

卒業論文

分子動力学法による
Cu-Ru間の界面剥離初期過程の解明

p . 1 - p . 7 2 完

平成19年 2月 2日 提出

指導教員 泉 聡志 助教授

50245 松本 祐樹

目次

| | | |
|--------|-----------------------------|----|
| 第1章 | 序論 | 7 |
| 1.1. | 研究背景 | 7 |
| 1.2. | 本論文の目的 | 7 |
| 1.3. | 本論文の構成 | 8 |
| 第2章 | シミュレーション手法 | 9 |
| 2.1. | 分子動力学法 | 9 |
| 2.1.1. | 分子動力学法について | 9 |
| 2.1.2. | ビジュアライゼーションソフトウェアについて | 10 |
| 2.2. | 界面剥離に対する評価手法 | 11 |
| 2.2.1. | 密着エネルギーによる評価手法 | 11 |
| 2.2.2. | せん断シミュレーション(モード)による評価手法 | 12 |
| 2.2.3. | せん断シミュレーション(モード)による評価手法 | 13 |
| 2.2. | 解析モデルについて | 15 |
| 第3章 | 解析結果 | 18 |
| 3.1. | Cuのz方向が<111>であるモデルの解析結果 | 18 |
| 3.1.1. | 密着エネルギーによる評価 | 18 |
| 3.1.2. | 界面に対する垂直応力による評価 | 19 |
| 3.1.3. | 界面に対するせん断応力による評価 | 29 |
| 3.2. | misfit転位が存在しないモデルの解析結果及び考察 | 33 |
| 3.2.1. | 接合エネルギーによる評価 | 33 |
| 3.2.2. | 界面に対する垂直応力による評価 | 34 |
| 3.2.3. | 界面に対するせん断応力による評価 | 39 |
| 3.2.4. | 界面剥離に対するmisfit転位の影響 | 42 |
| 3.3. | Cuのz方向が<011>であるモデルの解析結果 | 48 |
| 3.3.1. | 接合エネルギーによる評価 | 48 |
| 3.3.2. | 界面に対する垂直応力による評価 | 48 |
| 3.3.3. | 界面に対するせん断応力による評価 | 53 |
| 3.4. | Cuの面方位が<001>であるモデルの解析結果及び考察 | 57 |
| 3.4.1. | 接合エネルギーによる評価 | 57 |
| 3.4.2. | 界面に対する垂直応力による評価 | 57 |
| 3.4.3. | 界面に対するせん断応力による評価 | 62 |
| 3.4.4. | 界面剥離に対するCuの面方位の影響 | 66 |

| | |
|---------------|----|
| 第 4 章 結果..... | 69 |
|---------------|----|

| | |
|-----------|----|
| 参考文献..... | 70 |
|-----------|----|

図目次

| | | |
|------------|--|----|
| Fig.2.1 | 密着エネルギーを求めるために使用する解析モデルの概観..... | 11 |
| Fig.2.2 | 垂直応力に対する解析モデルの初期状態（概観）..... | 12 |
| Fig.2.3 | 垂直応力に対する解析モデルの初期状態（き裂近傍の拡大図）..... | 13 |
| Fig.2.4 | せん断応力に対する解析モデルの初期状態（概観）..... | 14 |
| Fig.2.5 | せん断応力に対する解析モデルの初期状態（き裂近傍の拡大図）..... | 14 |
| Fig.2.6 | せん断ひずみのstep数による変化..... | 15 |
| Fig.2.7 | fcc構造及びhcp構造における原子の積層の様子..... | 16 |
| Fig.2.8 | z方向が<111>であるCuの主すべり面..... | 16 |
| Fig.2.9 | z方向が<011>であるCuの主すべり面（上）とz方向が<001>であるCuの主すべり面（下）..... | 17 |
| Fig.3.1.1 | Cuのz方向が<111>であるモデルの初期状態の概観（密着エネルギー）..... | 18 |
| Fig.3.1.2 | Cuのz方向が<111>であるモデルの初期状態の概観（垂直応力）..... | 19 |
| Fig.3.1.3 | 引っ張りひずみのstep数による変化..... | 20 |
| Fig3.1.4 | 転位射出時の zに与えるeffective strain rateの影響..... | 20 |
| Fig.3.1.5 | Cuのz方向が<111>であるモデルのスナップショット（概観）..... | 23 |
| Fig.3.1.6 | Cuのz方向が<111>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）..... | 24 |
| Fig.3.1.7 | Cuのz方向が<111>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動..... | 25 |
| Fig.3.1.8 | Cuのz方向が<111>であるモデルで主すべり面のせん断応力の解析に使用した部分..... | 26 |
| Fig.3.1.9 | Cuのz方向が<111>であるモデルの主すべり面におけるせん断応力のstep数による変動..... | 26 |
| Fig.3.1.10 | Cuのz方向が<111>であるモデルの のコンター図のスナップショット..... | 27 |
| Fig.3.1.11 | Cuのみのモデルにおける とstrain rateによる変動..... | 28 |
| Fig.3.1.12 | Cuのz方向が<111>であるモデルの初期状態の概観（せん断応力）..... | 29 |
| Fig.3.1.13 | Cuのz方向が<111>であるモデルの界面のスナップショット（せん断応力）..... | 31 |
| Fig.3.1.14 | Cuのz方向が<111>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動..... | 32 |
| Fig.3.2.1 | misfit転位が存在しないモデルのスナップショット（概観）..... | 36 |
| Fig.3.2.2 | misfit転位が存在しないモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）..... | 37 |
| Fig.3.2.3 | misfit転位が存在しないモデルにおける σ_z のstep数による変動..... | 38 |
| Fig.3.2.4 | misfit転位が存在しないモデルの主すべり面におけるせん断応力のstep数による変動..... | 39 |

| | | |
|------------|--|----|
| Fig.3.2.5 | misfit転位が存在しないモデルの界面のスナップショット（せん断応力） ... | 40 |
| Fig.3.2.6 | misfit転位が存在しないモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動 | 41 |
| Fig.3.2.7 | Cuのz方向が<111>であるモデルとmisfit転位が存在しないモデルにおける σ_z のstep数による変動 | 43 |
| Fig.3.2.8 | Cuのz方向が<111>であるモデルとmisfit転位が存在しないモデルにおけるせん断応力とひずみの変動..... | 44 |
| Fig.3.2.9 | Cuのz方向が<111>であるモデルとmisfit転位が存在しないモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動 | 45 |
| Fig.3.2.10 | Cuの<111>面における一般化積層欠陥エネルギー曲線 | 46 |
| Fig.3.3.1 | Cuのz方向が<011>であるモデルのスナップショット（概観） | 50 |
| Fig.3.3.2 | Cuのz方向が<011>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図） | 52 |
| Fig.3.3.3 | Cuのz方向が<011>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動..... | 53 |
| Fig.3.3.4 | Cuのz方向が<011>であるモデルの界面のスナップショット（せん断応力） | 55 |
| Fig.3.3.5 | Cuのz方向が<011>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動..... | 56 |
| Fig.3.4.1 | Cuのz方向が<001>であるモデルのスナップショット（概観） | 59 |
| Fig.3.4.2 | Cuのz方向が<001>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図） . | 61 |
| Fig.3.4.3 | Cuのz方向が<111>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動..... | 62 |
| Fig.3.4.4 | Cuのz方向が<001>であるモデルの界面のスナップショット（せん断応力） . | 64 |
| Fig.3.4.5 | Cuのz方向が<001>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動 | 65 |
| Fig.3.4.6 | Cuのz方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動 | 67 |
| Fig.3.4.7 | Cuのz方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動..... | 68 |

表目次

| | |
|---|----|
| Table.2.1 GEAM ポテンシャルにおける Cu 及び Ru の物性値..... | 10 |
| Table.3.1 転位射出時における Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルの物性値..... | 42 |
| Table.3.2 Cu 及び Ru の γ_{sf} 、 γ_{us} | 46 |
| Table.3.3 GEAM ポテンシャル、第一原理計算、実験による積層欠陥エネルギーの違い | 47 |
| Table.3.4 転位射出時における Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルの物性値..... | 66 |

第1章 序論

この章では、本研究で扱う Cu-Ru 界面の剥離に対する研究の現状と、本研究の目的について述べる。

1.1. 研究背景

Cu-Ru 界面は実験的に剥離強度が強いことが知られていて、Ru は半導体における Cu 配線膜の下地膜や、磁気ディスクにおける次世代材料として期待されている。近年の半導体デバイスや磁気ディスク等の製品は、複数の薄膜材料が積層された構造を持ち、高機能化のために各膜厚を数原子層から数十原子層（ナノメートルオーダー）にまで薄くする必要が生じている。

このような薄膜積層構造の断面には、異種材料界面が高密度で存在することになる。異種材料界面における原子は、界面から離れた、いわゆるバルク領域での原子に比べて動きやすく、欠陥が形成されやすいため、剥離などが発生しやすい。[1]

また薄膜間のような異種材料界面、とくに界面端（自由表面との境界部）では材料の組み合わせと端部形状により、き裂が存在しなくても弾性応力が無限大に発散する特異応力場になるため、破壊に優先的な箇所となる。[2]前述の製品の高性能化においても薄膜間の界面剥離が性能向上を妨げる大きな工学的問題となっていて、界面の正確な剥離強度の評価が急務となっている。

製品の信頼性を確保するためには、剥離強度の高い材料構成で積層構造を形成する必要があるが、従来このような剥離強度の高い材料の組み合わせは、実験による試行錯誤により見出されてきた。今後は製品の高性能化に伴い、使用される薄膜材料の種類が増えていく傾向にあるため、効率的に剥離強度を求める計算技術が必要となっている。

以前は Ru を分子動力学シミュレーションで取り扱うためのポテンシャルが存在しなかったが、当研究室の熊谷らが開発した GEAM ポテンシャルによりシミュレーションを行えるようになった。GEAM ポテンシャルについては第2章で詳しく述べる。

1.2. 本論文の目的

従来、界面の強度評価には、界面端部やき裂先端近傍を連続体近似して取り扱う線形破壊力学に基づいた FEM や BEM といった数値解析手法が用いられてきた。[3]しかしながら、微小構造物においては転位などの微小欠陥の挙動が界面強度の大きな支配要因となるため、

従来の連続体近手法による解析では不十分と考えられる。

そこで本研究では、分子動力学法により、分子スケールから初期界面剥離過程の基本メカニズムを解明することを目的とする。解析対象としては次世代デバイス材料として有望な Cu-Ru の異種金属界面を取り扱う。

1.3. 本論文の構成

本論文は、本章を含めて全5章から構成される。以下に各章の概要を示す。

第1章 序論 では異種材料界面の強度評価の現状及び適用先について述べ、本研究の目的を示した。

第2章 シミュレーション手法 では本研究に用いた分子動力学法の手法と界面剥離に対する評価手法について述べる。

第3章 解析結果 では各モデルの解析結果について述べる。

第4章 考察 では今回の解析に対する考察を述べる。

第5章 結果 では本研究のまとめを述べる。

第2章 シミュレーション手法

2.1. 分子動力学法

2.1.1. 分子動力学法について

分子動力学法は、原子系を古典的な力学法則に支配される他質点系としてモデル化し、その運動方程式を数値的に解析することにより原子配置の時系列データを得て、物質系の巨視特性を評価する方法である。分子動力学法では、原子間に働く力を全ポテンシャルエネルギーの空間勾配として計算される。

分子動力学法では、原子間相互作用を特徴づける経験的ポテンシャルを定義することで、各原子に働く力を評価する。各原子に古典的な力学法則を適用し、ニュートンの運動方程式を数値的に解く。例えば原子数を N とし、 N 原子の初期条件を規定すれば $6N$ 次元の位相空間上にただ一つの軌跡が定まり、各原子の時間発展を決定論的に追従できる。この時、各時間ごとに系の力学量の瞬間値が定義できる。瞬間値の長時間平均が位相空間平均に等しいというエルゴード仮説を用いれば、マクロな物理量を得ることができる。実際のシミュレーションアルゴリズムは、以下に示すように初期構造作成後、2~5 のサイクルを繰り返すことになる。

- 1 . 初期条件作成
- 2 . 周期境界条件に基づき、原子間力を計算する原子対を算出 (Book-keeping 法)
- 3 . ポテンシャルから原子間力を算出
- 4 . Verlet 法により、 t 後の原子位置・速度を評価
- 5 . 物理量の算出
- 6 . 2 に戻る

プログラムには当研究室で使用していたプログラムを一部改良して使用した。そのプログラムでは、以下のようなことが出来る。複数の材料の系を扱うことが出来て、材料の面方位も任意に設定できる。ポテンシャルには GEAM ポテンシャル、johnson ポテンシャル、FS ポテンシャルを使用できる。任意の温度、タイムステップ、総ステップ数を指定できる。数百万オーダーの原子数を取り扱うことが出来る。任意の原子に、任意の強制変位を与えることが出来る。

ポテンシャルには当研究室の熊谷らが作成した GeneralizedEAM (GEAM) ポテンシャル[4]を使用する。GEAM ポテンシャルは fcc、bcc、hcp 構造を最安定構造とする異なる単体金属、並びにこれら元素の任意の組み合わせから成る合金系を表現でき、Cu/Ru 系の界面計算を実現できる。

Table.2.1 に GEAM ポテンシャルの基本物性値を示す。

| | Cu | Ru (misfit 有り) | Ru (misfit 無し) |
|-------------------|-------|------------------|------------------|
| a_0 () | 3.615 | 2.685 | 2.686 |
| c_0 () | - | 4.353 | 4.348 |
| E_0 (eV/atom) | -3.54 | -6.74 | -6.74 |
| B [GPa] | 116.4 | 309.2 | 309.2 |
| μ [GPa] | 54.0 | 128.9 | 117.1 |

Table.2.1 GEAM ポテンシャルにおける Cu 及び Ru の物性値

2.1.2. ビジュアライゼーションソフトウェアについて

本研究ではビジュアライゼーションソフトウェアとして、無料の原子配列可視化ソフトウェア、AtomEye を使用した。

AtomEye には次のような機能がある。

- 描写の仕方は、平行投影法と遠近法の二種類があり、どちらも三次元で操作可能(回転・拡大縮小・平行移動など)。
- 共有結合数と配位数を計算ができる。
- 着色の仕方は、元素の種類による着色のほかに、配位数による着色、ユーザが定義した物性値による着色などができる。
- 着色をユーザが任意に設定できる。
- 原子の局所的なひずみは着色に考慮されない。
- 任意の色の原子を消去できる。
- 任意の面で切断できる。
- 周期境界条件で平行移動させられる。
- JPEG、PNG、EPS での画像保存及びアニメーション作成ができる。

2.2. 界面剥離に対する評価手法

本研究では、界面剥離に対する強度を三つの観点から評価していく。本節では、その三つの評価手法について議論していく。一つ目は接合エネルギーによる評価手法、二つ目は界面に対する垂直応力による評価手法、三つ目は界面に対するせん断応力による評価手法である。

2.2.1. 密着エネルギーによる評価手法

この評価手法は、剥離を生じさせる上で必要なエネルギーを、密着エネルギーによって見積もる手法[5]である。変形によるエネルギーを考慮しなくても良い脆性的な破壊が生じた場合、異種材料の密着した状態と、離れた状態を比較すれば剥離に必要なエネルギーを見積もることが出来る。直感的にも剥離に必要なエネルギーを予測出来るのではないか。

解析モデルの概観をFig.2.1に示す。密着エネルギーは $W_{ad} = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12}$ と定義される。ここで、 γ_1 、 γ_2 は材料1、2のそれぞれの表面エネルギーで、 γ_{12} は、材料1、2間の界面エネルギーである。実際には異種材料が界面を介して密着している系(material-connected state)のポテンシャルエネルギーと、それぞれの材料が単体で存在する系(material-separated state)のポテンシャルエネルギーを比較し、二つのポテンシャルエネルギーの差を単位面積あたりに換算し、算出した。この密着エネルギー W_{ad} が大きいほど、密着性が高い。

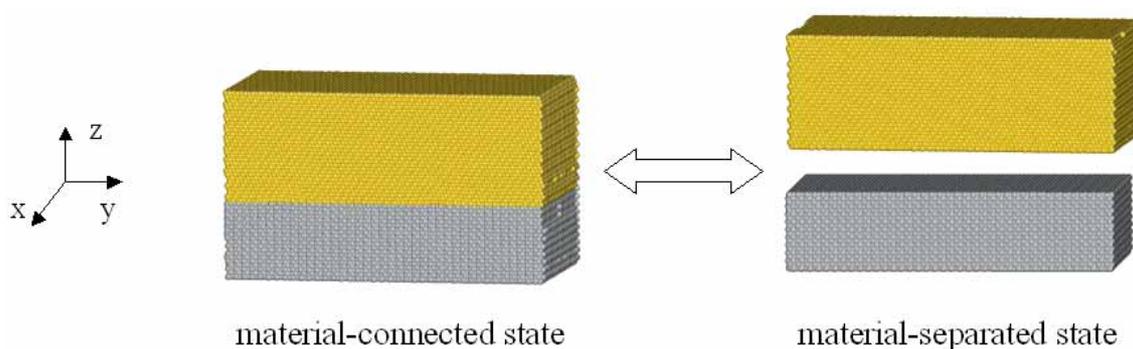


Fig.2.1 密着エネルギーを求めるために使用する解析モデルの概観

Material-connected state と material-separated state のそれぞれを分子動力学法で平衡状態に至るまでシミュレーションを行い、収束したポテンシャルエネルギーを比較した。

ポテンシャルには前述の GEAM ポテンシャルを使用した。計算条件として、温度は 0[K] 一定に保ち、1 step を 1.08[fs]とし、Verlet の時間積分法で運動方程式を解き、全原子の運動を追跡した。x,y 方向は周期境界条件、z 方向は自由境界を適用した。

2.2.2. せん断シミュレーション(モード)による評価手法

この評価手法では、界面に対する垂直応力を加え、垂直応力が転位及びき裂の進展にどのように寄与しているかを検証した。前項の評価手法だと、剥離に至るまでの材料の変形が全く考慮されていない。そこで界面に対する垂直応力を加えて、変形の様子を観察するとともに、面欠陥周辺の応力状態、転位進展の様子などを観察し、それが剥離にどのような影響を与えているかを考察する。

2.2.1 で作成したモデル (material-connected state) の界面上に空洞を挿入し、上下面を変位拘束し z 方向に強制変位を与えて運動方程式を解き、全原子の運動を追跡、き裂及び転位の進展を観察した。モデルの全体図を Fig.2.2 に、き裂近傍の拡大図を Fig.2.3 にそれぞれ示す。

