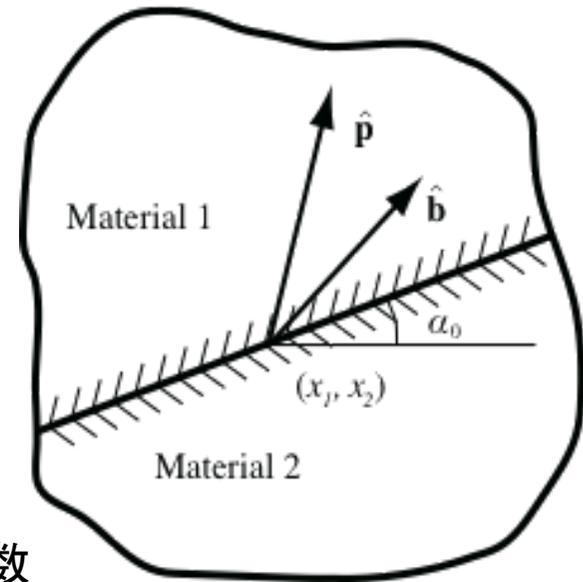
$$\mathbf{u}_1(r, \alpha_0) = \mathbf{u}_2(r, \alpha_0), \phi_1(r, \alpha_0) = \phi_2(r, \alpha_0)$$

$$\phi_1(r, \alpha_0 + \pi) - \phi_2(r, \alpha_0 - \pi) = \hat{\mathbf{p}}$$

$$\mathbf{u}_1(r, \alpha_0 + \pi) - \mathbf{u}_2(r, \alpha_0 - \pi) = \hat{\mathbf{b}}, \nabla_r$$

$$\sigma_{ij} \rightarrow 0, \quad \text{at infinity}$$

- \mathbf{u} : 変位
- Φ : 応力関数
- \mathbf{p} : 集中荷重
- \mathbf{b} : バーガースベクトル
- \mathbf{h}, \mathbf{g} : 実数ベクトル
- $\tilde{\mathbf{N}}^{(k)}$: 基本弾性行列



$$\mathbf{u}_k = \ln r \mathbf{h} + \pi \{ [\tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{h} + [\tilde{\mathbf{N}}_2^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_2^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{g} \}$$

$$\phi_k = \ln r \mathbf{g} + \pi \{ [\tilde{\mathbf{N}}_3^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_3^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{h} + [\tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)T}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)T}(\alpha_0)] \mathbf{g} \}$$

極座標 (r, θ) における応力と応力関数の関係式より

$$\mathbf{t}_\theta = \phi_{,r} \quad \mathbf{t}_r = \phi_{,\theta} / r$$

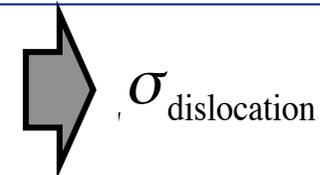
$$\sigma_{\theta\theta} = \mathbf{n}^T \phi_{,r} \quad \sigma_{rr} = -\mathbf{s}^T \phi_{,\theta} / r \quad \sigma_{r\theta} = \mathbf{s}^T \phi_{,r} = -\mathbf{n}^T \phi_{,\theta} / r$$

$$\sigma_{r3} = -(\phi_{,\theta})_3 / r \quad \sigma_{\theta 3} = (\phi_{,r})_3$$

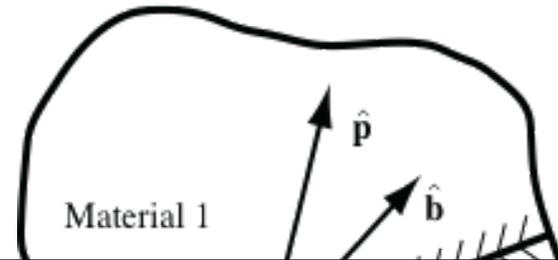
$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{\mathbf{n}^T \mathbf{g}}{r}, \sigma_{rr} = -\frac{\pi \mathbf{s}^T}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]$$

$$\sigma_{r\theta} = \frac{\mathbf{s}^T \mathbf{g}}{r} = -\frac{\pi \mathbf{n}^T}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]$$

$$\sigma_{\theta 3} = \left(\frac{\mathbf{h}}{r} \right)_3, \sigma_{r3} = -\frac{\pi}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]_3$$



転位周りの応力 (異方性弾性論)



ミスフィット転位における応力

境界条件(B) (転位を原点)

$$\mathbf{u}_1(r, \alpha_0) = \mathbf{u}_2(r, \alpha_0)$$

$$\phi_1(r, \alpha_0 + \pi) - \phi_2(r, \alpha_0 + \pi) = b$$

$$\mathbf{u}_1(r, \alpha_0 + \pi) - \mathbf{u}_2(r, \alpha_0 - \pi) = \mathbf{b}, \forall r$$

$$\sigma_{ij} \rightarrow 0, \quad \text{at infinity}$$

$$\mathbf{N}_1 = \mathbf{T}^{-1} \mathbf{R}^T, \quad \mathbf{N}_2 = \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{N}_2^T, \quad \mathbf{N}_3 = \mathbf{R} \mathbf{T}^{-1} \mathbf{R}^T - \mathbf{Q} = \mathbf{N}_3^T,$$

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{16} & C_{15} \\ C_{16} & C_{66} & C_{56} \\ C_{15} & C_{56} & C_{55} \end{bmatrix}, \mathbf{R} = \begin{bmatrix} C_{16} & C_{12} & C_{14} \\ C_{66} & C_{26} & C_{46} \\ C_{56} & C_{25} & C_{45} \end{bmatrix}, \mathbf{T} = \begin{bmatrix} C_{66} & C_{26} & C_{46} \\ C_{26} & C_{22} & C_{24} \\ C_{46} & C_{24} & C_{44} \end{bmatrix}$$

\mathbf{b} : ハーカースベクトル
 \mathbf{h}, \mathbf{g} : 実数ベクトル
 $\tilde{\mathbf{N}}^{(k)}$: 基本弾性行列

$$\mathbf{u}_k = \ln r \mathbf{h} + \pi \{ [\tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{h} + [\tilde{\mathbf{N}}_2^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_2^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{g} \}$$

$$\phi_k = \ln r \mathbf{g} + \pi \{ [\tilde{\mathbf{N}}_3^{(k)}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_3^{(k)}(\alpha_0)] \mathbf{h} + [\tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)T}(\theta) - \tilde{\mathbf{N}}_1^{(k)T}(\alpha_0)] \mathbf{g} \}$$

極座標 (r, θ) における応力と応力関数の関係式より

$$\mathbf{t}_\theta = \phi_{,r} \quad \mathbf{t}_r = \phi_{,\theta} / r$$

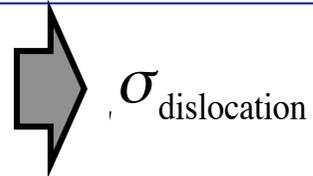
$$\sigma_{\theta\theta} = \mathbf{n}^T \phi_{,r} \quad \sigma_{rr} = -\mathbf{s}^T \phi_{,\theta} / r \quad \sigma_{r\theta} = \mathbf{s}^T \phi_{,r} = -\mathbf{n}^T \phi_{,\theta} / r$$

$$\sigma_{r3} = -(\phi_{,\theta})_3 / r \quad \sigma_{\theta 3} = (\phi_{,r})_3$$

$$\sigma_{\theta\theta} = \frac{\mathbf{n}^T \mathbf{g}}{r}, \sigma_{rr} = -\frac{\pi \mathbf{s}^T}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]$$

$$\sigma_{r\theta} = \frac{\mathbf{s}^T \mathbf{g}}{r} = -\frac{\pi \mathbf{n}^T}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]$$

$$\sigma_{\theta 3} = \left(\frac{\mathbf{h}}{r} \right)_3, \sigma_{r3} = -\frac{\pi}{r} [\mathbf{N}_3^{(k)}(\theta) \mathbf{h} + \mathbf{N}_1^{(k)T}(\theta) \mathbf{g}]_3$$

