

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 修士課程 2年 芝 健太

1. 緒言

電子デバイス内部では多種多様な材料を積層し、異種材料の接合界面が数多く存在する。このような異種材界面では、格子定数の違いによりミスフィット転位が自発的・周期的に発生し、異種材界面の応力場・ひずみ場に大きな影響を与えることが知られている。そこで、本研究では不整合率4.1%である Ge/Si 界面を評価対象とし、その界面に発生するミスフィット転位の応力場・ひずみ場を異方性弾性論^{[1],[2]}と分子シミュレーションの双方から定量的に評価し、積層材料の信頼性向上を図ることを目的とした。また、本論文では今後行う透過型電子顕微鏡に関する理論・評価方法も記載している。

2. 解析理論

論文(2,3,4章)に記載しているため割愛。

3. 解析モデル・解析結果

3.1 解析モデル

本研究では、両材料の格子定数のミスマッチを考慮した単位格子数を並べることで図1に示すようなブロックモデル($hl_x=hl_z=27.2\text{nm}$, $hl_y=33.3\text{nm}$)を作成した。各単位格子はダイヤモンド構造を有し、合計1,152,960原子から構成されている。また、SiとGeの特性はStillinger-Weberポテンシャルを用いて表現し、文献[3]で用いたポテンシャルパラメータを使用した。解析手順としては、モデルの上下2単位格子を固定し、 x, z 方向に周期境界条件を適用した。その後、全原子が最安定位置になるように共役勾配法を用いて構造緩和計算を行い、応力場を求めた。

3.2 解析結果

図2にMS解と弾性解の結果を示し、図3に[101]に y 軸から応力をプロットした結果を示す。結果を見ると、弾性解とMS解が定性的によく一致していることがわかった。また、ミスフィット転位芯近傍以外では誤差が1~1.5GPa程度と比較的一致していることがわかった。しかし、転位芯近傍では一致しておらず、この原因として、転位芯は特異点であり、弾性論ではその大きさを表現できていないことが考えられる。さらに、全体的に分子静力学解析の方が値が小さくなっている原因としては、構造緩和計算で最安定位置に原子

を移動させていることが考えられる。

4. 結言

Ge/Si界面を評価対象に弾性解とMS解を比較し、双方が定性的に一致した。また、転位芯近傍以外では定量的にも比較的一致し、本研究で用いた弾性論は有効であることがわかった。

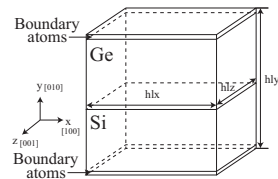


Fig. 1 Analysis model.

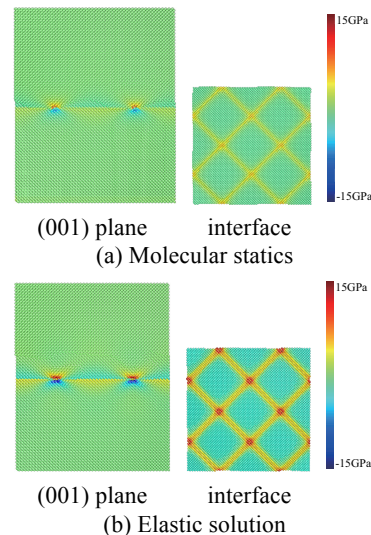


Fig. 2 Distributions of σ_x around the interface between Ge/Si.

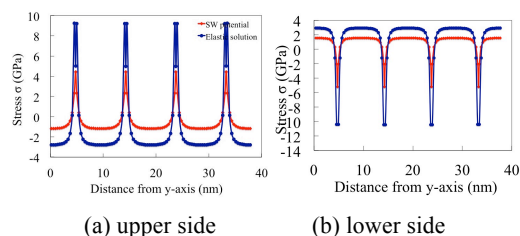


Fig. 3 Distributions of σ_x along [101].

参考文献

[1] C. Hwu, Springer Science+Business Media, (2010), pp. 53-113.
 [2] Ting T.C.T., Oxford University Press, (1996), pp. 134-263.
 [3] Zi Jian, Phy. Rev. B, Vol. 41, Num. 18, (1990), pp. 12915-12918.