計算条件として、ポテンシャルは前述の GEAM ポテンシャルを使用し、x,y 方向は周期境界条件、z 方向は自由境界を適用した。温度は 1[K]で一定に保ち、1step を 1.08[fs]とした。モデルの z 方向の上下端面それぞれ 7 層を変位拘束し、計算の始めに 5000step(5.4[ps]) の緩和計算を行った後、拘束原子に対して強制変位を与えた。

強制変位の大きさはひずみ速度に換算して与えたが、ひずみ速度については、第 3 章で議論を行う。またその他のモデルごとに異なる条件についても第 3 章で記述する。

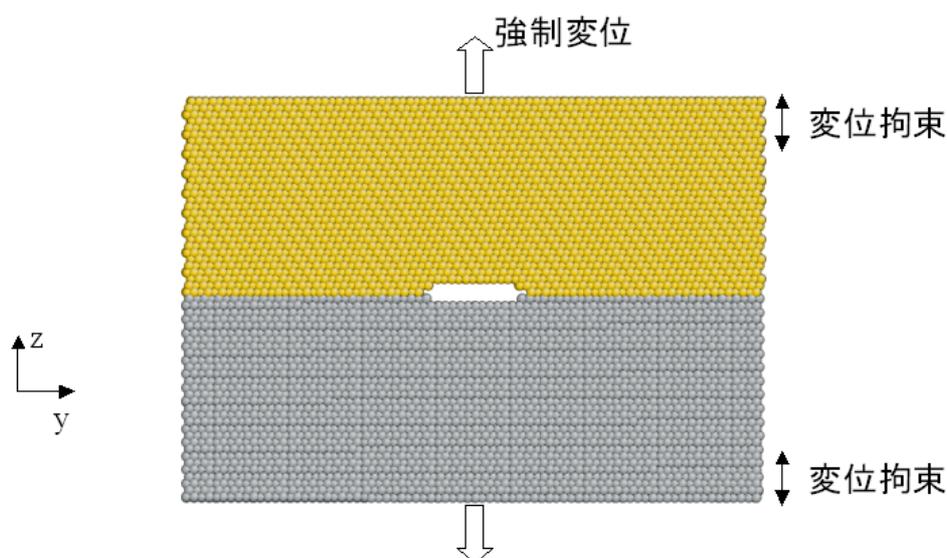


Fig.2.2 垂直応力に対する解析モデルの初期状態 (概観)

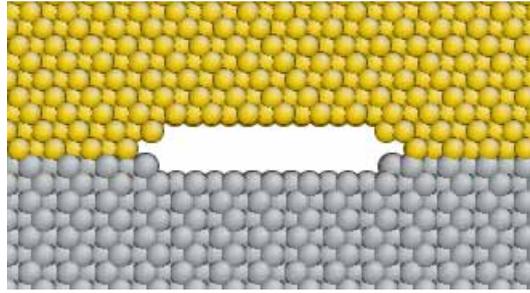


Fig.2.3 垂直応力に対する解析モデルの初期状態（き裂近傍の拡大図）

2.2.3. せん断シミュレーション(モード)による評価手法

この評価手法では、界面に対するせん断応力を加え、せん断応力が転位及びき裂の進展にどのように寄与しているかを検証した。界面剥離には、界面に対する垂直応力だけではなく、せん断応力も寄与していると考えられる。そこで界面に対するせん断応力を加えて、変形の様子を観察するとともに、面欠陥周辺の応力状態、転位進展の様子などを観察し、それが剥離にどのような影響を与えているかを考察する。

モデルの全体図を **Fig.2.4** に、き裂近傍の拡大図を **Fig.2.5** に示す。**2.2.2** と異なる点は、空洞を界面端部に挿入したこと、強制変位を y 方向に与えたこと、境界条件を x 方向のみ周期境界条件とし、 y 、 z 方向は自由境界にしたこと、である。界面上に作成したき裂の y 方向長さは $6.0[\text{nm}]$ 、 z 方向長さは $0.65[\text{nm}]$ である。

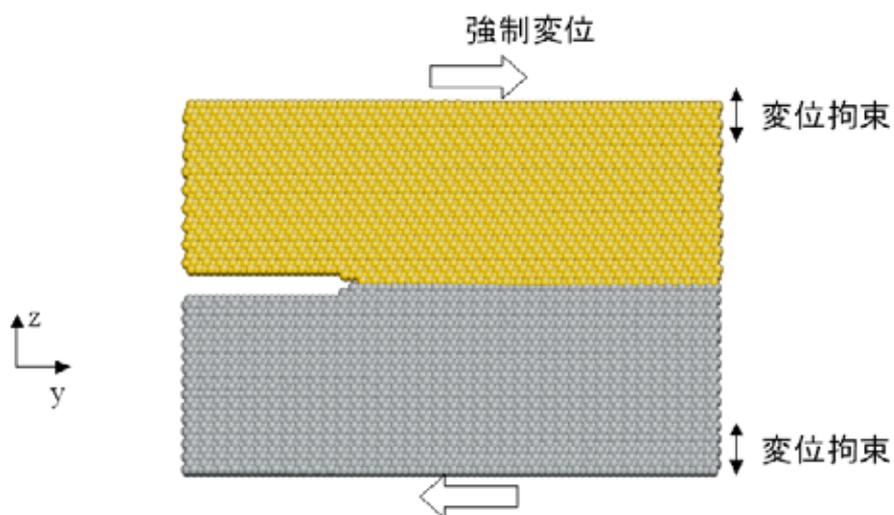


Fig.2.4 せん断応力に対する解析モデルの初期状態（概観）

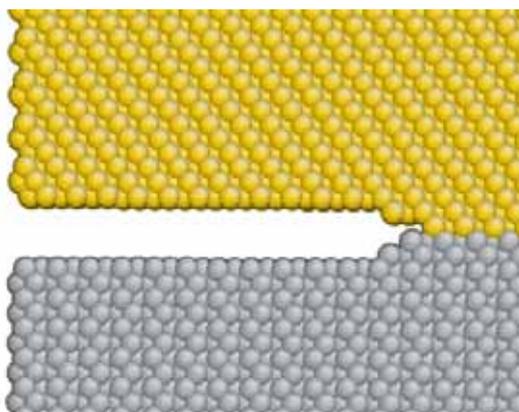


Fig.2.5 せん断応力に対する解析モデルの初期状態（き裂近傍の拡大図）

2.2.2 と同じく、ポテンシャルに GEAM ポテンシャルを使用し、温度は 1[K] で一定に保ち、1step を 1.08[fs] とした。計算の始めに 5000step (5.4[ps]) の緩和計算を行い、その後強制変位を与えた。総 step 数は 25,000step (27ps) である。

強制変位の step 変動を Fig.2.6 に示す。5000step の緩和計算を行った後に、100step (0.1[ps]) の間強制変位を与え、100step (0.1[ps]) の間緩和計算を行うことを繰り返した。強制変位はひずみ速度 $\dot{\epsilon} = 4.5 \times 10^{-4}$ [m/s] 相当とした。

その他、各解析モデルで異なる計算条件については第 3 章で記述する。

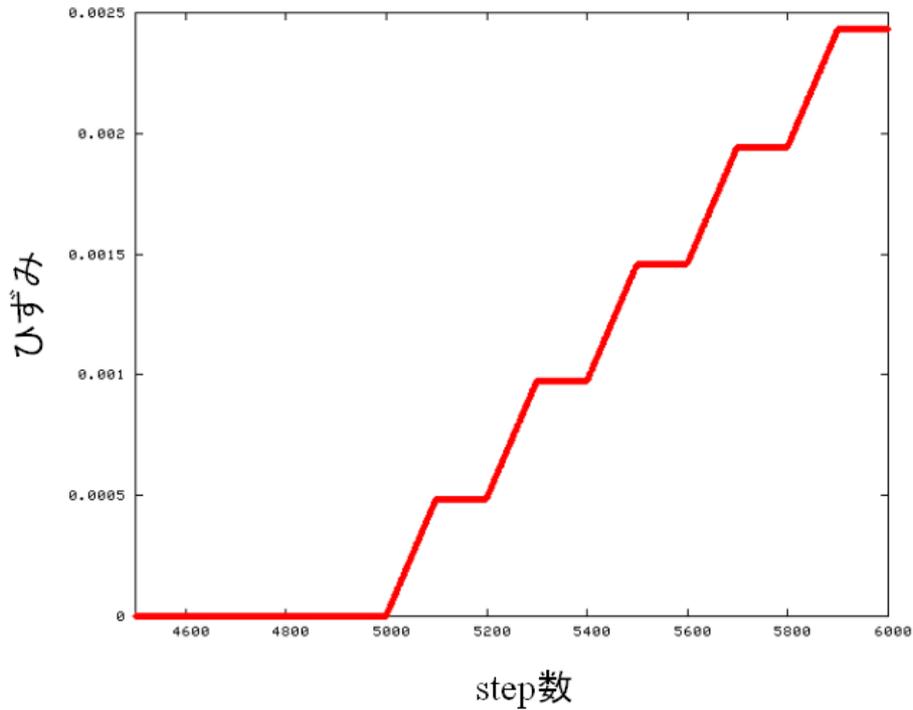


Fig.2.6 せん断ひずみの step 数による変化

2.2. 解析モデルについて

本研究では、大きく分けて3種類の解析モデルについてシミュレーションを行った。本節ではそれぞれのモデルについて記述する。本研究では界面に存在する misfit 転位と Cu の面方位が界面剥離にどのような影響を与えるのかを考察する。最初に基準となるモデルについて検証を行った後、比較対象として、misfit 転位が存在しないモデル及び Cu の面方位を変更したモデルについて検証していく。misfit 転位とは、格子定数の異なる二つの材料の界面に出来る転位のことである。

最初のモデルは現実的なモデルである。misfit 転位が存在し、Cu の面方位は $z:\langle 111 \rangle$, $x:\langle 10-1 \rangle$, $y:\langle -12-1 \rangle$ である。Ru の面方位についてはどのモデルも $z:\langle 0001 \rangle$, $x:\langle 11-20 \rangle$, $y:\langle -1100 \rangle$ とした。

Cu は fcc 構造、Ru は hcp 構造が最安定構造である。fcc 構造及び hcp 構造における原子の積層の様子を Fig.2.7 に示す。Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルでは、Cu の z 方向が Fig.2.7 の左下の図での紙面鉛直上方に当たり、Ru の z 方向が Fig.2.7 の右下の図での紙面鉛直上方に当たる。この面方位は界面の misfit 転位が最も少なくなる。よってこのモデル

を基準とした。Fig.2.8 にこのモデルに Cu における転位のすべり面を示す。

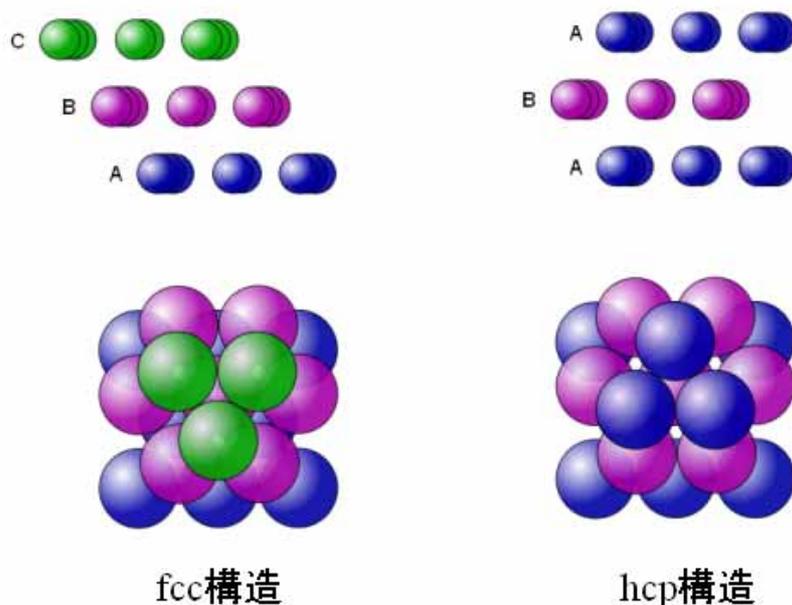


Fig.2.7 fcc 構造及び hcp 構造における原子の積層の様子

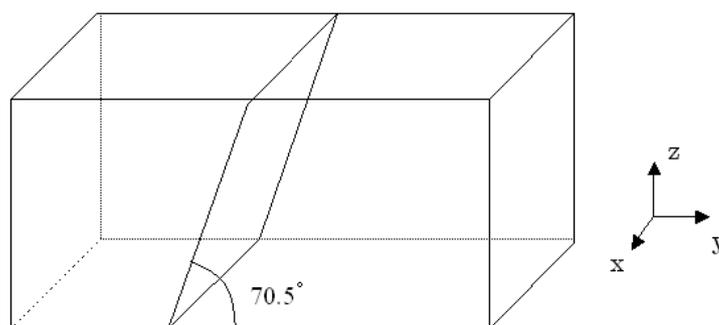


Fig.2.8 z 方向が $\langle 111 \rangle$ である Cu の主すべり面

次のモデルは misfit 転位が存在しない仮想的なモデルである。Cu 及び Ru の面方位は最初のモデルと同じである。Cu の側の主すべり面は最初のモデルと等しい。

異種材料界面はコヒーレントな状態と、インコヒーレントな状態になり得る。インコヒーレントな状態とは、材料が弾性変形を起こしておらず、misfit 転位が存在する状態であり、これは最初のモデルの状態である。一方コヒーレントな状態とは、どちらかの材料が弾性変形を起こしていて、misfit 転位が存在する状態である。ここではき裂及び転位の進展に misfit 転位が与える影響のみを検証するため、弾性変形による影響を除去する。つまり

misfit 転位は存在しないが、弾性変形も生じていない状態を作成する。

この状態を実現するため、Ru の GEAM ポテンシャルに、格子定数を Cu の格子定数を等しくしたものを使用した。その他の材料特性については、格子定数を変化させる前と等しい。

このような Ru は現実には存在しないが、モデルとして取り上げた理由として、misfit 転位が界面剥離に与える影響や部分転位射出への影響を検証すること、物性値を比較すること、が挙げられる。

最後は Cu の面方位を変更したモデルである。ここでは Cu の面方位が z : $\langle 110 \rangle$, x : $\langle 001 \rangle$, y : $\langle -110 \rangle$ のモデルと、 z : $\langle 001 \rangle$, x : $\langle 100 \rangle$, y : $\langle 010 \rangle$ の二つのモデルについてシミュレーションを行った。この二つのモデルにおける Cu の主すべり面を Fig.2.9 に示す

微小構造物においては転位などの微小欠陥の挙動が界面強度の大きな支配要因となるが、面方位が変わると転位の射出されるすべり面も回転する。つまり転位が射出される方向が異なってくる。そのことが界面剥離に与える影響について検証する。

この二つと最初のモデルより、Cu の面方位が界面剥離に与える影響について検証した。

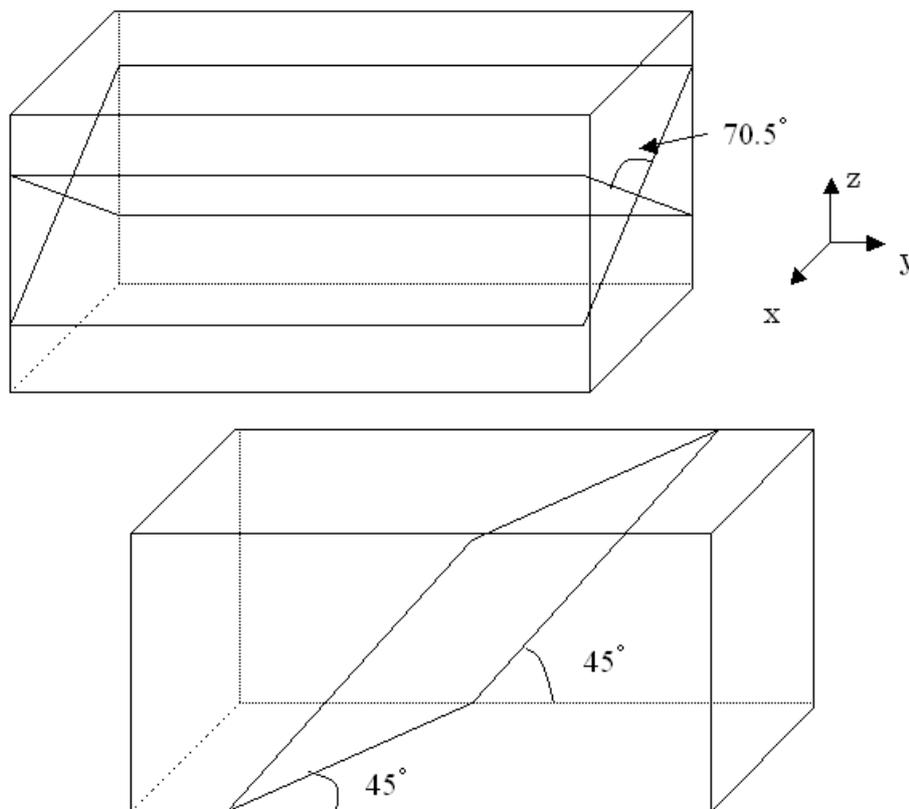


Fig.2.9 z 方向が $\langle 011 \rangle$ である Cu の主すべり面 (上) と z 方向が $\langle 001 \rangle$ である Cu の主すべり面 (下)

第3章 解析結果

本章では、前章の方法で各モデルを解析した結果について論じていく。

3.1. Cu の z 方向が<111>であるモデルの解析結果

本節では Cu の面方位の z 方向が<111>であり、界面に misfit 転位が存在するモデルについての解析結果について論じる。

3.1.1. 密着エネルギーによる評価

Fig.3.1.1 に解析モデルを示す。

material-connected state の計算系 (Cu-Ru 系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=10.6\text{nm}$ であり、総原子数は 161,700 個とした。material-separated state の Cu の計算系 (Cu 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=6.3\text{nm}$ で、総原子数を 100,860 個、一方 Ru の計算系 (Ru 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=4.3\text{nm}$ であり、総原子数を 60,840 個とした。

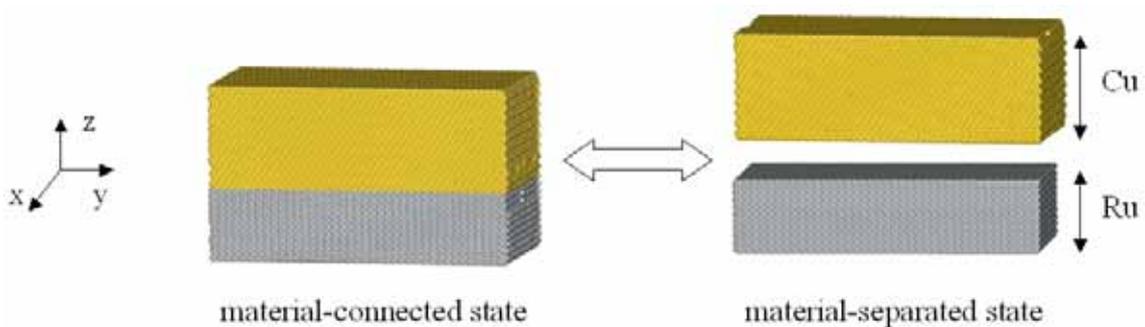


Fig.3.1.1 Cu の z 方向が<111>であるモデルの初期状態の概観 (密着エネルギー)