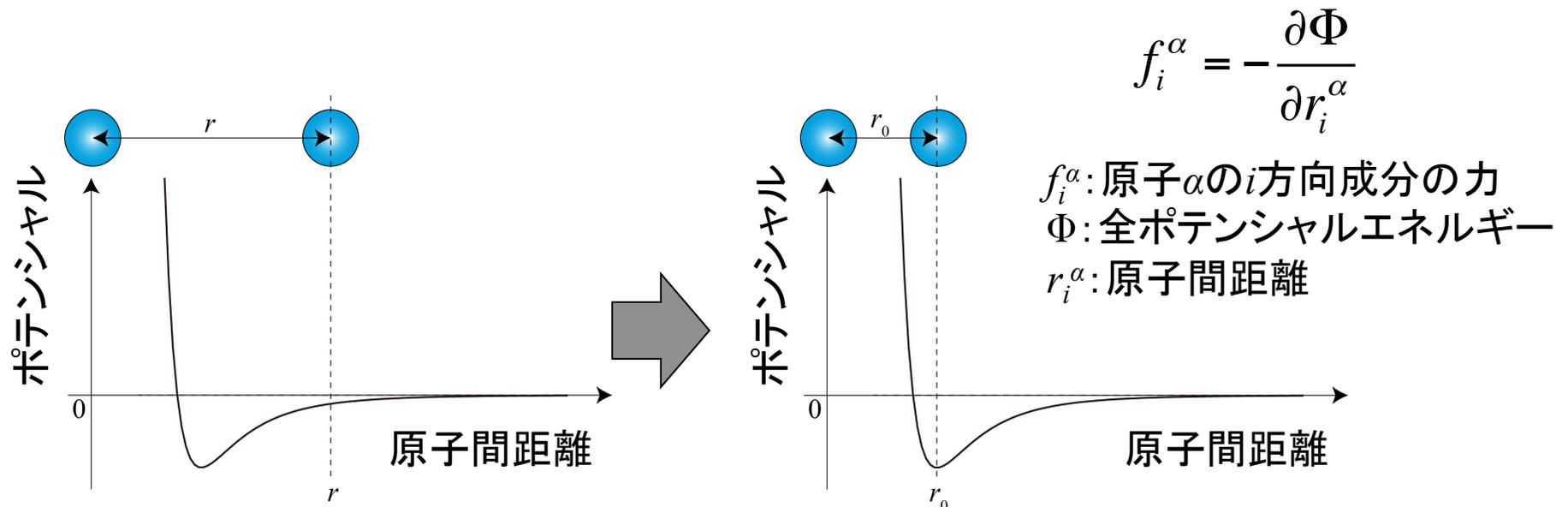


発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

分子静力学法(原子シミュレーション理論)

- 原子間のポテンシャルによって相互作用する質点で近似し, 構造緩和を行うことで系全体のポテンシャルエネルギーを最小化することで系の特性や物性を求めることができる.
- 0Kでの分子動力学法に対応し, 静的に原子構造を取り扱う.
→理想的な系での計算を行うことができる.



原子間ポテンシャル(原子シミュレーション理論)

原子間ポテンシャル → Stillinger-Weberポテンシャル^[4]を使用

二体間ポテンシャルに三体間ポテンシャルを付加した形で表現されるポテンシャルエネルギーで、ダイヤモンド構造のパラメータにフィッティングしている。

全ポテンシャルエネルギー Φ

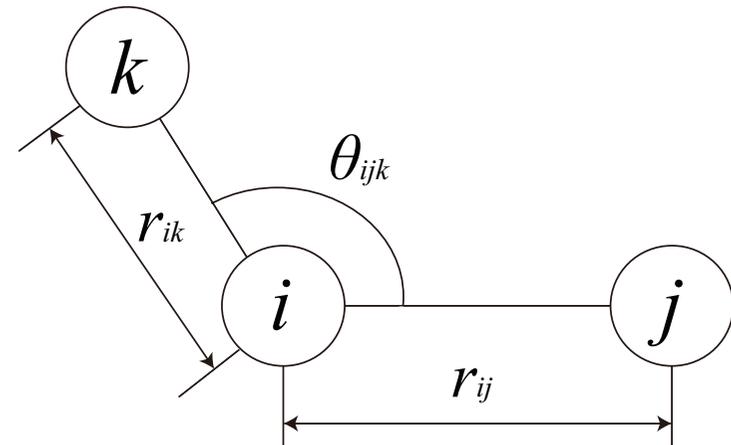
$$\Phi = \sum_i \sum_{j>i} v_2(i, j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} v_3(i, j, k)$$

v_2 : 二体間のポテンシャルエネルギー

v_3 : 三体間のポテンシャルエネルギー

r_{ij}, r_{ik} : 原子*i*と原子*j*, *k*との距離

θ_{ijk} : 原子*i-j*と原子*i-k*の結合角度



[4] Frank H. Stillinger and Thomas A. Weber, Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, Physical Review B, Vol. 31, Num. 8, (1985), 5262.

原子間ポテンシャル(原子シミュレーション理論)

- 二体間ポテンシャル

$$v_2(r_{ij}) = \varepsilon f_2(r_{ij} / \sigma)$$

$$f_2(r) = \begin{cases} A(Br^{-p} - r^{-q}) \exp[(r - a)^{-1}], & r < a \\ 0, & r \geq a \end{cases}$$

- 三体間ポテンシャル

$$v_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = \varepsilon f_3(\mathbf{r}_i / \sigma, \mathbf{r}_j / \sigma, \mathbf{r}_k / \sigma)$$

$$f_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) = h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) + h(r_{ji}, r_{jk}, \theta_{ijk}) + h(r_{ki}, r_{kj}, \theta_{ikj})$$

$$h(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{jik}) = \lambda \exp[\gamma(r_{ij} - a)^{-1} + \gamma(r_{ik} - a)^{-1}] \times (\cos \theta_{jik} + \frac{1}{3})^2$$

ε (eV): 結合エネルギーの決定するパラメータ

σ (Å): 原子間距離を決定するパラメータ

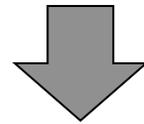
f_2, f_3 : ポテンシャル関数

$A, B, p, q, a, \lambda, \gamma$: ポテンシャルパラメータ

完全結晶のみ適用可能なため,
 $\cos\theta = -1/3$ を使用($\theta = 109.5^\circ$)

力の応力変換式

$$f_i^\alpha = -\frac{\partial \Phi}{\partial r_i^\alpha} \quad \Phi = \sum_i \sum_{j>i} v_2(i, j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} v_3(i, j, k)$$



力 f を以下の式で応力に変換

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial (K + \phi)}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) = -\frac{1}{V} \left(\sum_{\alpha} m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \sum_{\alpha < \beta} \frac{\partial \phi}{\partial r^{\alpha\beta}} \frac{\partial r^{\alpha\beta}}{\partial \varepsilon_{ij}} \right) \\ &= -\frac{1}{V} \left(\sum_{\alpha} m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \sum_{\alpha < \beta} (r_i^{\alpha} - r_i^{\beta}) f_j^{\alpha\beta} \right) \end{aligned}$$

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = -\frac{1}{V^{\alpha}} \left(m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_p^{\alpha}} (r_i^{\alpha} f_j^{\alpha\beta} + r_i^{\beta} f_j^{\beta\alpha}) \right) \quad \rightarrow \quad \text{ひずみ変換}$$

K : 運動エネルギー m : 質量 v : 速度 V_{α} : 原子 α の体積
 N_p^{α} : 原子 α の配位数 σ_{ij} : 系全体の応力 σ_{ij}^{α} : 原子 α の応力

応力のひずみ変換式

	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
Si [5]	166	63.9	79.6
Ge [5]	129	48.3	66.8

分子静力学解析から得られた応力場をひずみ場に変換する方法としてHooke's法則を使用した.