平衡状態のエネルギーを求めると Cu-Ru 系が $-760,091[\text{eV}]$ 、Cu 単体系が $-353,477[\text{eV}]$ 、Ru 単体系が $-401,200[\text{eV}]$ となった。material-connected state と material-separated state の差は $5,414[\text{eV}]$ であり、これを界面の面積で割り、単位面積あたりに換算し、単位変更を行うと、 $4.56[\text{J}/\text{m}^2]$ であった。

3.1.2. 界面に対する垂直応力による評価

Fig3.1.2 に解析モデルの全体図を示す。

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=12.8\text{nm}$ であり、総原子数を 190,545 個とした。

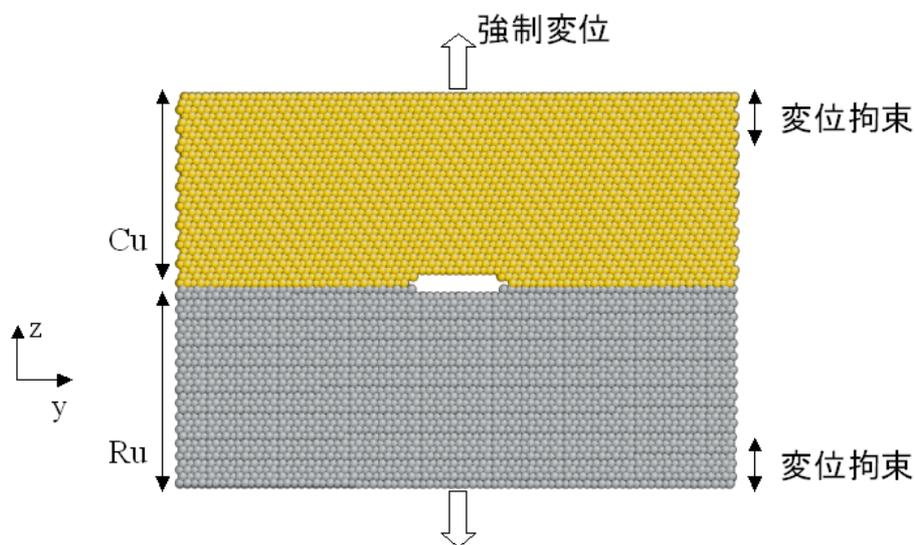


Fig.3.1.2 Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルの初期状態の概観 (垂直応力)

ここで強制変位の与え方について論じていく。強制変位の step 変動を Fig.3.1.3 に示す。実際のシミュレーションで強制変位は、Fig.3.1.3 の real strain rate のように 100step(0.1[ps])の間、強制変位を与えて、その後 100step(0.1[ps])の間、緩和計算を行うことを繰り返した。

強制変位の与え方が転位の進展にどのように寄与しているかを観察するため、Fig.3.1.3 の effective strain rate を考えた。強制変位間の緩和計算がなく、強制変位が常に与えられたと仮定した場合の一定値を effective strain rate とした。強制変位をいくつかの条件で与え、最初の転位が射出されるとききの σ_z に対する effective strain rate の影響を Fig.3.1.4 にまとめた。

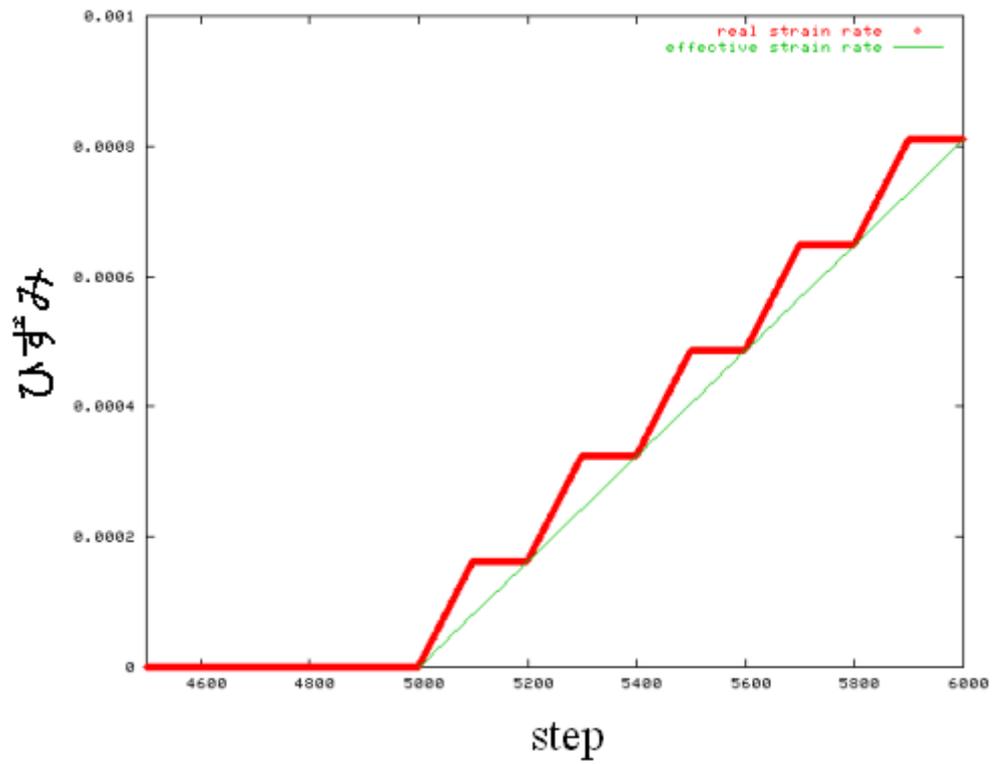


Fig.3.1.3 引っ張りひずみの step 数による変化

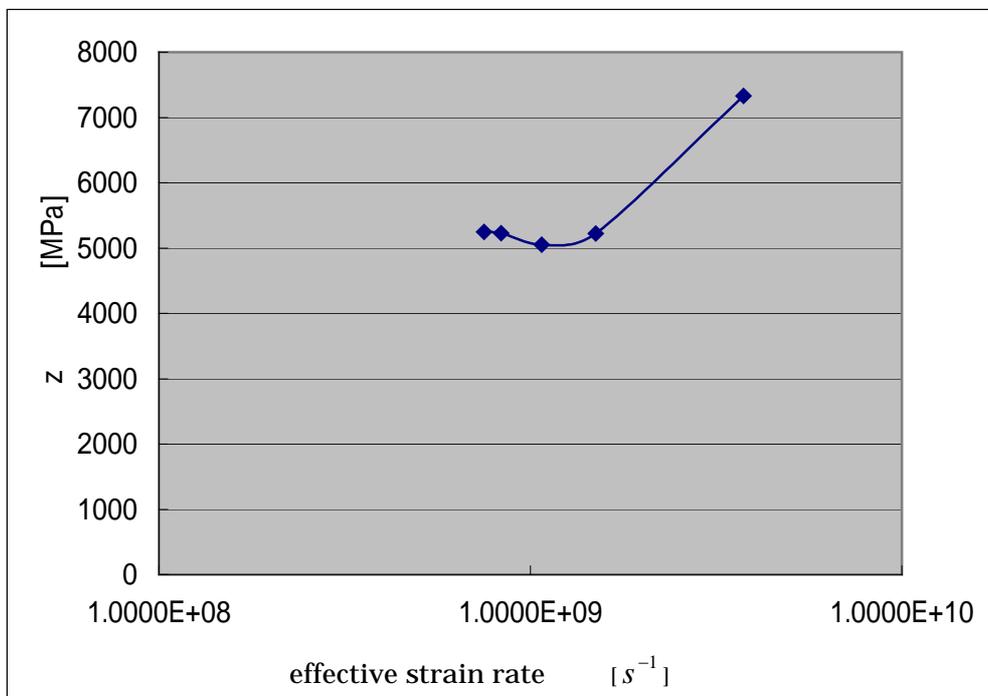


Fig3.1.4 転位射出時の z に与える effective strain rate の影響

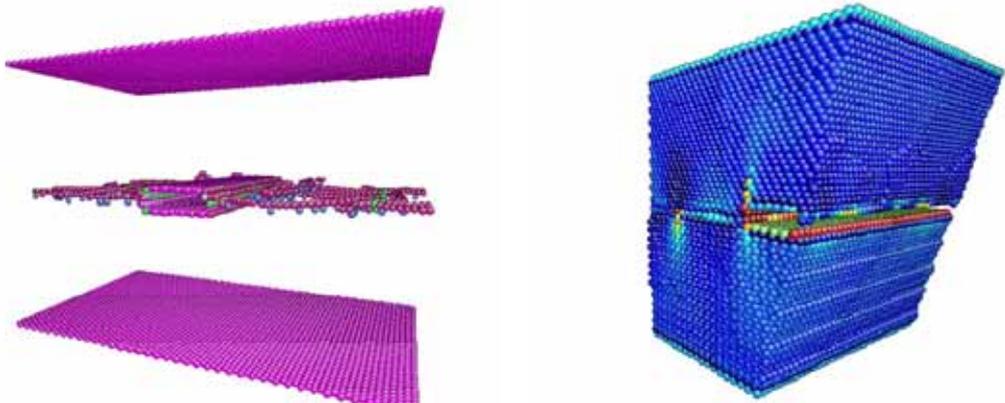
effective strain rateが大きいほど、 σ_z も大きくなるが、effective strain rateが小さくなるにつれ σ_z がある一定の値に収束することが分かった。従って解析ではeffective strain rateとして $7.5 \times 10^8 [s^{-1}]$ を使用した。正確にはひずみ速度 $\dot{\epsilon} = 1.5 \times 10^9 [s^{-1}]$ の強制変位を100step (0.1[ps]) 与えた後、100step (0.1[ps]) の緩和計算を行うことを繰り返した。

総 step 数は 65,000step(時間にすると、70[ps])として、その間に与えたひずみは、4.86%であった。

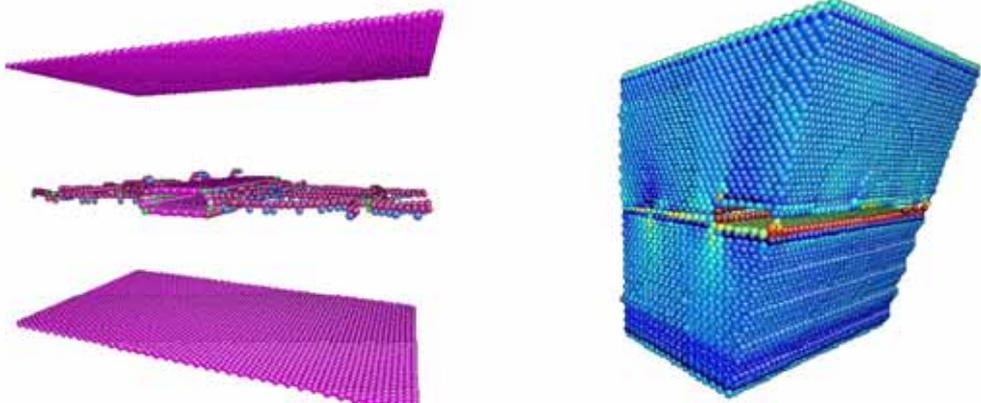
Fig.3.1.5 に解析結果概観のスナップショットを示す。左図は fcc 構造、hcp 構造を保っている原子は消去することで、自由境界、転位芯等の欠陥原子のみを可視化した。正確には、配位数により着色した後、正常な fcc 構造、hcp 構造の配位数は 12 個であるから、配位数が 12 個である原子を消去し、欠陥原子のみを可視化した。右図は、このモデルを主すべり面に沿って切断し、 σ_z についてのコンター図で表現した。最大値は 17,000[MPa]で、最小値は-3,000[MPa]である。局所的に値がこの範囲に入らない原子もあるが、その原子はカラーマップ外の色かつ彩度の低い色で表現している。

Fig.3.1.5 の左図より Cu/Ru 界面に misfit 転位の存在を観察することが出来た。Cu に部分転位は射出されたが、Ru には射出されなかった。Cu に対しては、き裂右端から部分転位がすべり面に沿って射出している様子が観察された。部分転位の形状は misfit 転位の形状に影響を受けて、直線ではなく曲線となった。しかし射出された部分転位は、z 方向上方の変位拘束原子に到達すると、その部分転位はそれ以上進展しなかった。現実では転位は表面に突き抜けるので、この挙動は現実のものとは乖離している。

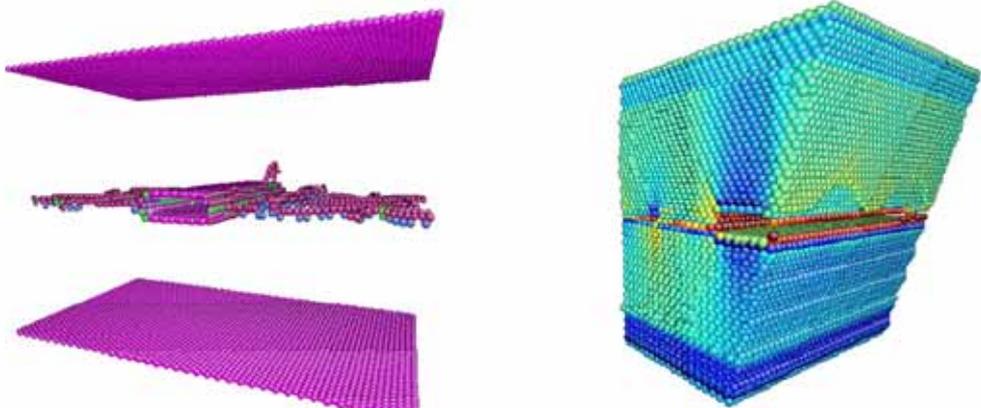
Fig.3.1.5 の右図を観察する。界面上とき裂周辺の原子の σ_z は、部分転位の挙動に関係なく高くなっていた。まだ強制変位を与えていない緩和計算終了時でも高い応力が観察できるので破壊に優先的な箇所であることが分かる。また転位芯の σ_z は高いが、すでに転位がすべった部分の σ_z は緩和されていた。変位拘束原子の σ_z は正確な値ではないので、無視して良いと考えられる。



5.4[ps] (緩和計算終了時)

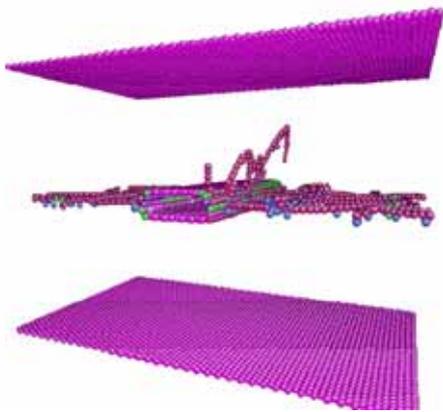


15[ps]

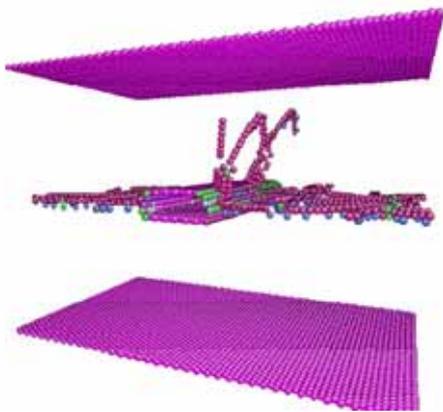
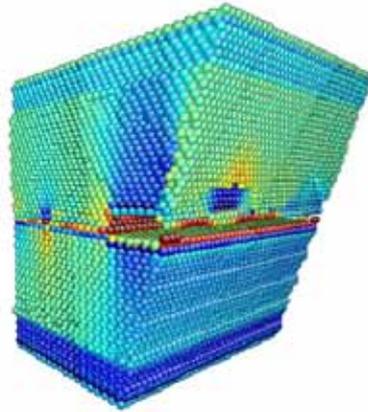


29[ps]

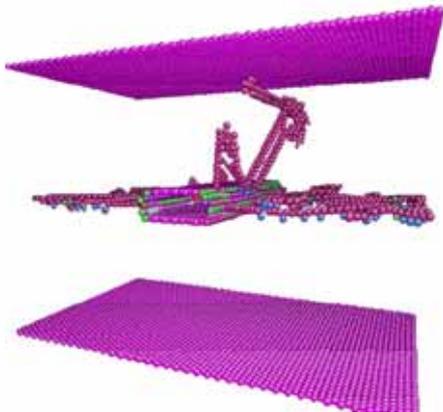
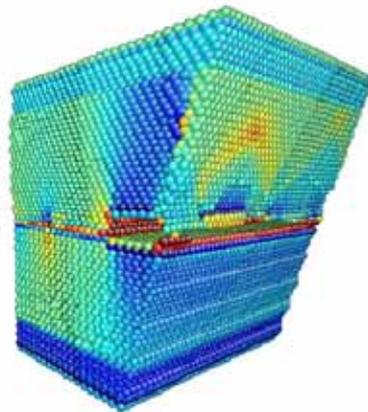




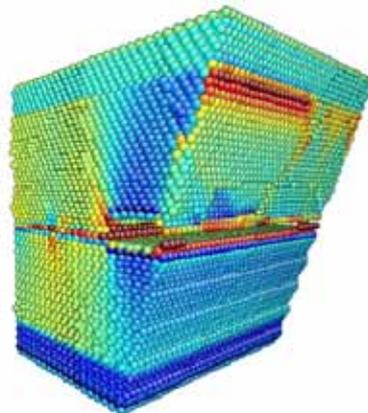
30[ps]



31[ps]



40[ps]



-3000

17000 [Mpa]

Fig.3.1.5 Cuのz方向が<111>であるモデルのスナップショット(概観)

Fig.3.1.6 にき裂近傍の拡大図のスナップショットを示す。き裂は次第に大きくなったものの、界面方向には進展せず、界面と垂直方向に Cu のみに進展してゆき、次第に先端が鈍化していった。Cu 側では界面と平行方向にやや進展した。つまり Ru は剛性が高く、また Cu-Ru 界面の密着度も強いことが確認できた。