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

σ : 応力
 C : 弾性スティフネス
 ε : ひずみ

これを ε について解くと

$$\varepsilon_{ij} = S_{ijkl} \sigma_{kl}$$

S : 弾性コンプライアンス

SiやGeのような立方晶を持つ材料は, S_{11} , S_{12} , S_{44} の弾性スティフネスから表される

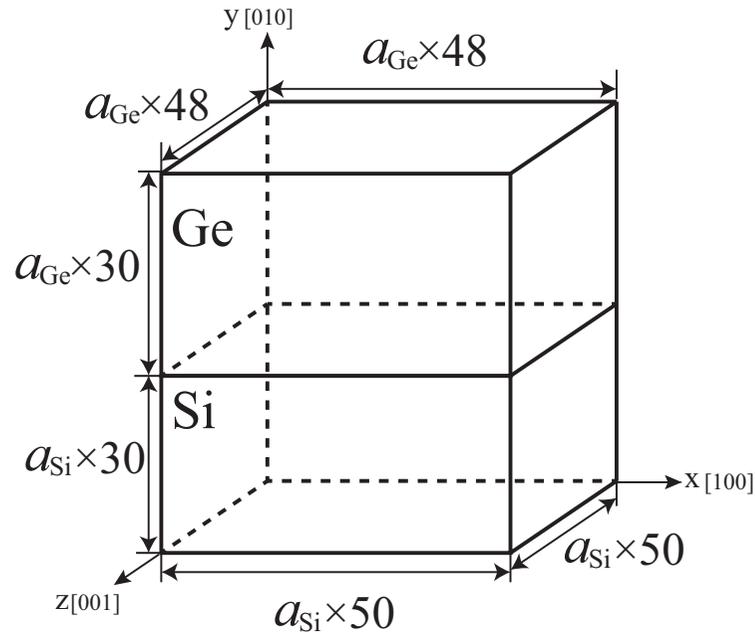
$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & S_{11} & S_{12} & 0 & 0 & 0 \\ & & S_{11} & 0 & 0 & 0 \\ & & & S_{44} & 0 & 0 \\ & Sym. & & & S_{44} & 0 \\ & & & & & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} \end{bmatrix}$$

[5] R. Srinivasan, Lattice theory of third order elastic constants of Germanium and Silicon, *J. Phys. Chem. Solids* Pergamon Press, Vol. 28, (1967), pp. 2385-2369.

発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

解析条件・モデル



Lattice size and lattice size gap.

lattice size Si (Å)	lattice size Ge (Å)	lattice size gap (%)
5.43	5.65	4.1

Model size.

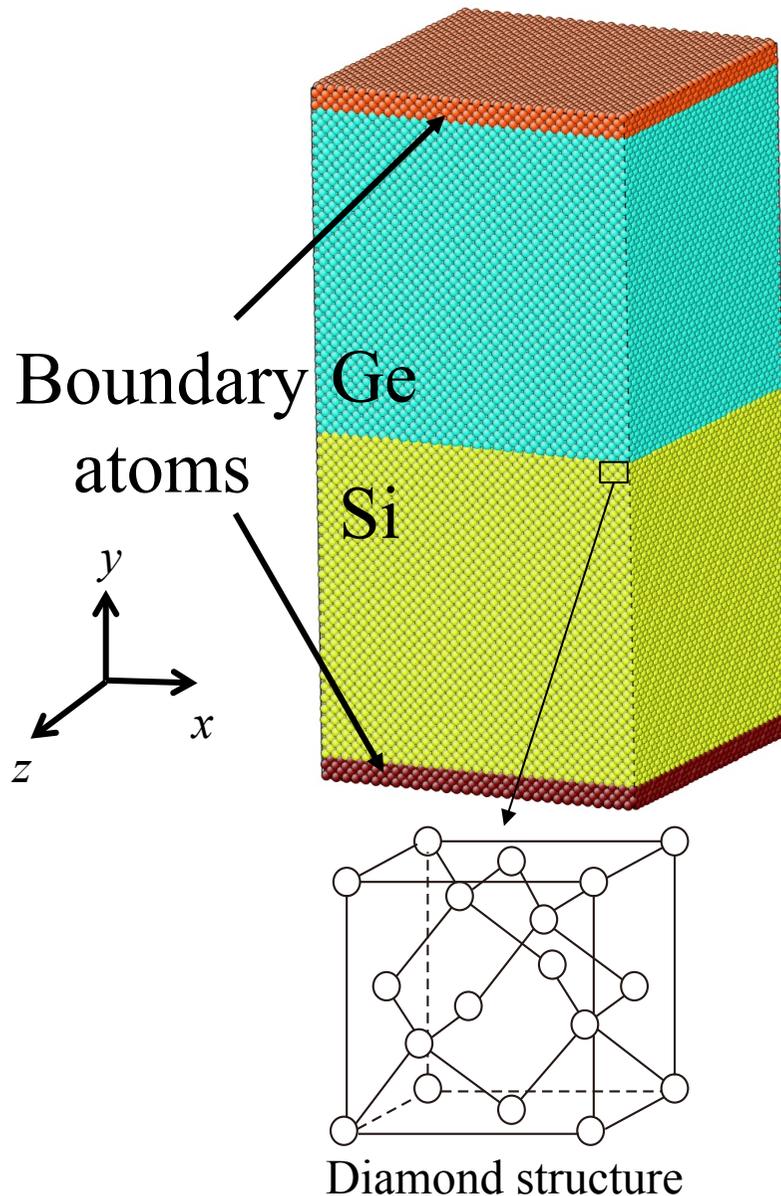
$a_{\text{Si,Ge}}$ (nm)	$a_{\text{Si}} + a_{\text{Ge}}$ (nm)	$a_{\text{Si,Ge}}$ (nm)
27.16	33.27	27.16

SW Potential parameters for Si and Ge^[6].

	ε (eV)	σ (Å)	λ	A	B	p	q	γ	a	$\cos\theta$
Si	2.17	2.095	21.0	7.050	0.602	4.0	0.0	1.20	1.80	-0.333
Ge	1.93	2.181	31.0	7.050	0.602	4.0	0.0	1.20	1.80	-0.333
Si-Ge	2.05	2.138	26	0	0	0	0	1.2	1.8	-0.333

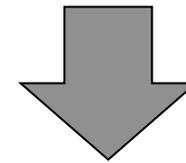
[6] Zi Jian, Modification of Stillinger-Weber potentials for Si and Ge, Physical Review B, Vol. 41, Num. 18, (1990), 12915.