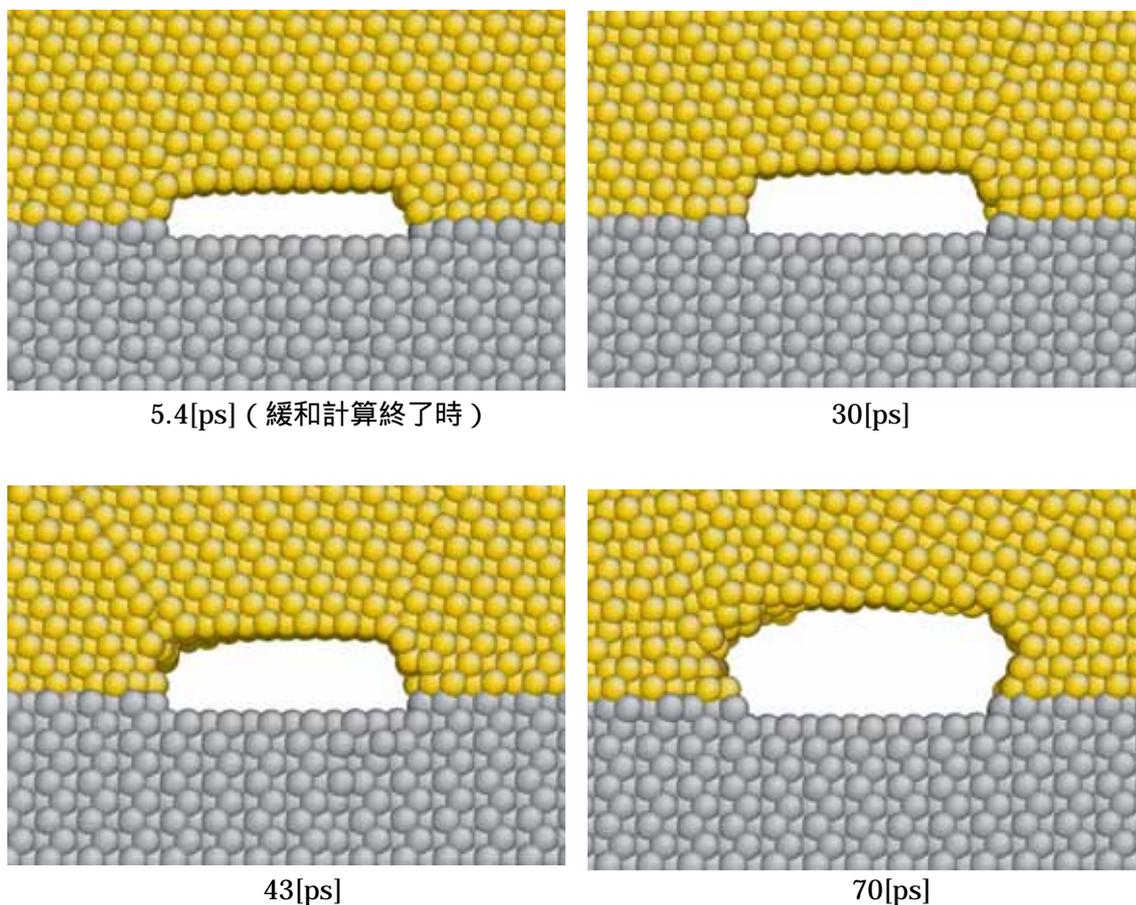


Fig.3.1.6 Cu の z 方向が<111>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）

Fig.3.1.7 に全原子 σ_z を平均した値の step 数による推移を示す。最初の部分転位を観察したときの物性値は、 $\sigma_z = 5.2 \times 10^3$ [MPa]、 $\epsilon = 1.78$ [%]、step = 27,000 であった。全体の平均応力を見ると、部分転位の射出で応力が緩和された様子は観察できなかった。

また 40,000[step]以降で σ_z が収束しているが、これは変位拘束原子により転位が反射されて、モデルの Cu 全体に転位が広がったことに起因する。

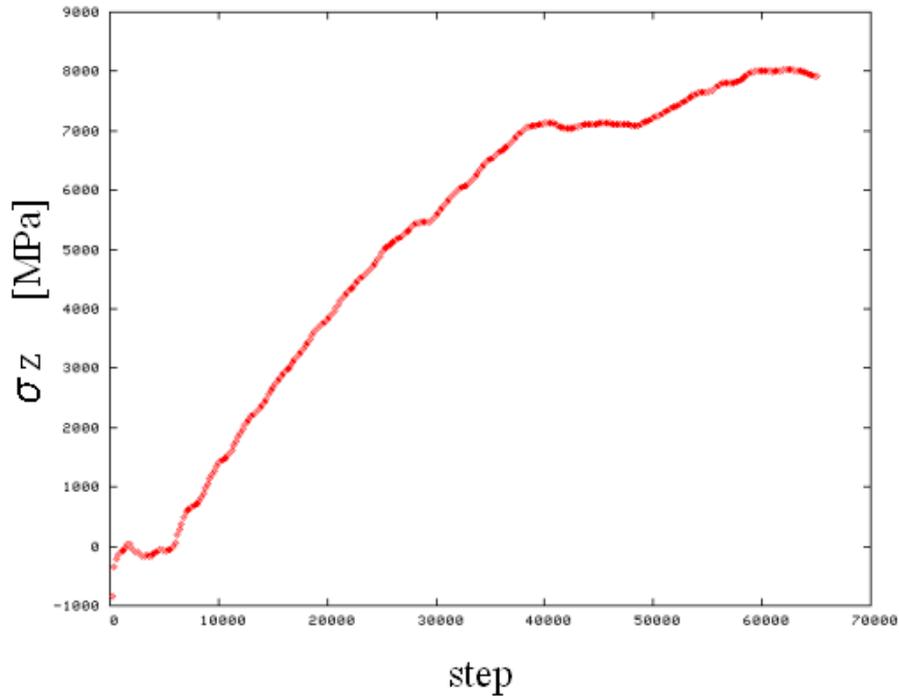


Fig.3.1.7 Cuのz方向が<111>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動

次に部分転位とすべり面に沿ったせん断応力の関係について検証する。転位はRu側には進展せず、Cu側のみ進展していたので、Cuで主すべり面に沿った6層の原子について詳しく観察を行った。この条件に当てはまっても変位拘束原子は考慮しなかった。

Fig.3.1.8に解析に用いたモデルの部位を示す。Fig.3.1.8で黒線で囲まれた部分を奥行き方向に抜き取ったモデルについて解析を行った。このモデルの原子数は5,330個であった。

Fig.3.1.9にこのモデルの主すべり面におけるせん断応力の平均値のstep数による変動を示す。データは200[step]ごとに取ったのだが、最大値は26,800[step]のときで、 1.30×10^3 [MPa]であった。その後27,000[step]で部分転位が射出され、急激な応力緩和が起きていた。つまり応力集中により部分転位が射出され、部分転位射出によって応力緩和が起きていた。

40,000[step]前後で応力緩和が起きているが、これは変位拘束原子により転位が反射し、モデル全体に急激に広がっていったためである。

Fig.3.1.10に部分転位が射出された前後のスナップショットを示す。せん断応力をコンター図により表現した。最大値は3,000[MPa]、最小値は0[MPa]であり、局所的に存在するカラーマップ外のせん断応力を持つ原子はカラーマップ外の色かつ彩度の低い色で表現した。外側にある黒線は、元のモデルの枠線である。

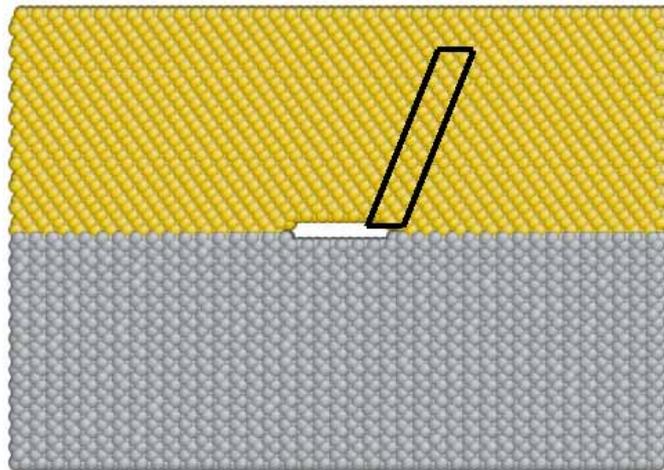


Fig.3.1.8 Cuのz方向が<111>であるモデルで主すべり面のせん断応力の解析に使用した部分

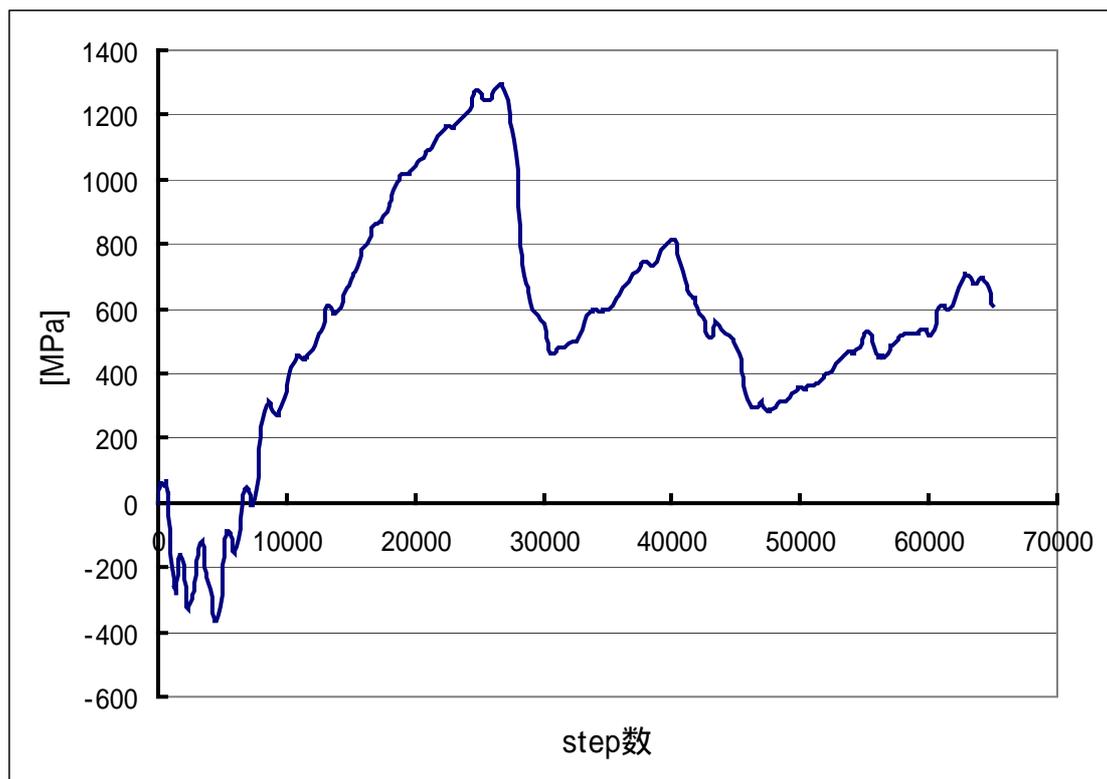


Fig.3.1.9 Cuのz方向が<111>であるモデルの主すべり面におけるせん断応力のstep数による変動

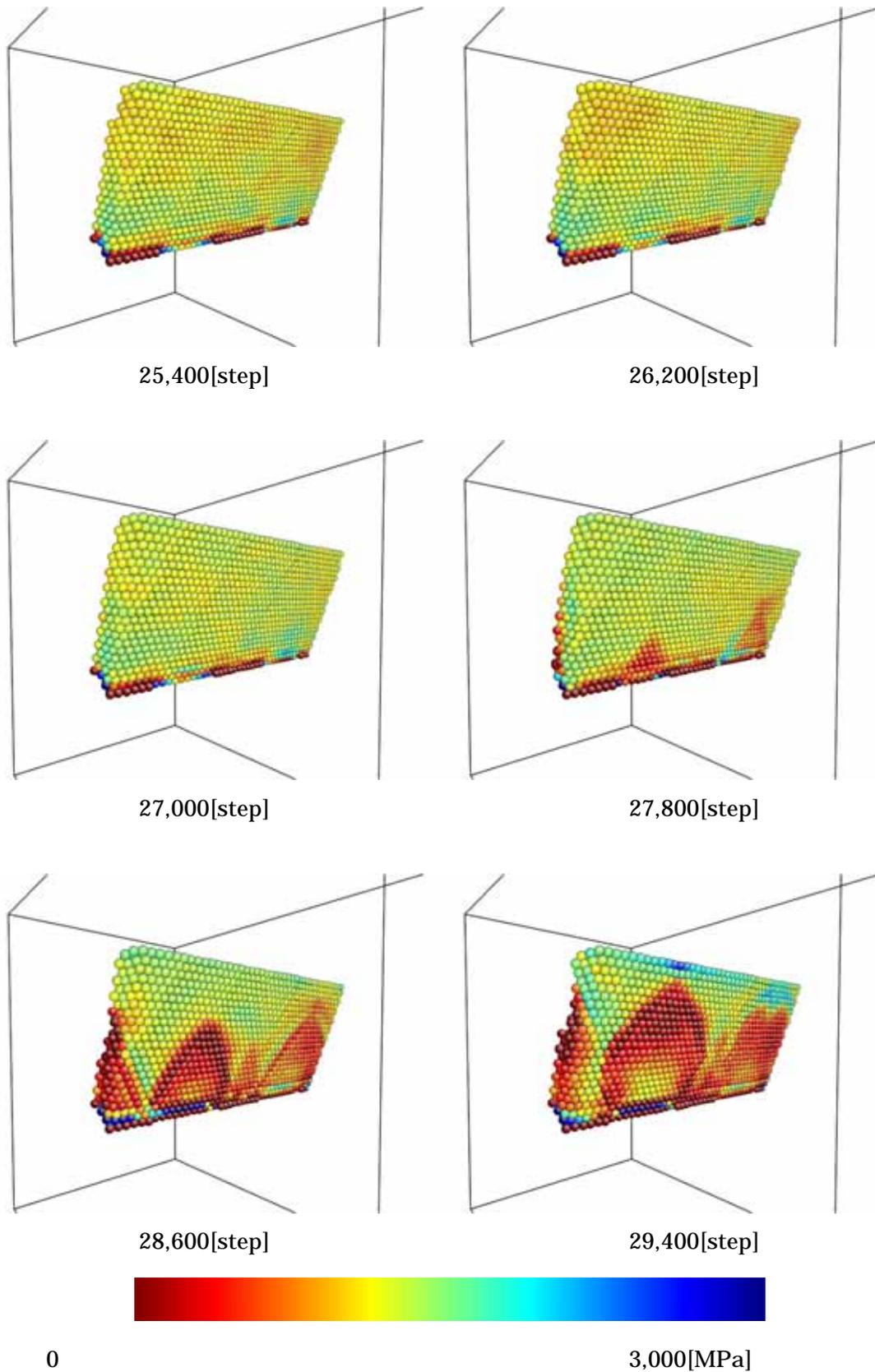


Fig.3.1.10 Cuのz方向が<111>であるモデルの のコンター図のスナップショット

Fig.3.1.10 より、部分転位の射出により、せん断応力が大きく緩和されている様子が分かる。Fig.3.1.5 での σ_z の応力緩和よりもはっきりとしている。27,000[step]では、界面近くの原子に応力集中が起きている様子が観察できた。このスナップショットからも応力集中部から部分転位が射出され、応力が緩和されている様子が確認できた。

ここで、このシミュレーションの妥当性を検討していく。Cu のみのモデルで Cu の面方位が<111>であるモデルと同じすべり面にせん断応力を与えた場合の結果を Fig.3.1.11 に示す。せん断応力と与えたひずみの関係である。Fig.3.1.11 より Cu の臨界分解せん断応力が求まり、その値は 2.89×10^3 [MPa]であった。Fig.3.1.9 で求めたせん断応力の最大値は 1.30×10^3 [MPa]なので、この値のみに注目すると良い妥当性だとは言えない

しかし Fig.3.1.9 と Fig.3.1.11 はグラフの形状はほぼ同じである。また Fig.3.1.9 を求めたモデルには、部分転位が射出される箇所から離れている原子も含まれていた。せん断応力を求めるための原子を、もっと部分転位に近い原子に限定すれば、最大値が臨界分解前段応力に近づいていくと考えられる。また部分転位が射出される箇所の近傍の原子のせん断応力を個別に観察すると、 $2.5 \times 10^3 \sim 4.0 \times 10^3$ [MPa]程度の値が得られた。このようなことから、このシミュレーションには妥当性があると言える。

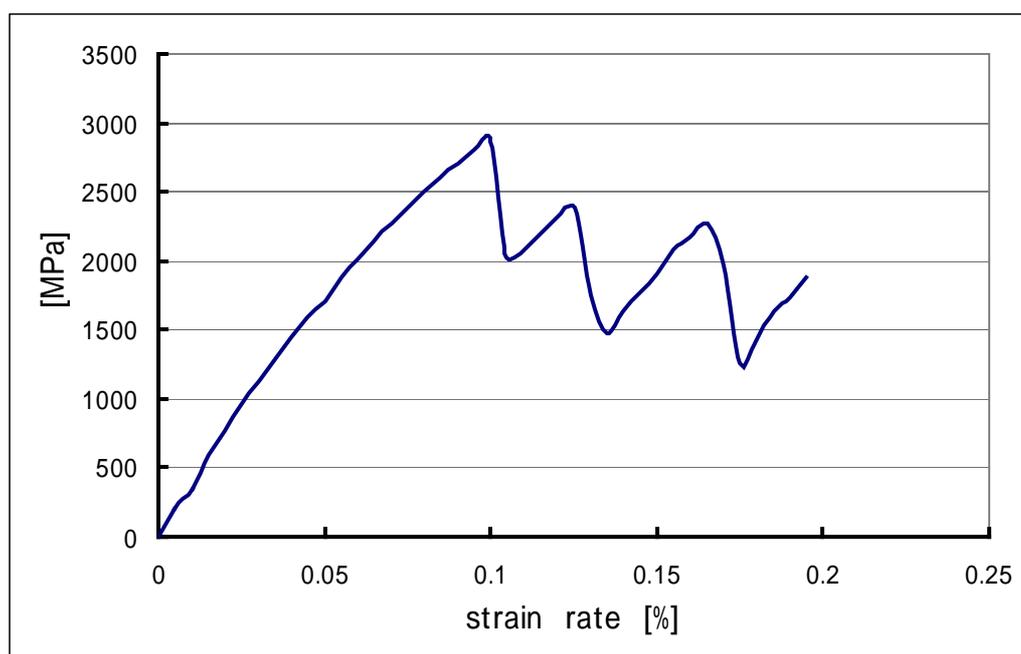


Fig.3.1.11 Cu のみのモデルにおける と strain rate による変動

3.1.3. 界面に対するせん断応力による評価

Fig.3.1.12 に解析モデルの全体図を示す。

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=12.8\text{nm}$ であり、総原子数を 188,196 個とした。

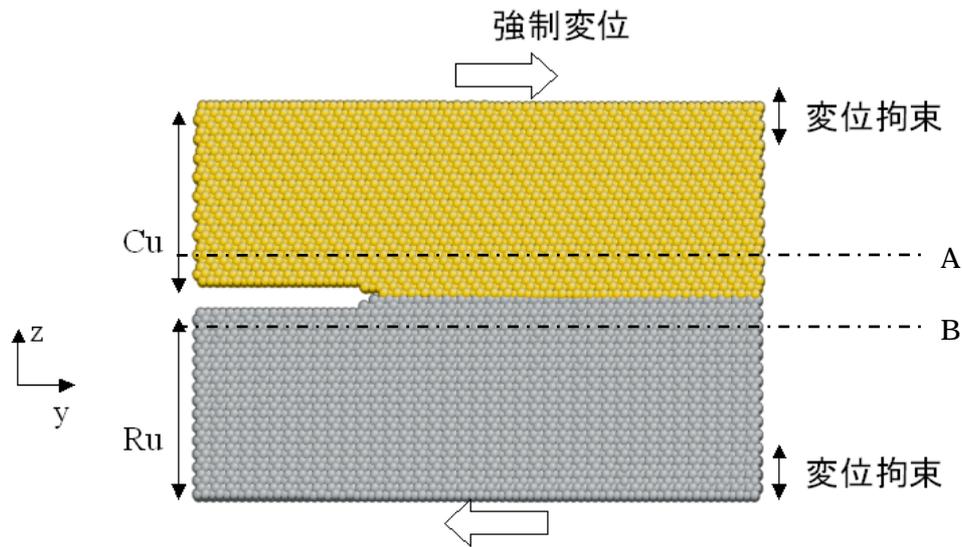


Fig.3.1.12 Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルの初期状態の概観 (せん断応力)

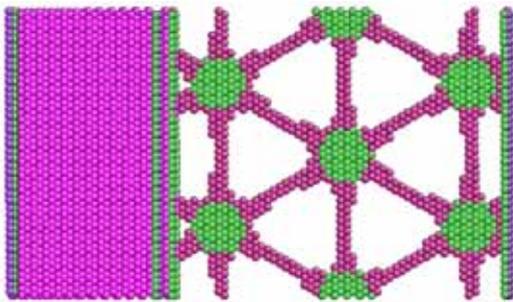
Fig.3.1.13 に界面のスナップショットを示す。Fig.3.1.12 の AB 間を z 方向の上方から観察したスナップショットである。左図では配位数により着色した後、fcc 構造及び hcp 構造を保っている原子を消去し界面上の欠陥原子と y 方向の自由境界原子のみを可視化した。右図は、 τ_{yz} によるコンター図である。最大値は $6,000[\text{MPa}]$ で、最小値は $-3000[\text{MPa}]$ である。局所的に値がこの範囲に入らない原子もあるが、その原子はカラーマップ外の色かつ彩度の低い色で表現している。

初期状態から緩和計算終了時までには新たな misfit 転位は出現しなかったが、個々の転位が細くなり、また形状も三角形に回転が加わったものに変化した。misfit 転位上の τ_{yz} は周辺の τ_{yz} よりも大きくなっている。

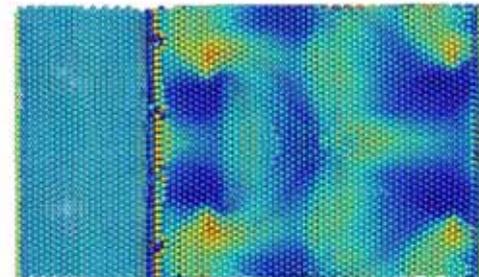
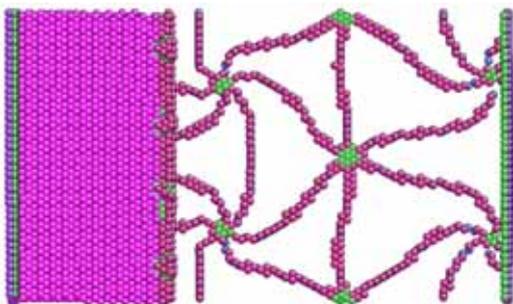
その後強制変位を与えるにつれて、 $5.4 \sim 16[\text{ps}]$ では misfit 転位が Fig.3.1.13 の右方向に進展していった。右端に存在した misfit 転位はこの過程で表面に達し、消滅している。

$16[\text{ps}]$ では界面上き裂端の τ_{yz} がとても高くなっていて、その結果 $19[\text{ps}]$ では新たな misfit

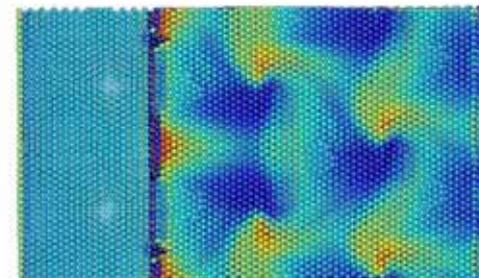
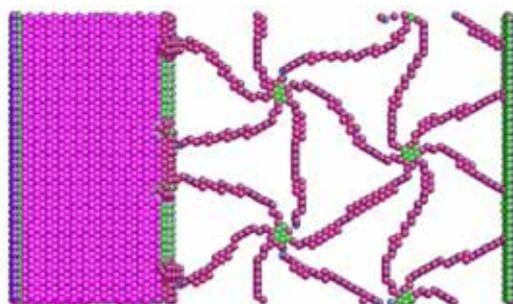
転位が射出された。それに伴い界面上き裂端の τ_{yz} がやや緩和されている。



0[ps] (初期状態)

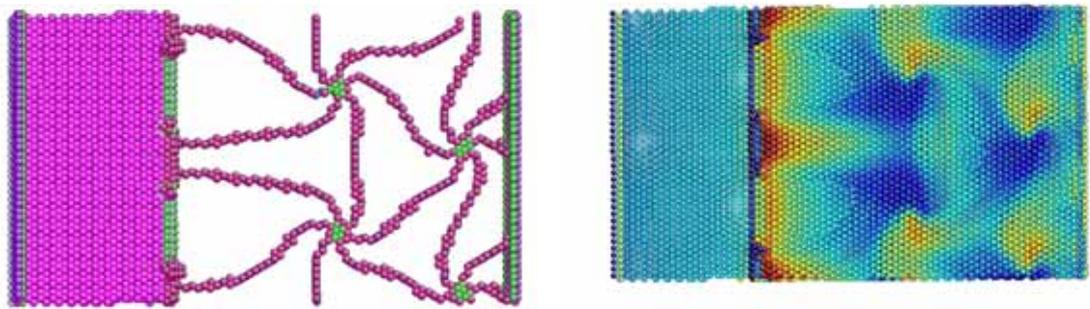


5.4[ps] (緩和計算終了時)

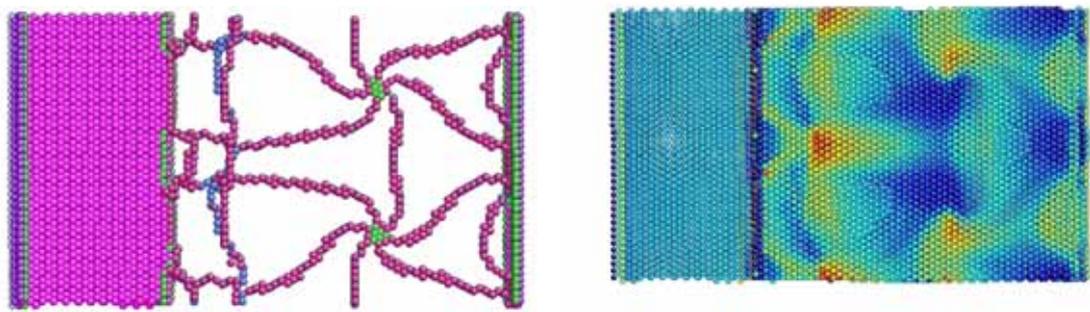


12[ps]

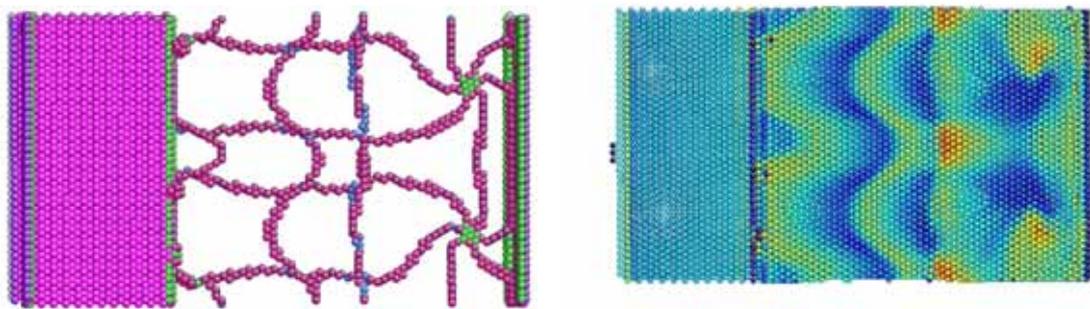




16[ps]



19[ps]



27[ps]



Fig.3.1.13 Cuのz方向が<111>であるモデルの界面のスナップショット(せん断応力)

全体としては左図と右図を見比べると、misfit 転位は界面上のせん断応力を緩和しながら移動して、最後は表面に抜けていく様子が観察された。misfit 転位上の τ_{yz} は他の部分よりも高い値だが、misfit 転位がすべった部分の応力は緩和されている。垂直応力を与えたときの部分転位の働きと同じ働きが確認できた。

界面上でも 3.1.2 のときのように応力が集中するとその部分より転位が射出されていた。

Fig.3.1.14 にこのモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を示す。ここで τ_{yz} は全原子の平均値である。緩和計算終了後、強制変位を与えるにつれて τ_{yz} は増加しているが、Fig.3.1.13 で観察した新たな misfit 転位の射出により応力緩和されている。総ひずみは前項、垂直応力を与えたときと等しく、4.86[%]だが、応力の値はかなり小さくなっている。また応力緩和も垂直応力を与えたときよりもせん断応力を与えたときの方がはっきりと観察できた。このことよりも misfit 転位はせん断応力を緩和する働きがあると言える。

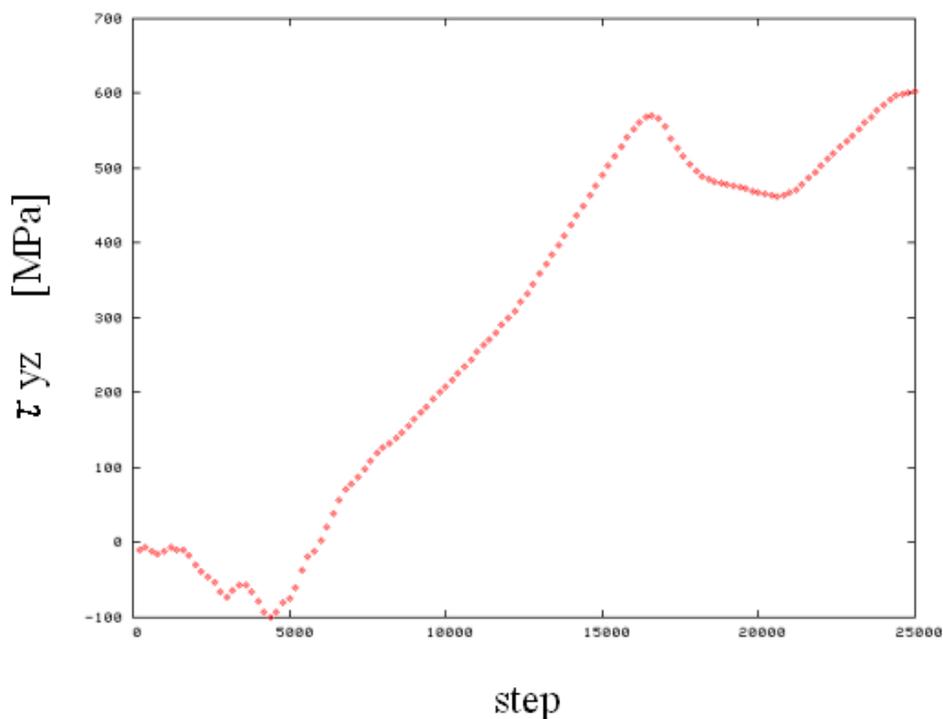


Fig.3.1.14 Cu の z 方向が<111>であるモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動

3.2. misfit 転位が存在しないモデルの解析結果及び考察

本節では misfit 転位が界面隔離や転位の進展に与える影響を調べるため、前節で扱ったモデルの misfit 転位が存在しないモデルの解析を行った。ポテンシャルには、Ru の材料特性を変化させず、格子定数のみ Cu の格子定数と等しくさせた GEAM ポテンシャルを使用した。

3.2.1. 接合エネルギーによる評価

Ru のポテンシャル変更に伴い、計算系が若干変化した。material-connected state の計算系 (Cu/Ru 系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=10.6\text{nm}$ であり、総原子数は 171,462 個とした。material-separated state の Cu の計算系 (Cu 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=5.6\text{nm}$ で、総原子数を 90,774 個、一方 Ru の計算系 (Ru 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=5.0\text{nm}$ であり、総原子数を 80,688 個とした。

面方位及びその他の条件は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しい。

平衡状態のエネルギーを求めると Cu-Ru 系が $-858,586[\text{eV}]$ 、Cu 単体系が $-317,773[\text{eV}]$ 、Ru 単体系が $-534,463[\text{eV}]$ となった。material-connected state と material-separated state の差は $6,350[\text{eV}]$ であり、これを界面の面積で割り、単位面積あたりに換算し、単位変更を行うと、 $5.35[\text{J}/\text{m}^2]$ であった。

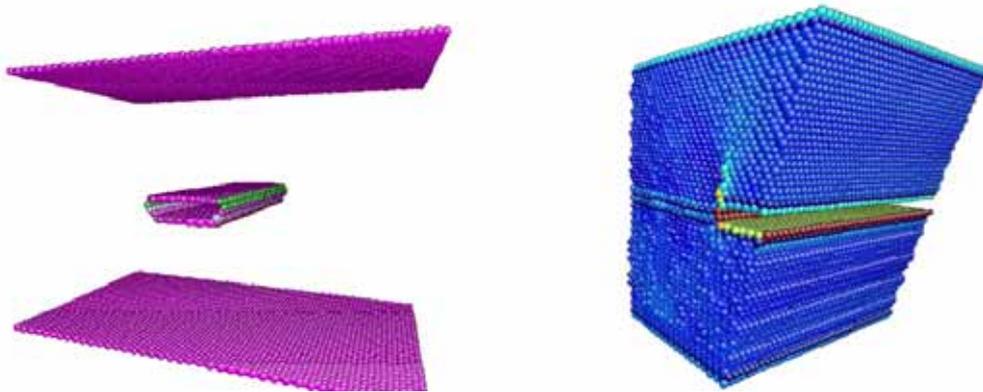
3.2.2. 界面に対する垂直応力による評価

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=12.5\text{nm}$ であり、総原子数を 200,121 個とした。面方位及びその他の条件は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しくした。

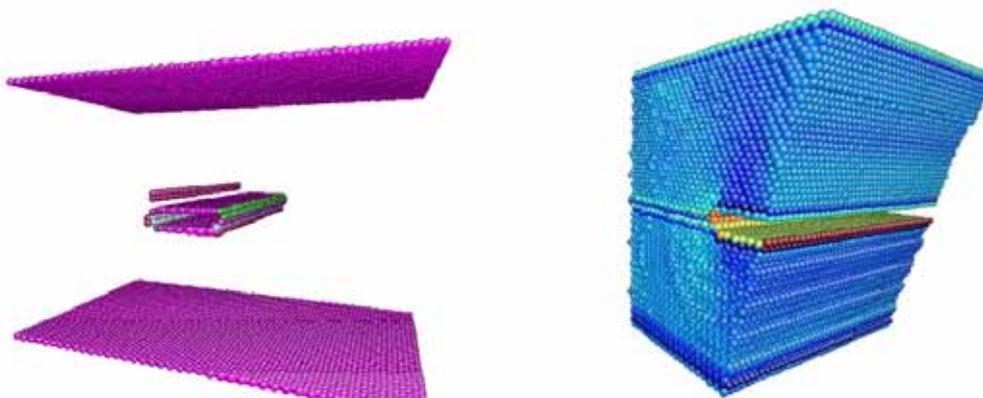
Fig.3.2.1 に、解析結果概観のスナップショットを示す。Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルのスナップショットと同様に、左図は自由境界原子、欠陥原子のみを可視化した。右図は、解析モデルを主すべり面に沿って切断し、 σ_z をコンター図で表現した。最大値、最小値及びカラーマップは Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しくした。

Fig.3.2.1 の左の図より、格子定数を等しくしたことで Cu/Ru 界面の misfit 転位がなくなった様子が観察された。やはり Ru 側には転位は進展せず Cu 側にのみ部分転位が進展していった。15[ps]の図で、き裂の左端に部分転位が射出されたが、この転位は進展せずに計算を進めるにつれ消えた。その後、Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと同じく、き裂右端のすべり面に沿って部分転位が射出され、進展していった。転位芯の形状は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと異なり、直線となった。部分転位の形状は最初に射出される界面の形状に大きく影響を受けると言える。一時的には、き裂左端に沿ったすべり面上のせん断応力が高くなったが、最終的にき裂右端に沿ったすべり面上のせん断応力のほうが高くなり、左からの転位が進展せずに、右からの転位が進展したと考えられる。しかしこの部分転位も変位拘束原子まで至るとそこで進展が止まり、表面に突き抜けることはなかった。

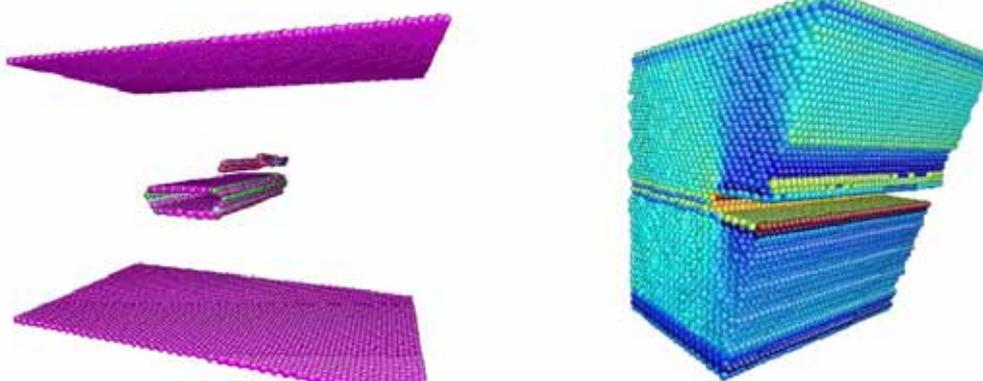
Fig.3.2.1 の右の図を観察する。き裂周辺では Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと同じく、応力集中が起きているが、界面上では、Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルほどの応力集中は観察できなかった。転位芯の σ_z が高く、部分転位がすべった面の応力が緩和されているのも Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと同様である。き裂の存在しない界面の上下の原子は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと比較して、応力集中はなく、全体に平均して応力が加わっている。