解析条件・モデル

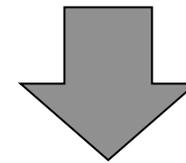


計算手順

ブロックモデルを作成
 x, z 方向に周期境界条件を適用



y 方向の上下2単位格子分を固定

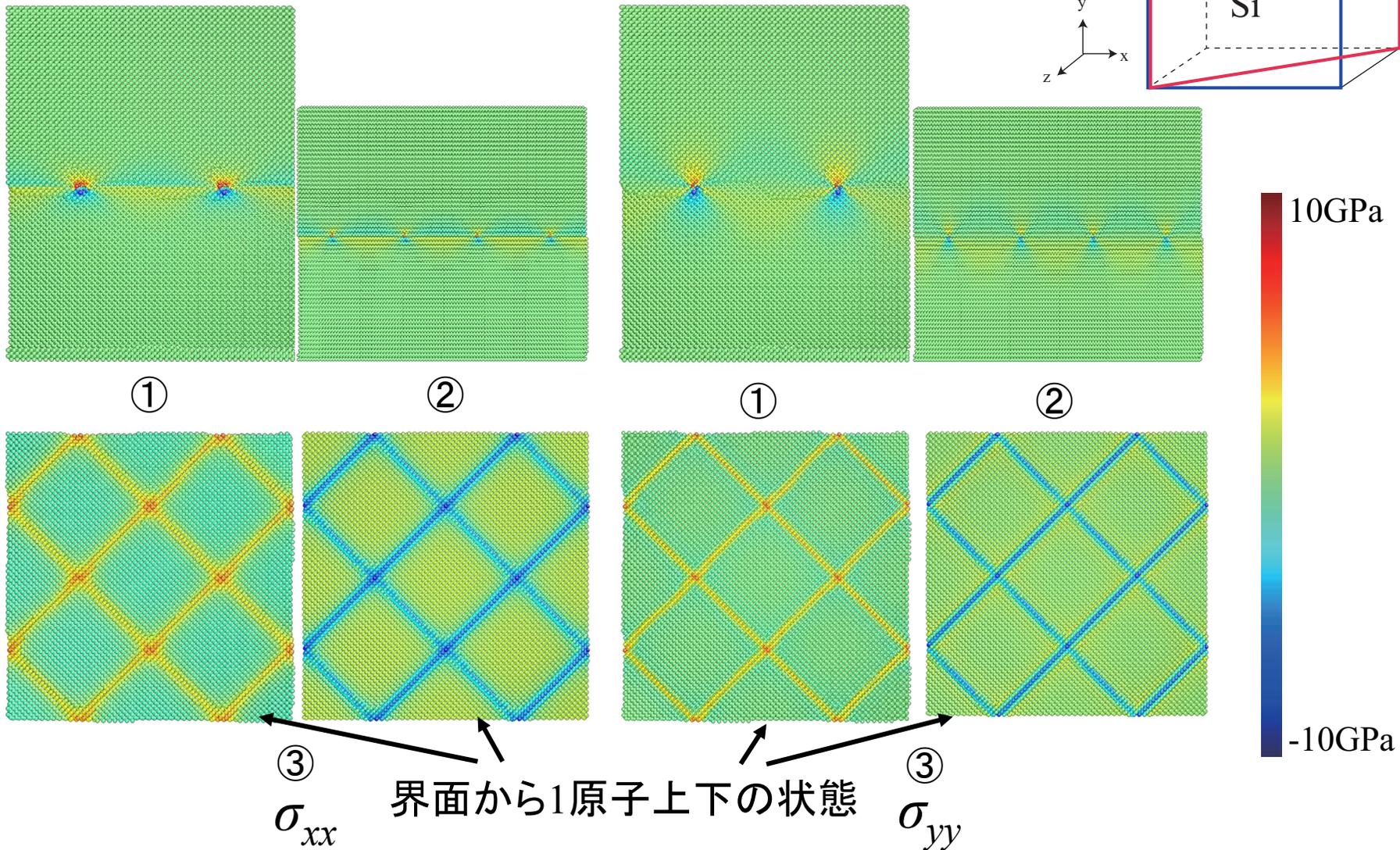
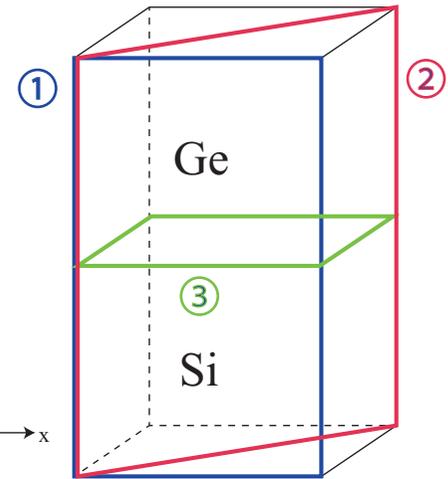


構造緩和計算
→原子が最安定位置になるまで行う

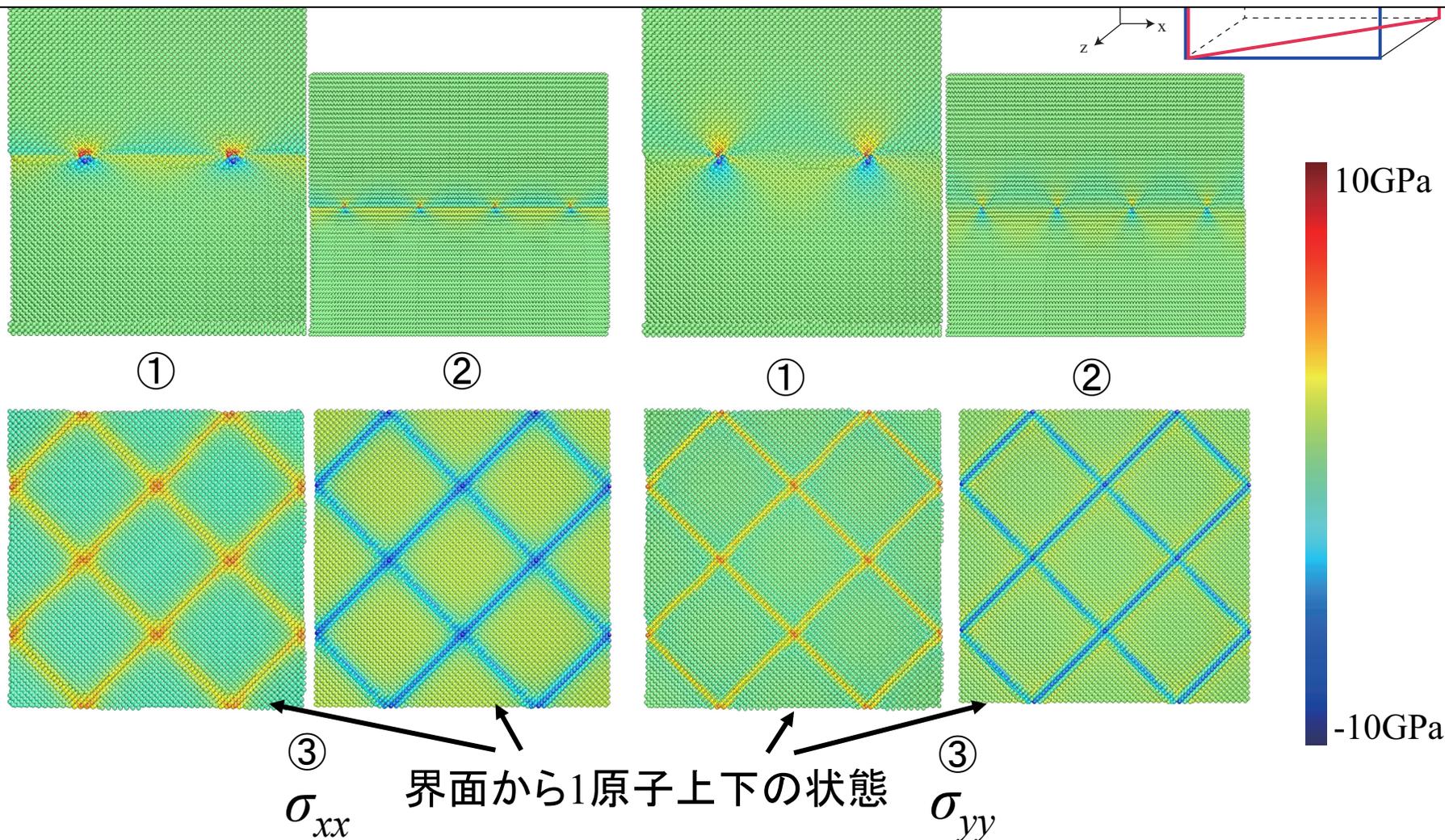
構造緩和計算

LAMMPSを用いて共役勾配法 (CG法) で行う.

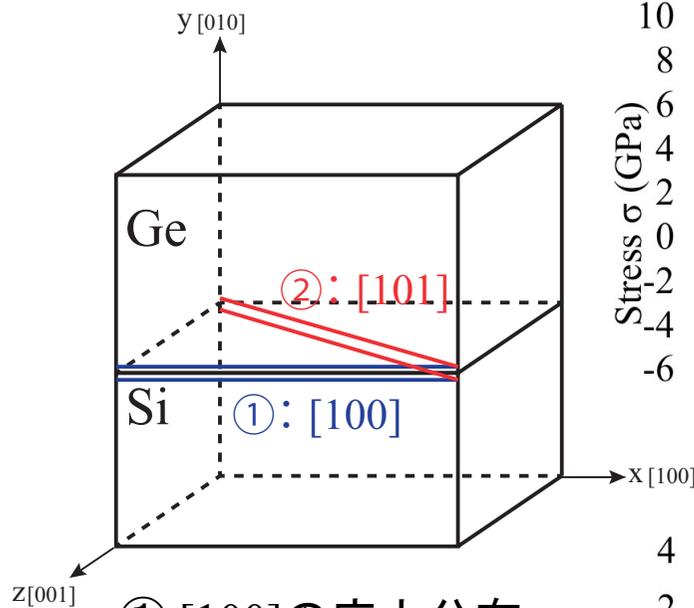
解析結果 (MS解)



- ミスフィット転位の発生による**応力集中** (**Ge側で引張力**, **Si側で圧縮力**)が発生.
- 転位近傍以外の界面では, ミスフィット転位に作用した応力を緩和するために**Ge側で圧縮力**, **Si側で引張力**が生じていた.
- 界面上では**クロス上に転位線**が生じていた.