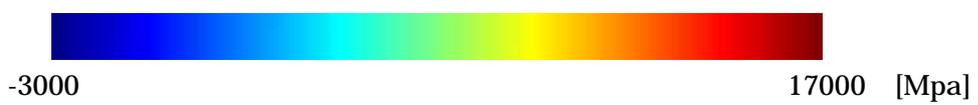
5.4[ps] (緩和計算終了時)

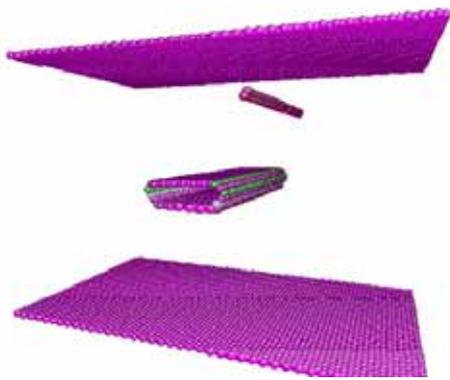


15[ps]

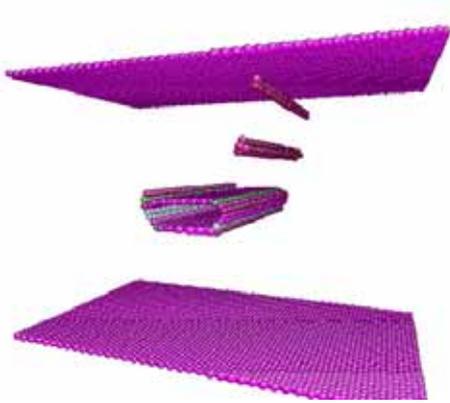
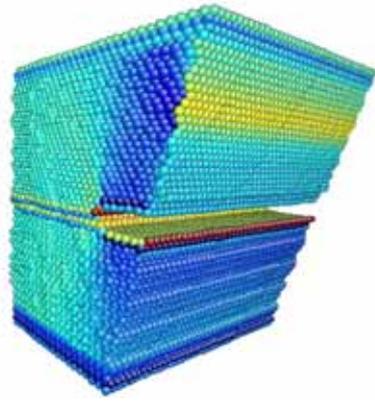


24[ps]

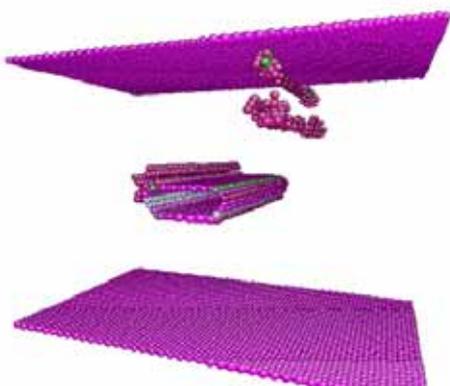
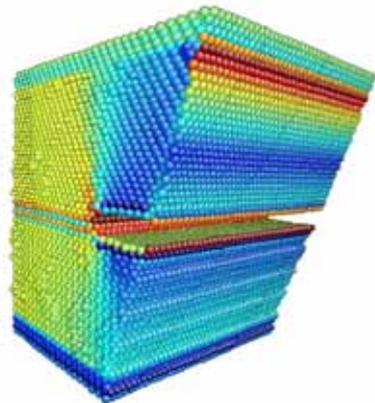




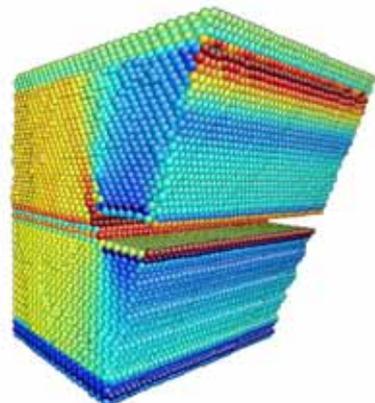
25[ps]



45[ps]



52[ps]



-3000

17000 [Mpa]

Fig.3.2.1 misfit 転位が存在しないモデルのスナップショット (概観)

Fig.3.2.2 にき裂近傍の拡大図のスナップショットを示す。き裂は次第に大きくなったものの、Cu の z 方向が<111>であるモデルと同様、き裂は y 方向には進展せず、z 方向の Cu 側にのみ進展した。それにつれて先端が鈍化していった。き裂の進展の様子に Cu の z 方向が<111>であるモデルとの大きな違いは見られなかった。局所的な応力集中を除けば、misfit 転位の有無が Cu/Ru 界面の密着度に大きな影響を与えていないと考えられる。

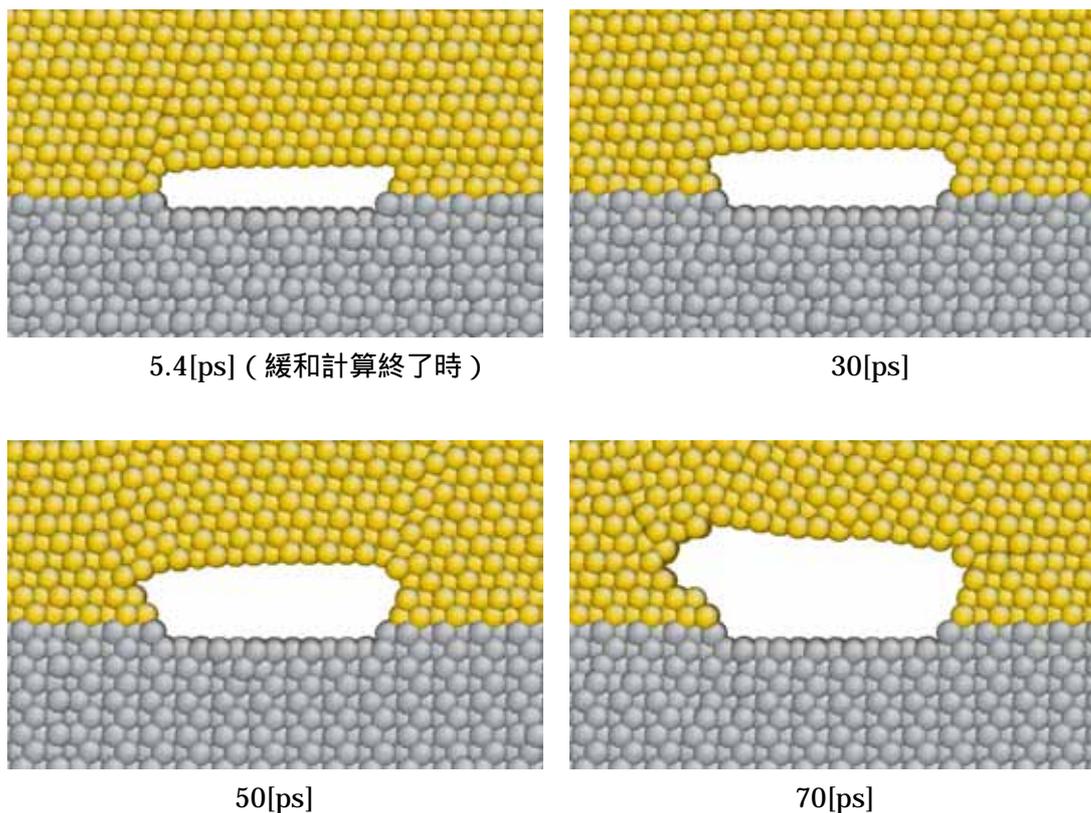


Fig.3.2.2 misfit 転位が存在しないモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）

Fig.3.2.3 に全原子 σ_z を平均した値の step 数による推移を示す。き裂右端から転位が射出されたときの物性値は、 $\sigma_z = 4.2 \times 10^3$ [MPa]、 $\epsilon = 1.38$ [%]であった。全体の平均応力を見ると、部分転位の射出で応力が緩和された様子は観察できなかった。応力の推移の様子に Cu の z 方向が<111>であるモデルと大きな違いは見られなかった。

また 50,000[step]以降で σ_z が収束しているが、これは変位拘束原子により転位が反射されて、モデルの Cu 全体に転位が広がったからだと考えられる。

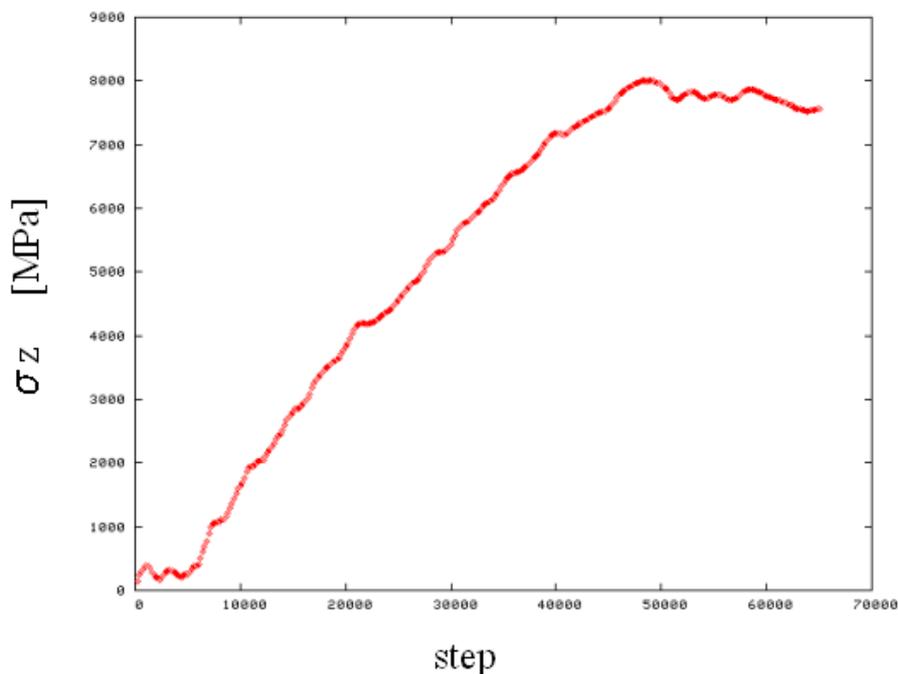


Fig.3.2.3 misfit 転位が存在しないモデルにおける σ_z の step 数による変動

次にすべり面におけるせん断応力と部分転位の進展について検証していく。転位は Ru 側には進展せずに、Cu 側のみ進展していたので、主すべり面に沿った 6 層の Cu 原子について詳しく観察を行った。観察した原子の位置は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しい。原子数は 5,002 個であった。

Fig.3.2.4 に主すべり面におけるせん断応力の step 数による変動を示す。データは 200step ごとにとったのだが、最大値は 21,600[step]のときで、 1.13×10^3 [MPa]であった。その後急激な応力緩和が起きていた。最初の部分転位が射出されたのは、22,000[step]のときなので、部分転位の射出直前は応力集中があり、射出によって応力が急激に緩和されたことが分かった。

妥当性の検討に関しても、原子を取り出している位置、個数、せん断応力の最大値が前節のモデルと同じなので、良いと言える。

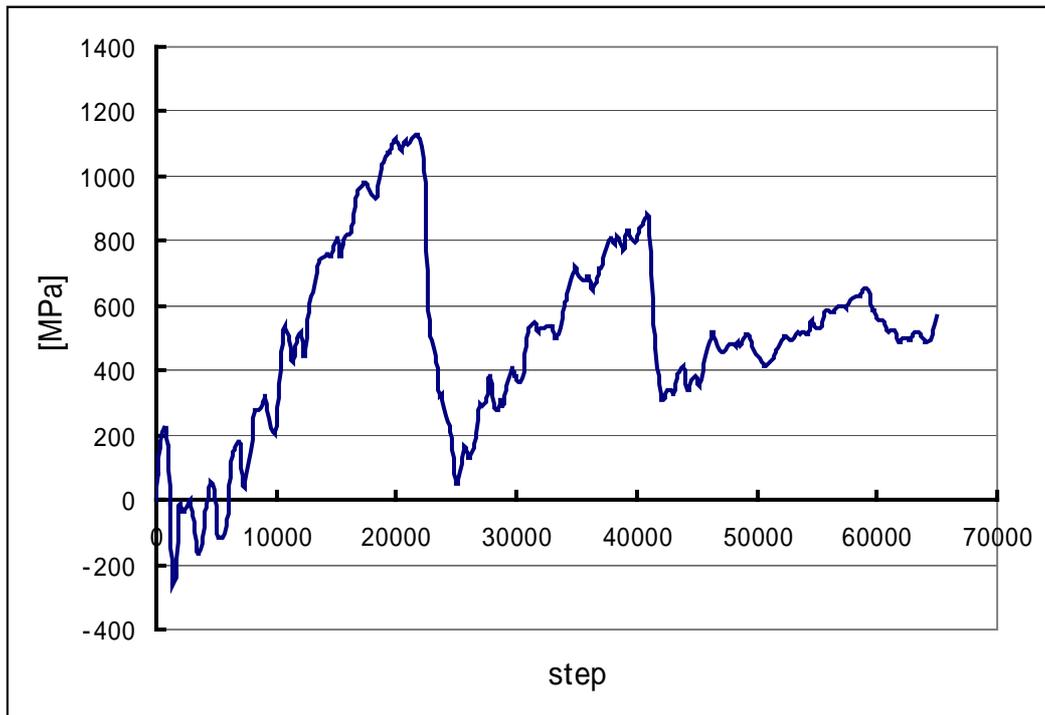


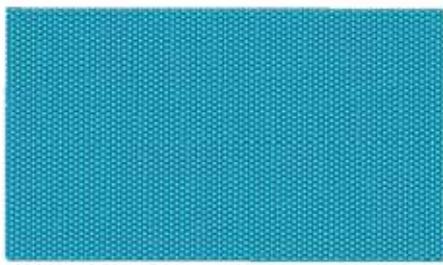
Fig.3.2.4 misfit 転位が存在しないモデルの主すべり面におけるせん断応力の step 数による変動

3.2.3. 界面に対するせん断応力による評価

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=18.2\text{nm}$ 、 $z=12.5\text{nm}$ であり、総原子数を 197,620 個とした。面方位及びその他の条件は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しい。

このモデルでは misfit 転位が存在しないので、Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルに見られた界面における転位の挙動は見られなかった。Fig.3.2.5 に界面のスナップショットを示す。この図は τ_{yz} のコンター図である。最大値、最小値及びカラーマップは Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと等しくした。

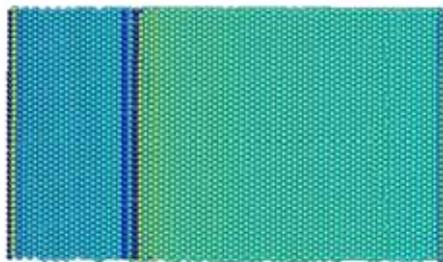
Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルと異なり、界面上に局所的な応力集中は見られない。き裂近傍の応力が高く、右端にいくにつれて応力が徐々に低くなっている。27[ps]のときの図を見比べると明確に分かるが、misfit 転位存在しないモデルのほうが全体の τ_{yz} は大きくなっている。



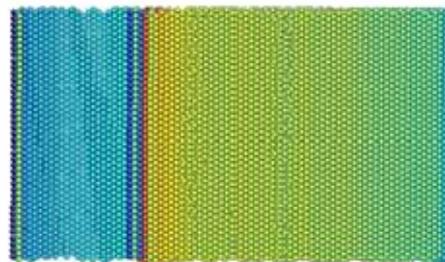
0[ps] (初期状態)



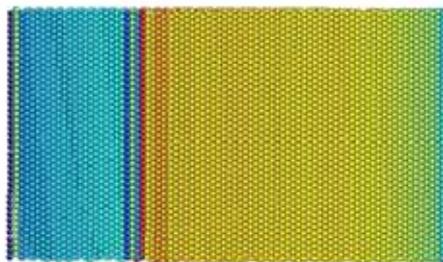
5.4[ps] (緩和計算終了時)



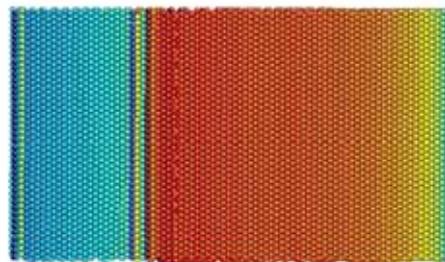
10[ps]



15[ps]



20[ps]



27[ps]



Fig.3.2.5 misfit 転位が存在しないモデルの界面のスナップショット (せん断応力)

Fig.3.2.6 にこのモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を示す。ここでの τ_{yz} は全原子の平均値である。

5000step の緩和計算のあと、応力緩和が起きることなく、 τ_{yz} が上昇し続けている。Fig.3.2.5 のスナップショットで確認したことがここでも確認できた。Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルにおける τ_{yz} の最大値は 6.0×10^2 、一方このモデルにおける τ_{yz} の最大値は 3.1×10^3 [MPa] と、6 倍大きな値であった。つまり misfit 転位が存在しないので τ_{yz} が緩和されなかったことが分かった。

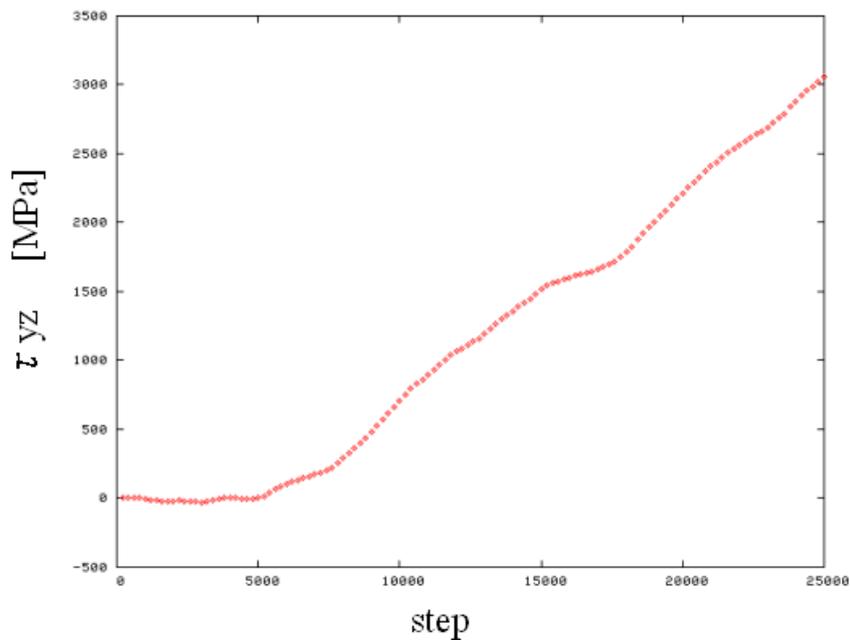


Fig.3.2.6 misfit 転位が存在しないモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動

3.2.4 界面剥離に対する misfit 転位の影響

本項では、misfit 転位による界面剥離に対する影響を考察するため、Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルを比較する。