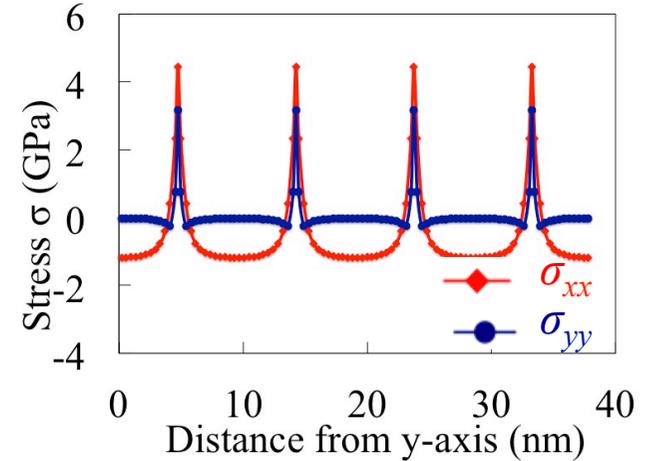
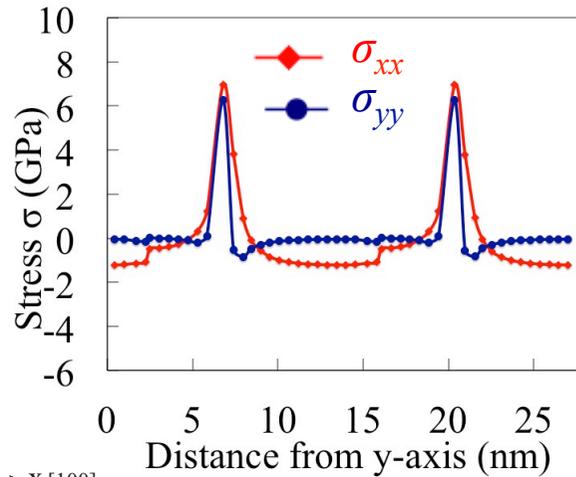


解析結果 (MS解による応力場)

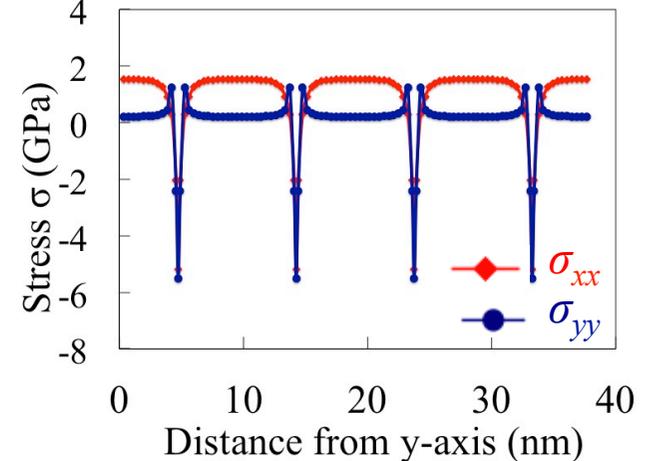
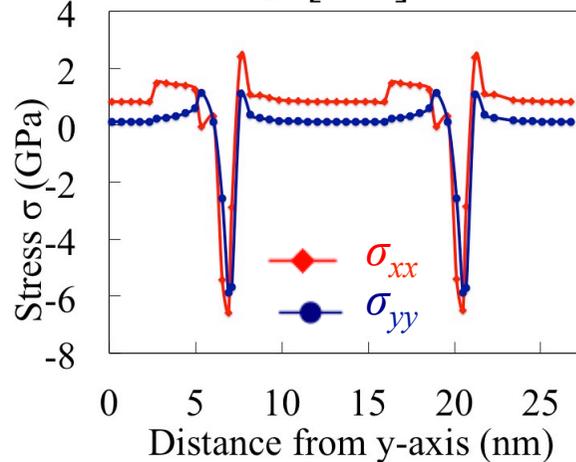


- ① [100]の応力分布 (1原子上下)
- ② [101]の応力分布 (1原子上下)

◆ σ_{xx}
● σ_{yy}



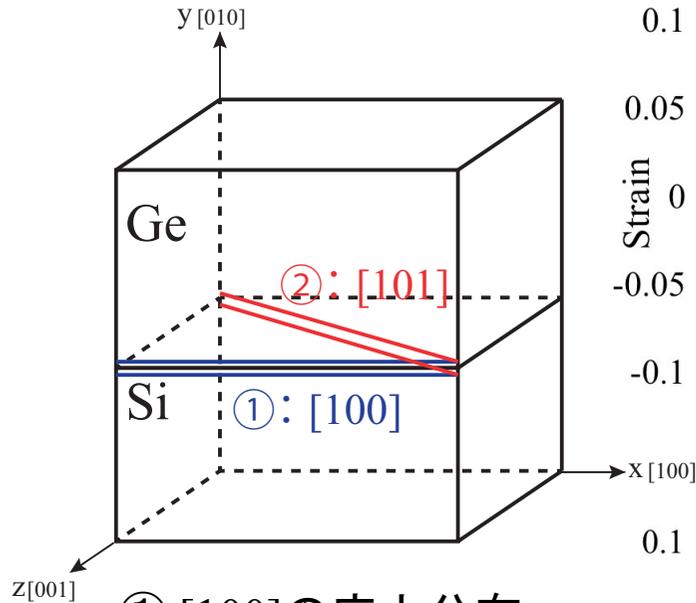
① [100] 界面から1原子上 (Ge側) ② [101]



① [100] 界面から1原子下 (Si側) ② [101]

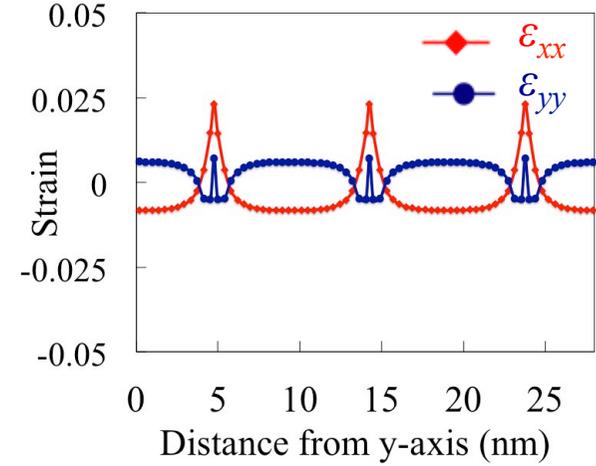
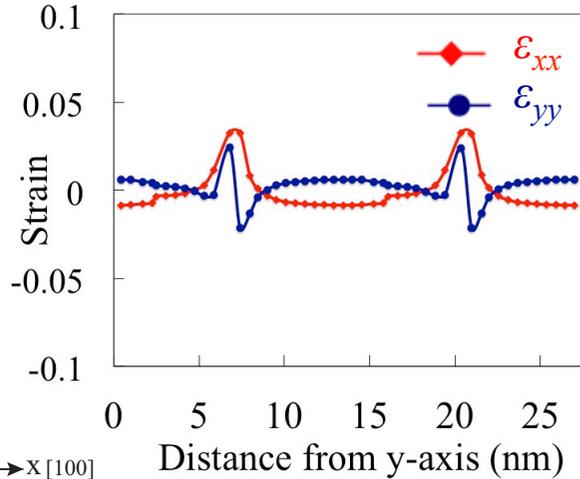
- ミスフィット転位の影響による応力振幅が発生している
- **ミスフィット転位近傍**では**±7GPa**ほど、**転位線上**には**±5GPa**ほどの応力が作用している
- 分子静力学のような理想的な系での計算では、**ミスフィット転位**が**約14nm**毎に発生する

解析結果 (MS解によるひずみ場)

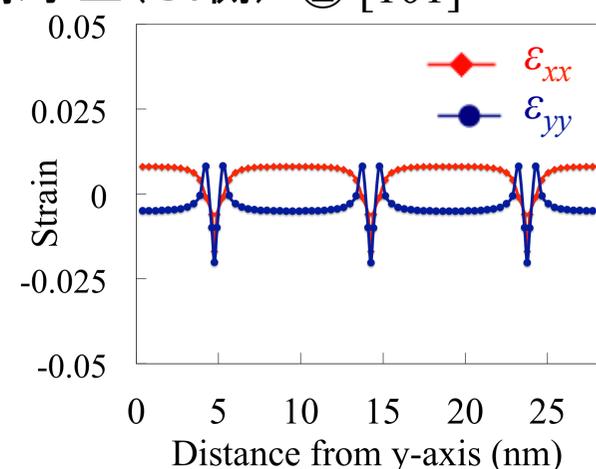
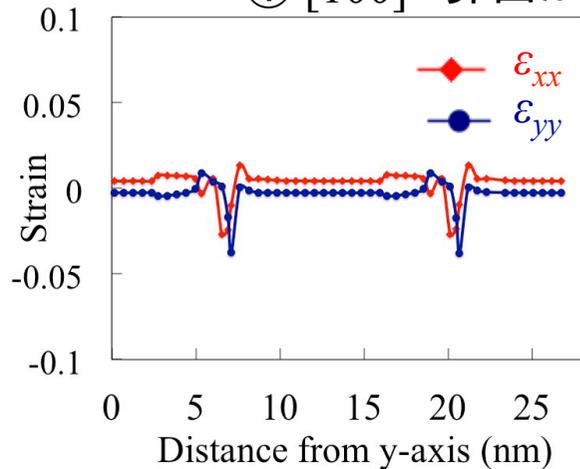


- ① [100]の応力分布 (1原子上下)
- ② [101]の応力分布 (1原子上下)

◆ ϵ_{xx}
● ϵ_{yy}



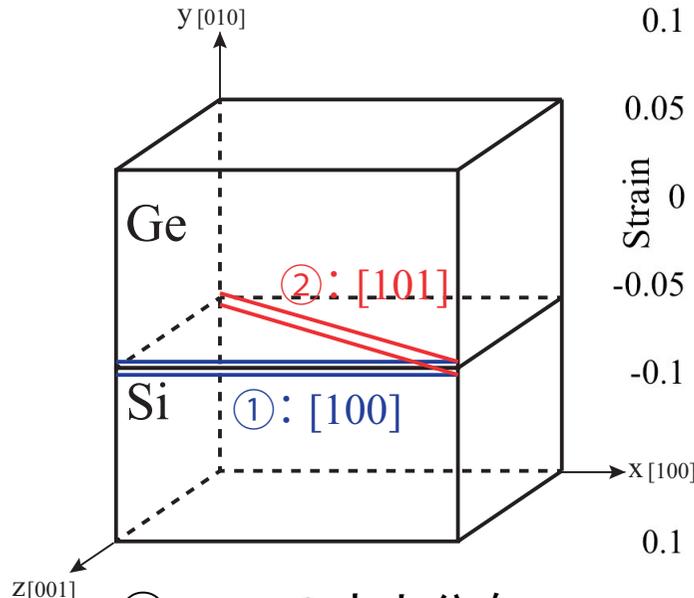
① [100] 界面から1原子上 (Ge側) ② [101]



① [100] 界面から1原子下 (Si側) ② [101]

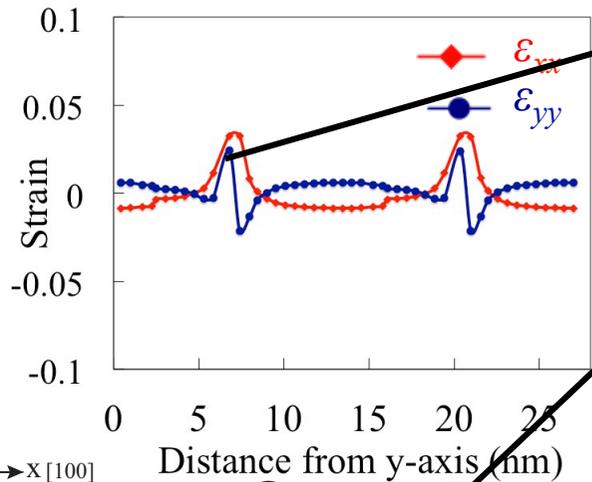
- **ミスフィット転位近傍**では $\pm 3\sim 4\%$ ほど、**転位線上**には $\pm 2\sim 2.5\%$ ほどのひずみが作用している
- Siよりも**Ge**のほうが**ひずみ量**が大きい(**ヤング率の影響**によるもとだと考えられる)。

解析結果 (MS解によるひずみ場)

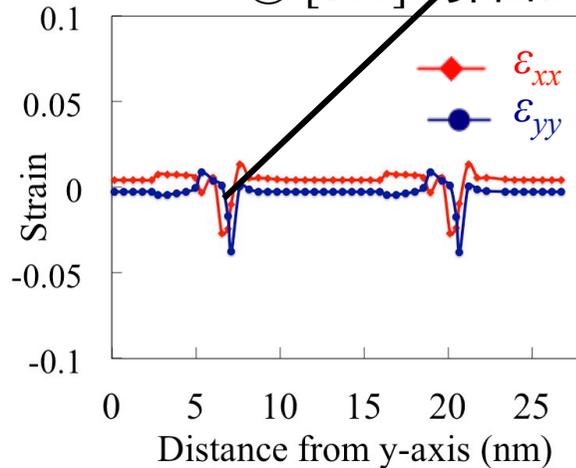
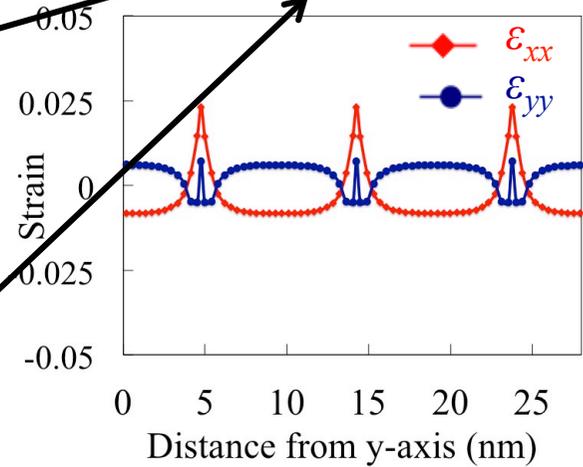


- ① [100]の応力分布 (1原子上下)
- ② [101]の応力分布 (1原子上下)

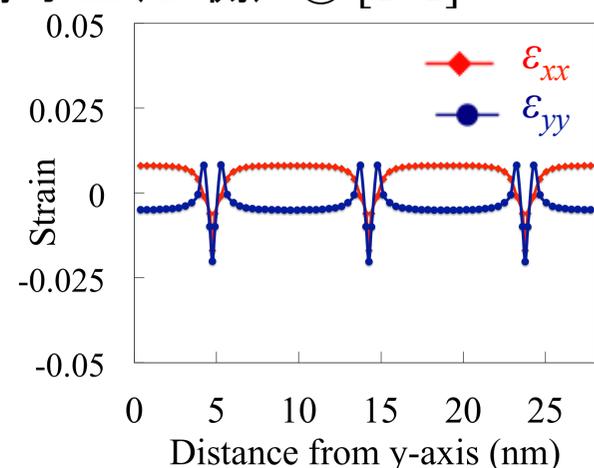
◆ ϵ_{xx}
● ϵ_{yy}



① [100] 界面から1原子上 (Ge側) ② [101]



① [100] 界面から1原子下 (Si側) ② [101]



Ge	Si
$\epsilon_{xx}: 3.3\%$	-2.7%
$\epsilon_{yy}: 3.7\%$	-2.5%

- **ミスフィット転位近傍**では $\pm 3\sim 4\%$ ほど、**転位線上**には $\pm 2\sim 2.5\%$ ほどのひずみが作用している
- Siよりも**Ge**のほうが**ひずみ量**が大きい(**ヤング率の影響**によるもとだと考えられる)。