まず密着エネルギーによる評価。密着エネルギーの定義より、密着エネルギーが大きければ大きいほど、Cu と Ru がそれぞれ単体で存在するよりも Cu/Ru の接合状態のほうが安定であると言える。

第3章で求めた密着エネルギーは、Cu の z 方向が<111>であるモデルが 4.56[J/m²]、misfit 転位が存在しないモデルが 5.35[J/m²]であった。Cu の z 方向が<111>であるモデルのほうが misfit 転位が存在しないモデルより 15%小さくなった。つまり接合エネルギーのみを考慮すると、Cu の z 方向が<111>であるモデルは misfit 転位が存在しないモデルに比べて不安定である。

次に界面に対する垂直応力による評価。両モデルの最初の部分転位が射出されたときの物性値の比較を Table.3.1 に示す。

Cu の z 方向が<111>であるモデルのほうが、 σ_z では 24%、 ϵ では 29%だけ、それぞれ misfit 転位が存在しないモデルより大きな値となった。

| | σ_z [MPa] | [%] | step |
|-----------------------|-------------------|------|--------|
| Cu の z 方向が<111>であるモデル | 5.2×10^3 | 1.78 | 27,000 |
| misfit 転位が存在しないモデル | 4.2×10^3 | 1.38 | 22,000 |

Table.3.1 転位射出時における Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルの物性値

接合エネルギーの観点からは不安定な Cu の z 方向が<111>であるモデルのほうが、垂直応力に対しては部分転位が射出されにくく、安定している。このことより misfit 転位の存在が部分転位の射出を阻害している、もしくは垂直応力を緩和していると考えられる。

Fig.3.2.7 に Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおける σ_z の step 数による変動を示す。転位射出時の周辺では二つの値に大きな差は見られない。よって misfit 転位に垂直応力を緩和する働きはないが、部分転位の射出を妨げる働きはあることが分かった。

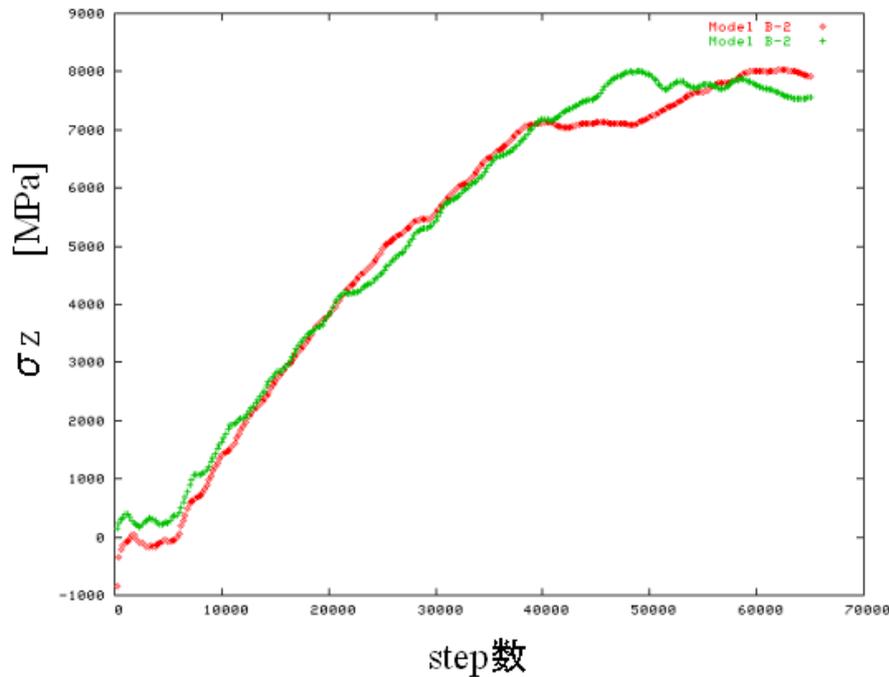


Fig.3.2.7 Cuのz方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおける σ_z の step 数による変動

両モデルのき裂に進展の仕方を比較してみても、この程度のひずみでは界面の密着強度には misfit 転位の存在は影響を及ぼさなかった。しかしひずみがさらに大きくなると、界面上に応力集中場ができる Cu の z 方向が<111>であるモデルのほうが剥離しやすいと考えられる。

二つのモデルの主すべり面におけるせん断応力の比較を行う。**Fig.3.2.8** に Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおけるせん断応力とひずみの変動を示す。部分転位が射出されるまでは、どちらのモデルもほぼせん断応力であった。しかし部分転位の射出に伴い、どちらのモデルでも大きく応力が緩和されていた。転位射出時のひずみは Cu の z 方向が<111>であるモデルは 1.78[%]、misfit 転位が存在しないモデルでは 1.38[%]であった。

Fig.3.2.8 より misfit 転位は主すべり面の応力も緩和はしないことが観察できた。misfit 転位が存在すると界面上で応力集中があるが、すべり面にまでは影響がなかった。両モデルともせん断応力の平均値はほぼ同じように推移していったが、局所的に考えると misfit 転位が存在するほうが応力集中場が形成されているはずである。misfit 転位の存在はそれ以上に部分転位の射出を妨げることが分かった。

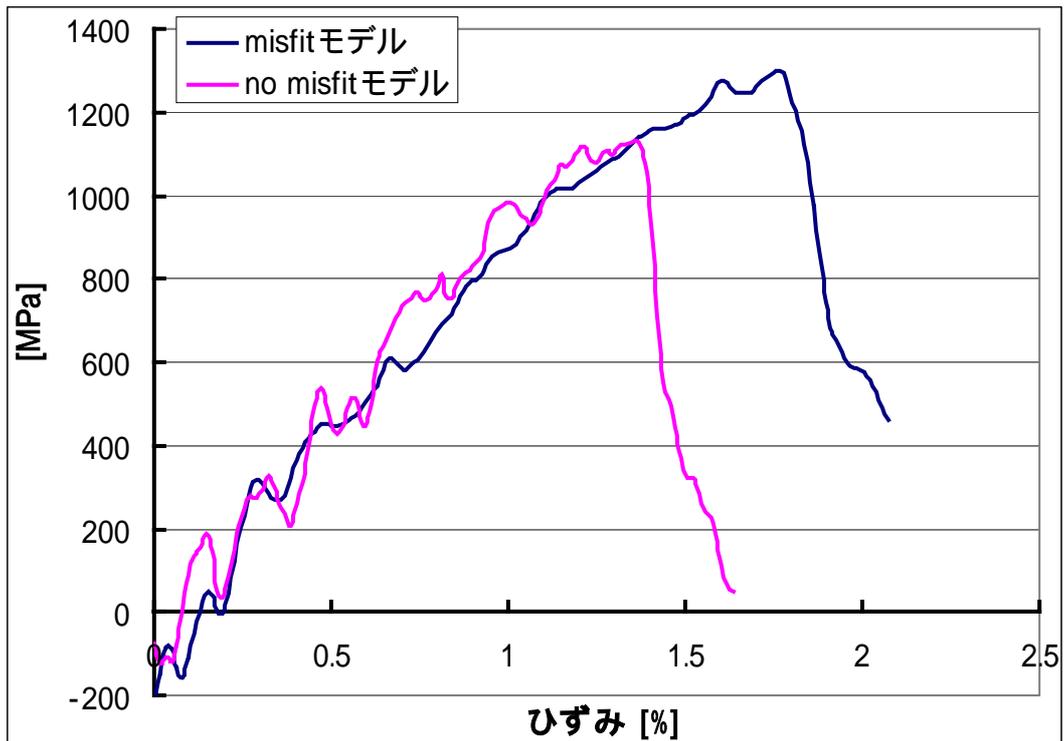


Fig.3.2.8 Cuのz方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおけるせん断応力とひずみの変動

界面に対するせん断応力による評価。Cuのz方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を Fig.3.2.9 に示す。7000step くらいまでは Model A、B と同じような値だったが、その後の τ_{yz} は Cu の z 方向が<111>であるモデルのほうが明らかに小さかった。両モデルの τ_{yz} の最大値を比較すると Cu の z 方向が<111>であるモデルは misfit 転位が存在しないモデルの 1/6 程度だった。つまり misfit 転位はせん断応力を緩和する働きがあることが確認できた。

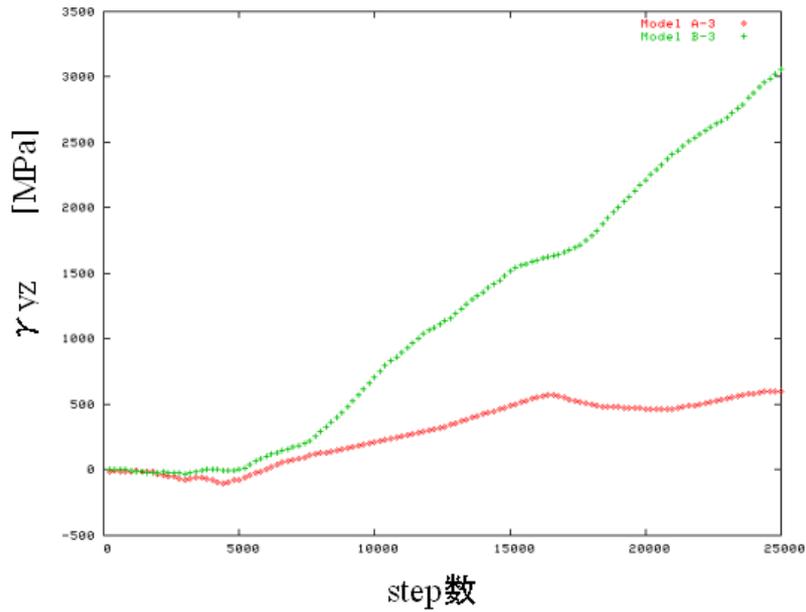


Fig.3.2.9 Cu の z 方向が<111>であるモデルと misfit 転位が存在しないモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動

解析を通して、両モデルともに Ru への転位の進展は確認できなかった。このことを説明するため、積層欠陥エネルギーについて考察する。

積層欠陥とは面欠陥の一種であり、二本の部分転位の間に生じる。そしてその面積に反比例する積層欠陥エネルギーを持っている。積層欠陥エネルギーが大きいほど、部分転位が射出されづらく、また射出されても進展しづらい。

Fig.3.2.10 に GEAM ポテンシャルを利用して求めた Cu の一般積層欠陥エネルギー曲線を示す。横軸は正常な fcc 構造からのずれ、縦軸は欠陥エネルギーを示している。

このグラフの最大値が不安定積層欠陥エネルギー (γ_{us}) で、右端の値 (転位が完全にすべった時の値) が積層欠陥エネルギー (γ_{sf}) となる。

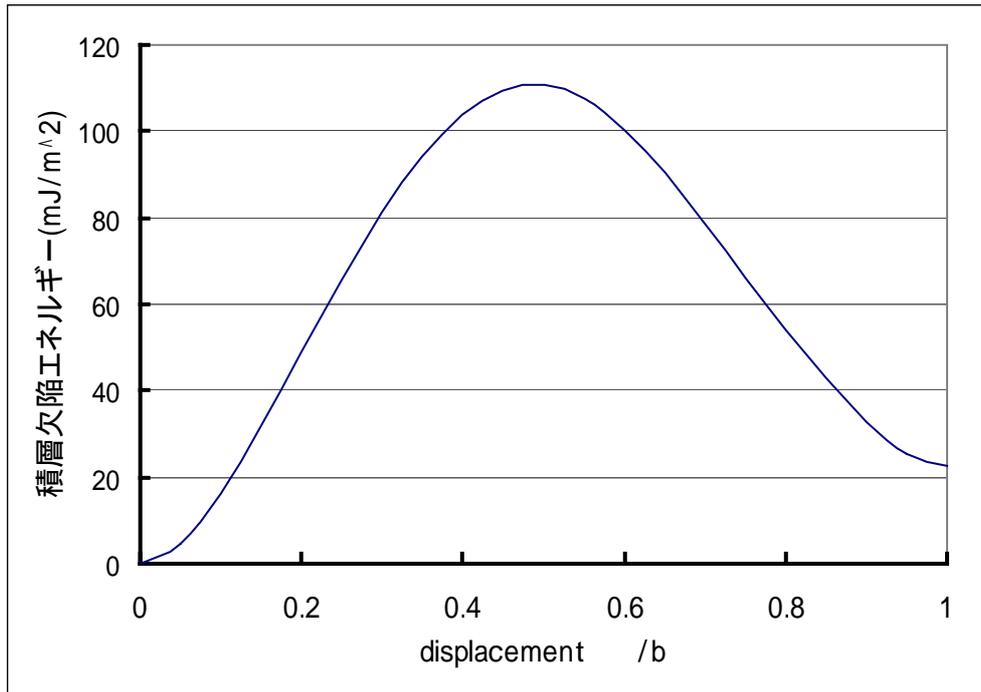


Fig.3.2.10 Cu の<111>面における一般化積層欠陥エネルギー曲線

Table.3.2 に GEAM を使用して当研究室の原らが求めた Cu と Ru の積層欠陥エネルギーと不安定積層欠陥エネルギーを示す。[6]

| | Cu | Ru misfit 有り | Ru misfit 無し |
|--|-----|--------------|--------------|
| <111> γ_{sf} (mJ/m ²) | 23 | - | - |
| <111> γ_{us} (mJ/m ²) | 111 | - | - |
| basal γ_{sf} (mJ/m ²) | - | 184 | 238 |
| basal γ_{us} (mJ/m ²) | - | 543 | 606 |
| prism γ_{sf} (mJ/m ²) | - | - | - |
| prism γ_{us} (mJ/m ²) | - | 1015 | 1059 |

Table.3.2 Cu 及び Ru の γ_{sf} 、 γ_{us}

Ru は Cu との界面に misfit 転位を形成するポテンシャルと、形成しないポテンシャルの二つについて示している。Table.4.2 より Ru の不安定積層欠陥エネルギー (γ_{us}) は misfit の有無に関わらず、Cu の 5 倍以上の値となっていた。つまり Ru は Cu の 5 倍以上、部分転位が射出されにくいといふことだ。それゆえ転位の進展はすべて Cu 側のみだったのだろう

次に Table.3.3 に GEAM ポテンシャル、第一原理計算、実験によるそれぞれの γ_{sf} 、 γ_{us} を示す。[7]

| | 積層欠陥エネルギー(γ_{sf}) | 不安定積層欠陥エネルギー(γ_{us}) |
|-------------|----------------------------|-------------------------------|
| GEAM ポテンシャル | 23 | 111 |
| 第一原理計算 | 39 | 158 |
| 実験値 | 35 ~ 45 | - |

Table.3.3 GEAM ポテンシャル、第一原理計算、実験による積層欠陥エネルギーの違い

GEAM ポテンシャルの γ_{sf} 、 γ_{us} は、第一原理計算、実験値の値よりもそれぞれ低くなっていた。つまり GEAM ポテンシャルでも Cu は実際に存在する Cu よりも転位が出やすくなっている。

部分転位が射出されれば応力緩和が起きるので剥離が生じにくくなる。今回の解析で剥離がまったく起こらなかったのは、GEAM ポテンシャルの特性と言える。

3.3. Cu の z 方向が<011>であるモデルの解析結果

本節及び次節では Cu の面方位による影響を調べるため、Cu の面方位が前節及び前々節と異なるモデルについて取り扱う。

本節では Cu の面方位が $z:<110>$, $x:<001>$, $y:<-110>$ であるモデルを取り扱い、Cu の面方位についての考察は次節で行う。

3.3.1. 接合エネルギーによる評価

計算系は以下のように変化した。material-connected state の計算系 (Cu/Ru 系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=26.1\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数は 273,024 個とした。material-separated state の Cu の計算系 (Cu 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=26.1\text{nm}$ 、 $z=6.1\text{nm}$ で、総原子数を 141,984 個、一方 Ru の計算系 (Ru 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=26.1\text{nm}$ 、 $z=6.5\text{nm}$ であり、総原子数を 131,040 個とした。

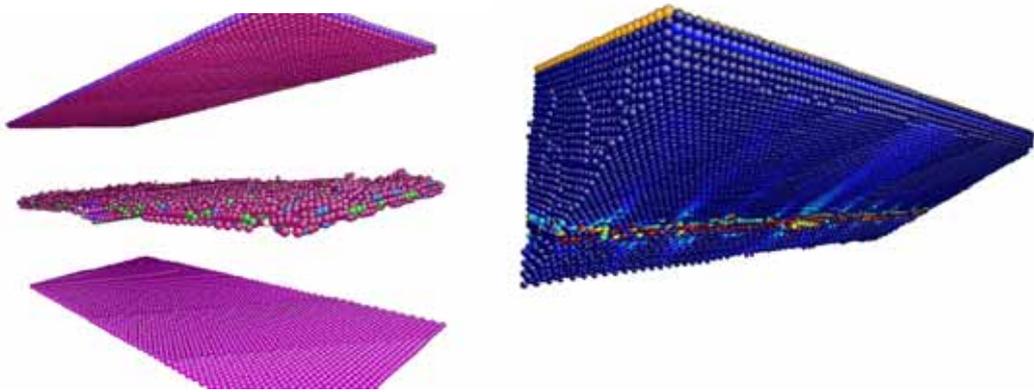
その他の条件は Cu の z 方向が<111>であるモデルと等しくした。

平衡状態のエネルギーを求めると Cu-Ru 系が-1,373,094[eV]、Cu 単体系が-496,674[eV]、Ru 単体系が-870,486[eV]となった。material-connected state と material-separated state の差は 5,394[eV]であり、これを界面の面積で割り、単位面積当たりに換算し、単位変更を行うと、3.48[J/m²]であった。