発表の流れ

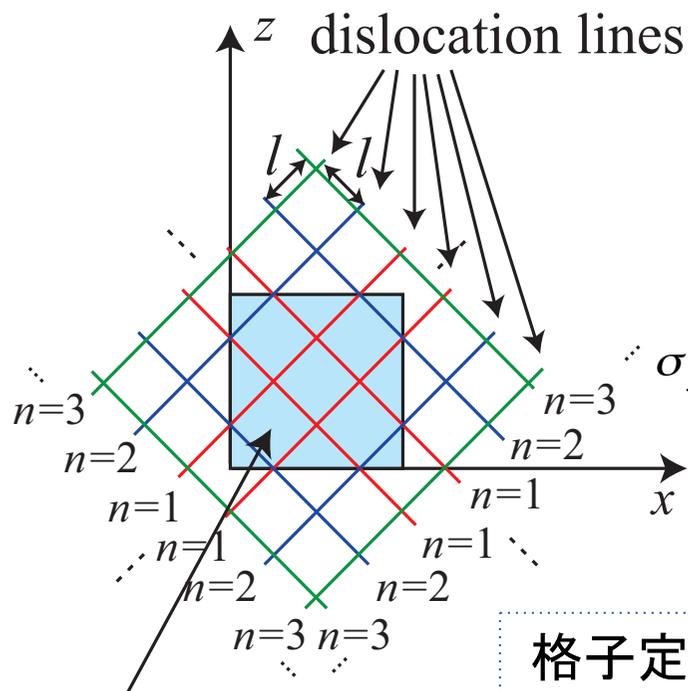
- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

弾性解算出方法

ミスフィット転位を含む異種材界面(半整合面)の応力

$$\sigma_{\text{semicoherent}} = \sigma_{\text{coherent}} + \sum \sigma_{\text{dislocation}}$$

半整合面における応力 整合面における応力 転位周りの応力の重ね合わせ



	lattice size (Å)	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
Si	5.43	166	63.9	79.6
Ge	5.65	129	48.3	66.8

$$a_x = a_z = 5.65 \text{ (Å)} \quad b_x = b_z = 5.43 \text{ (Å)}$$

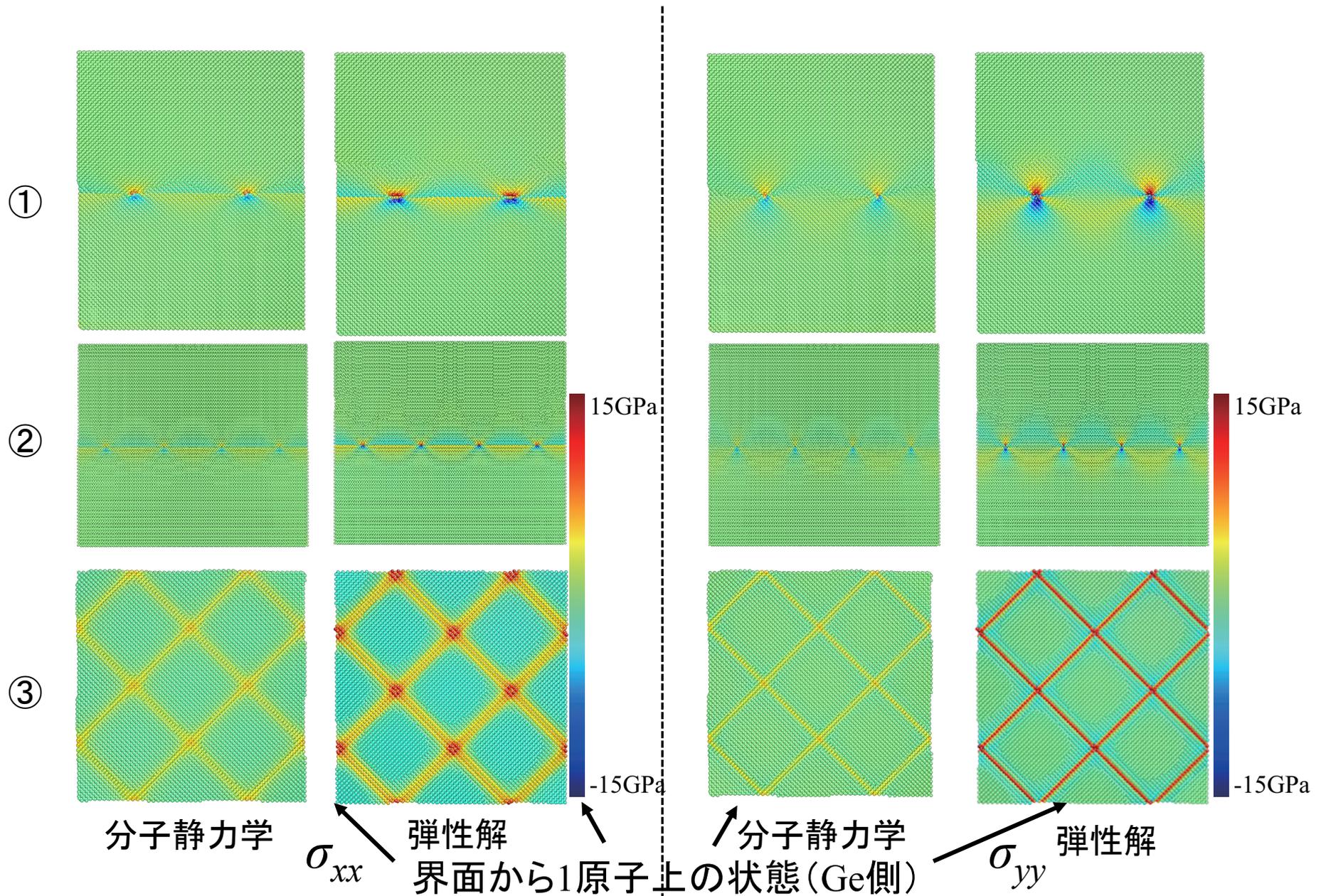
$$\sigma_x^A = -\sigma_x^B = \frac{(a_x - b_x)(a_z S_{zz}^A + b_z S_{zz}^B) - (a_z - b_z)(a_x S_{xz}^A + b_x S_{xz}^B)}{(a_x S_{xz}^A + b_x S_{xz}^B)(a_z S_{xz}^A + b_z S_{xz}^B) - (a_x S_{xx}^A + b_x S_{xx}^B)(a_z S_{zz}^A + b_z S_{zz}^B)}$$

➔ $\sigma_{\text{coherent}} = 3.14 \text{ GPa}$

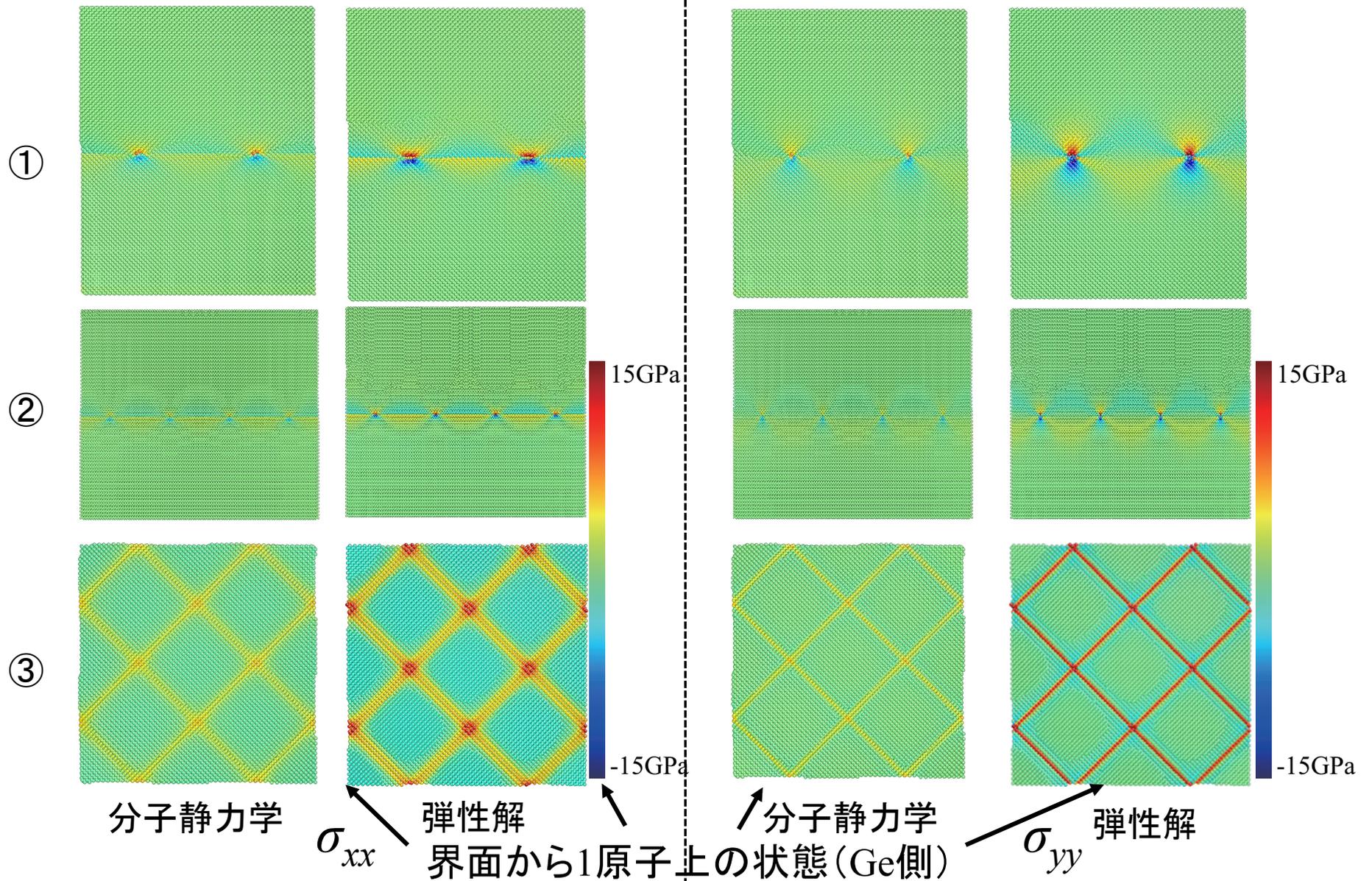
格子定数が小さい材料の最小原子間距離をバーガスベクトルとし, 1000個の転位を重ね合わせることで解析を実施.

Analysis model
(bi-material interface)

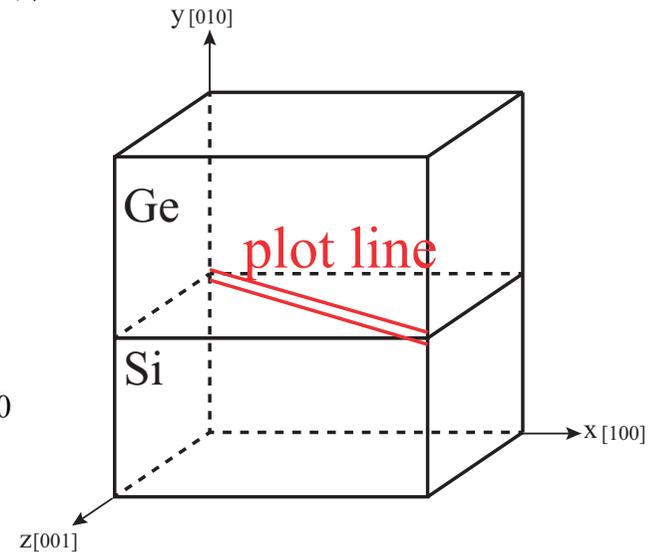
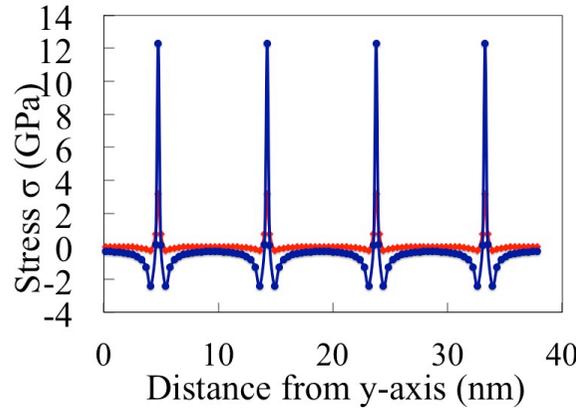
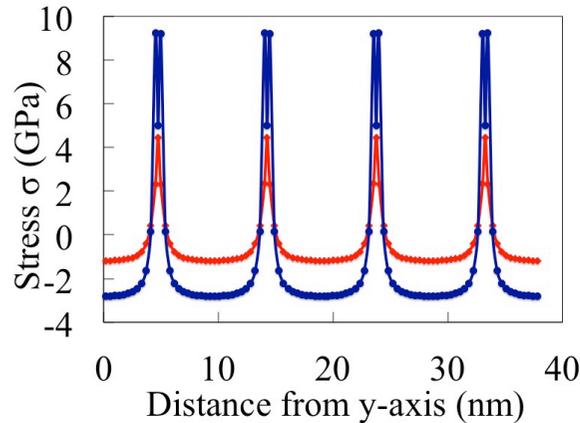
解析結果 (MS解と弾性解の比較)



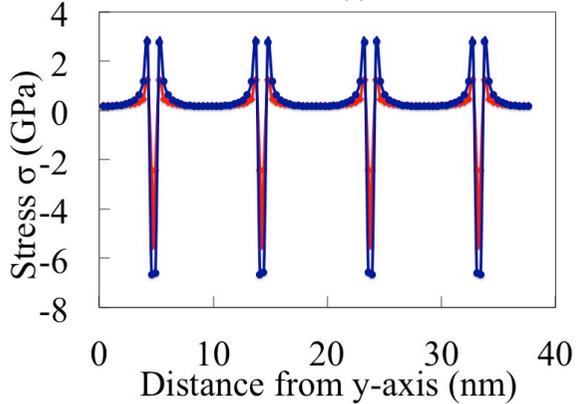
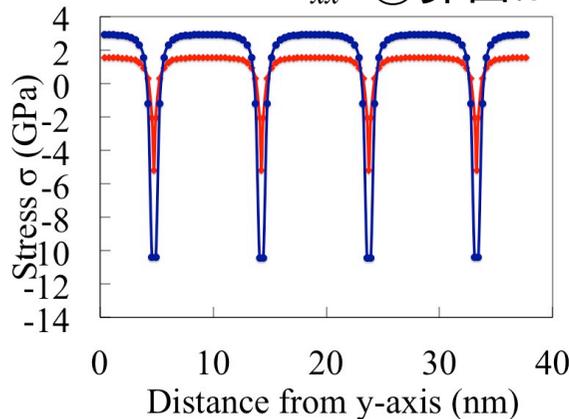
- 分子静力学解析と弾性解の結果が**定性的に一致**している。



解析結果 (MS解と弾性解の比較)



σ_{xx} ①界面から1原子上 (Ge側) σ_{yy}



σ_{xx} ②界面から1原子下 (Si側) σ_{yy}

- ① 界面上部の応力分布 (1原子上)
- ② 界面下部の応力分布 (1原子下)

◆ 分子静力学解析
● 弾性解

σ_{xx}, σ_{yy} とともに転位芯近傍以外で応力分布が**ほぼ一致**している
 → 誤差が1GPa程度と比較的精度よく**応力場を表現**できている

→ 分子静力学では転位芯が**大きさを持つ**が、弾性解では転位芯で応力が**発散**してしまうことにより、転位芯の**大きさを考慮**できていないことが原因である

発表の流れ

- 研究背景・目的
- 解析理論
 - 異方性弾性論
 - 原子シミュレーション理論
- 解析条件・結果
 - 分子静力学解析による応力場・ひずみ場
 - MS解と弾性解の比較
- 結言

結言

分子静力学解析を用いて、格子定数差4.1%を持つGe/Si界面に発生するミスフィット転位近傍の応力場・ひずみ場を評価した。以下に得た知見を示す。

- 分子静力学のような理想的な系での計算では、ミスフィット転位による応力集中が発生し、Ge側で引張力、Si側で圧縮力が作用していた。
- ミスフィット転位近傍には、応力が約 ± 7 GPa, ひずみに換算すると約 $\pm 3\sim 4\%$ 作用していた。
- MS解と弾性解を比較し、転位芯近傍以外で誤差が1GPa程度であり、応力場が比較的一致していた。