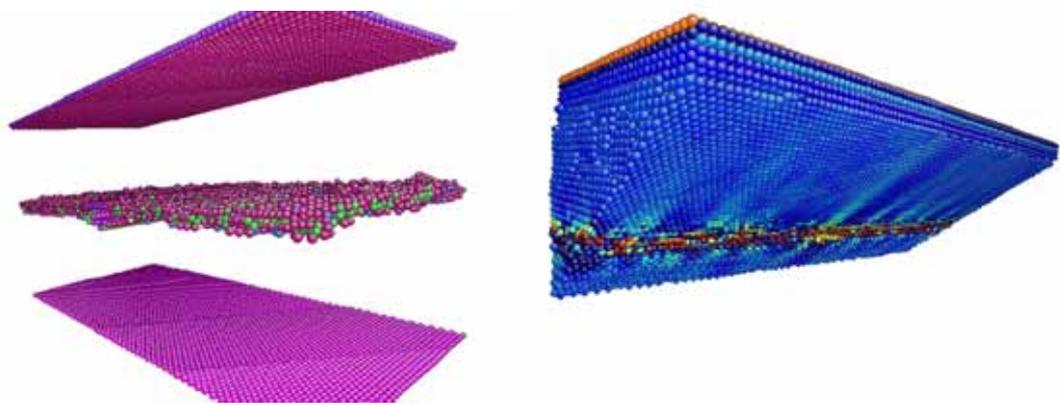
3.3.2. 界面に対する垂直応力による評価

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=26.1\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数を 271,453 個とした。その他の条件は Cu の z 方向が<111>であるモデルと等しくした。

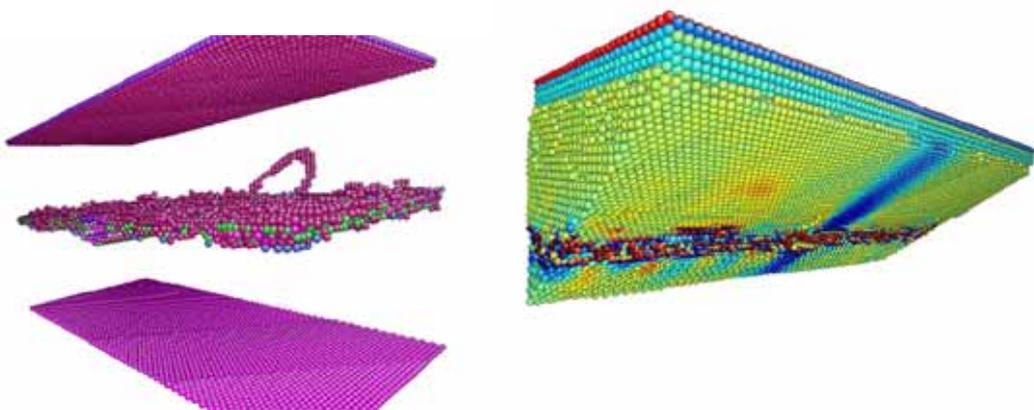
Fig.3.3.1 に、解析結果概観のスナップショットを示す。Cu の z 方向が<111>であるモデルのスナップショットと同様に、左図は自由境界原子、欠陥原子のみを可視化した。右図は、解析モデルを主すべり面に沿って切断し、 σ_z をコンター図で表現した。最大値は 12,000[MPa]で、最小値は 0[MPa]である。局所的に値がこの範囲に入らない原子もあるが、その原子はカラーマップ外の色かつ彩度の低い色で表現している。



5.4[ps] (緩和計算終了時)



15[ps]



41[ps]



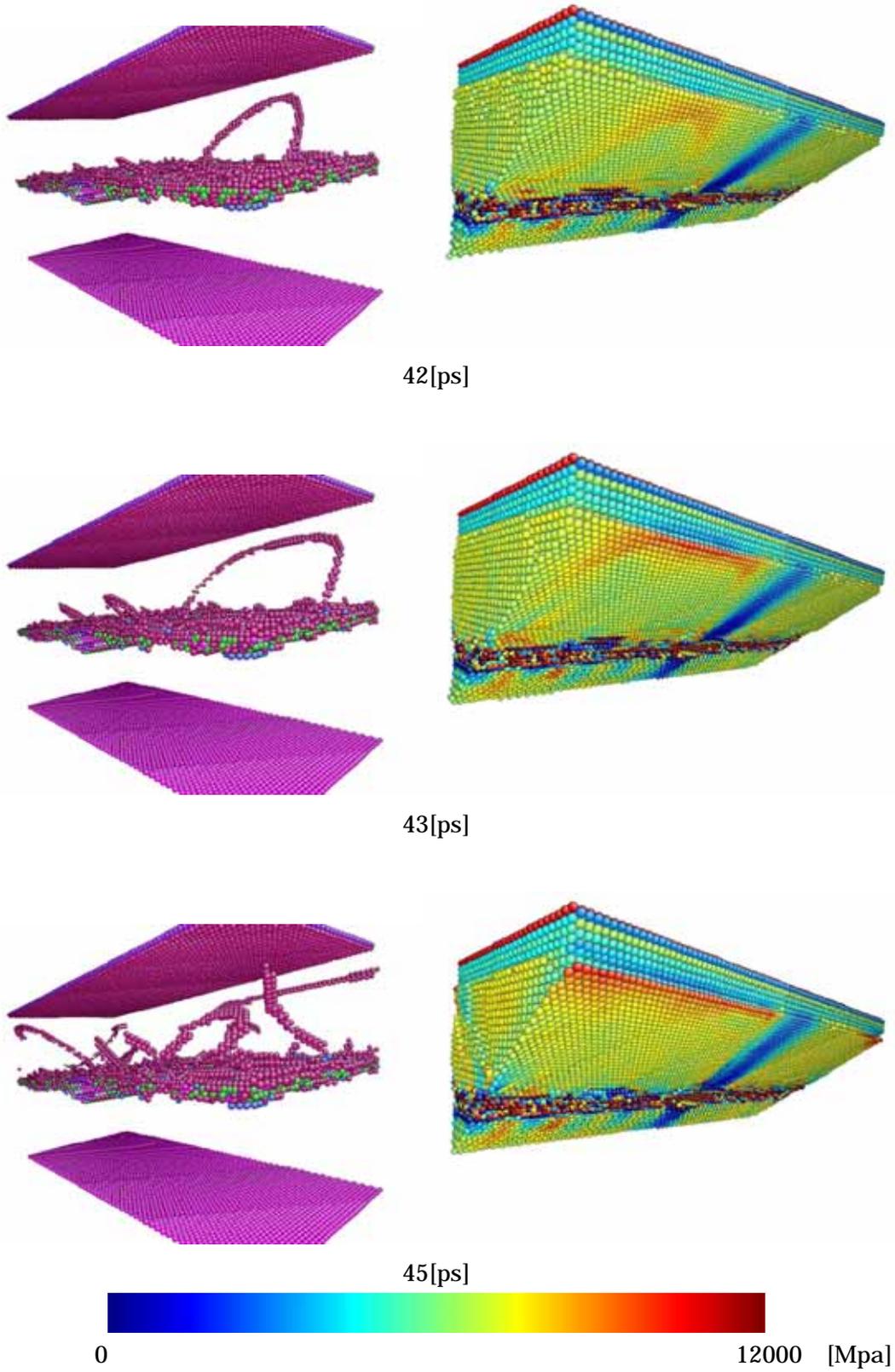


Fig.3.3.1 Cuのz方向が<011>であるモデルのスナップショット(概観)

Fig.3.3.1の左の図を観察すると、界面の misfit 転位の形状が Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルが大きく異なっている。Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデルのように、界面の原子 misfit 転位の存在する部分と存在しない部分に分かれておらず、全面が misfit 転位で覆われている。また misfit 転位の z 方向の長さが大きくなっている。

このモデルはき裂端に Cu のすべり面が存在しないので、最初の部分転位が射出されたのは、き裂端ではないところだった。この点が Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと大きく異なる。43[ps]を見ると、き裂の片側からだけでなく、両側から射出されている。すべり面がき裂を中心とした xz 面に対称となっていることが確認できる。転位は直線ではなく転位ループを半分にしたような形で Cu に広がっていった。そして変位拘束原子に到達すると、それ以上進展しなかった。また Ru 側には転位の進展は見られなかった。

右のコンター図を観察していく。界面上の応力集中は Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルよりも大きな範囲に広がっている。き裂周辺に応力集中が起きている点は同じである。部分転位に関しては、転位芯の応力値が大きく、部分転位がすべった箇所は応力緩和されている。しかし Cu の z 方向が $\langle 111 \rangle$ であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルほど、はっきりとした応力緩和は見られなかった。これはすべり面の傾きが z 方向から大きく傾いているためだと思われる。

また Fig.3.3.2 にき裂近傍の拡大図のスナップショットを示す。Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと同様に、き裂面積は大きくなったが、界面上の界面と平行方向及び Ru 側には進展しなかった。Cu 側には進展していった。Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと比較すると y 方向にやや大きく進展している。だがこのモデルでも界面剥離につながるような挙動は観察できなかった。Cu の面方位を変化させても界面の密着度は大きく変わらないと言える。

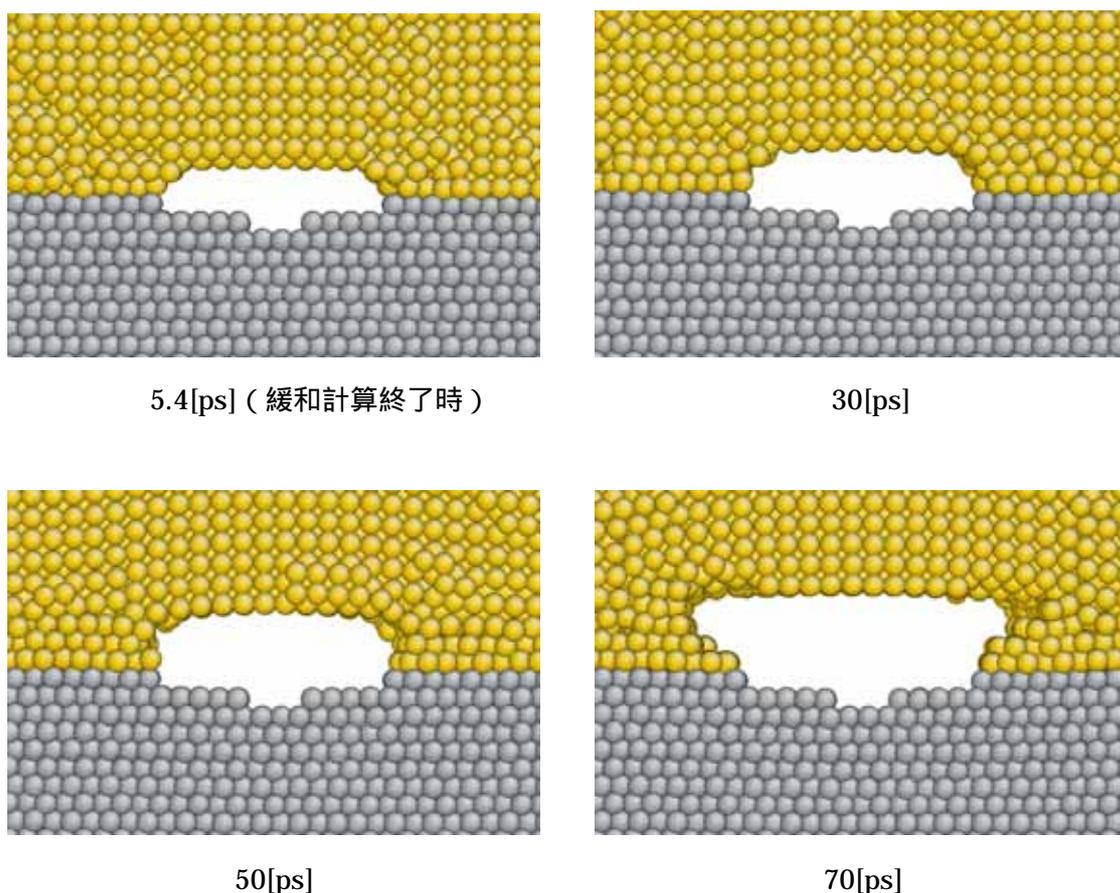


Fig.3.3.2 Cu の z 方向が<011>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）

Fig.3.3.3 に全原子 σ_z を平均した値の step 数による推移を示す。最初の部分転位が射出されたときの物性値は、 $\sigma_z = 6.0 \times 10^3$ [MPa]、 $\epsilon = 1.85$ [%]であった。

Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと比較するとかなり滑らかなグラフとなっている。転位射出における応力緩和や計算終了時にも σ_z が収束している様子は観察できない。すべり面の傾きが z 方向から大きく傾いているためだと思われる。

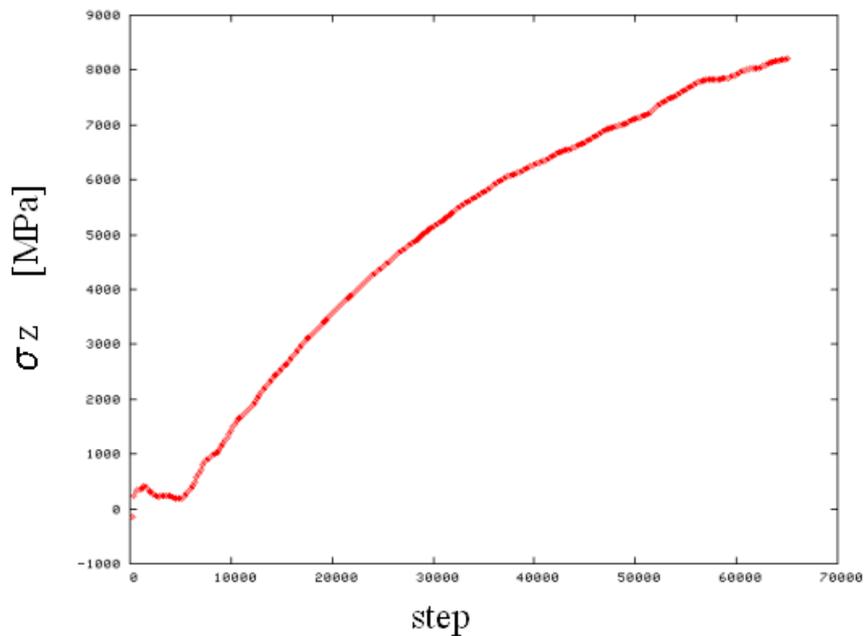


Fig.3.3.3 Cu の z 方向が<011>であるモデルにおける σ_z の step 数による変動

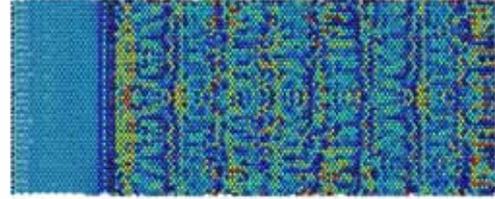
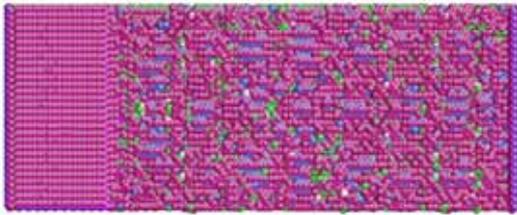
3.3.3. 界面に対するせん断応力による評価

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=21.6\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数を 269,227 個とした。その他の条件は Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと等しい。

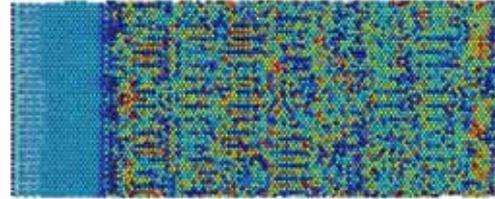
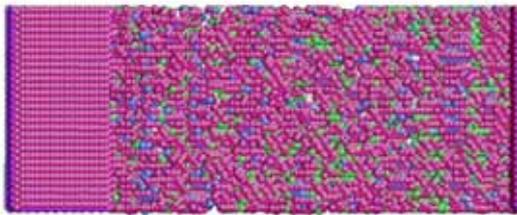
Fig.3.3.3 に界面のスナップショットを示す。Cu の z 方向が<111>であるモデルと同様に Fig.3.1.8 の AB 間を z 方向の上方から観察したスナップショットである。左図では配位数により着色した後、fcc 構造及び hcp 構造を保っている原子を消去し界面上の欠陥原子と y 方向の自由境界原子のみを可視化した。右図は、 τ_{yz} によるコンター図である。最大値、最小値及びカラーマップは Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと等しくした。



0[ps] (初期状態)



5.4[ps] (緩和計算終了時)



15[ps]



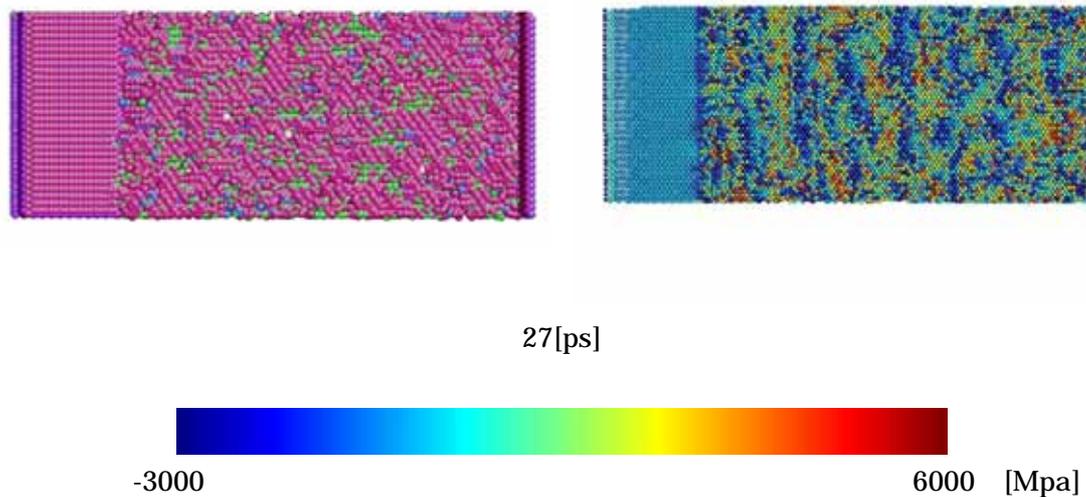


Fig.3.3.4 Cu の z 方向が<011>であるモデルの界面のスナップショット（せん断応力）

このモデルでは、強制変位に対する misfit 転位の動きを明確に観察することはできなかった。コンター図では青い部分（ τ_{yz} が低い部分）が徐々に少なくなはなったが、Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルほど明確な応力緩和は確認できなかった。

Fig.3.3.5 にこのモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を示す。ここでの τ_{yz} は全原子の平均値である。

τ_{yz} の最大値は 9.9×10^2 [MPa] だった。この値は Cu の z 方向が<111>であるモデルの 165[%]、misfit 転位が存在しないモデルの 32[%]に当たる値である。このことより misfit 転位の動きは確認できなかったが、応力緩和が起きていたと言える。

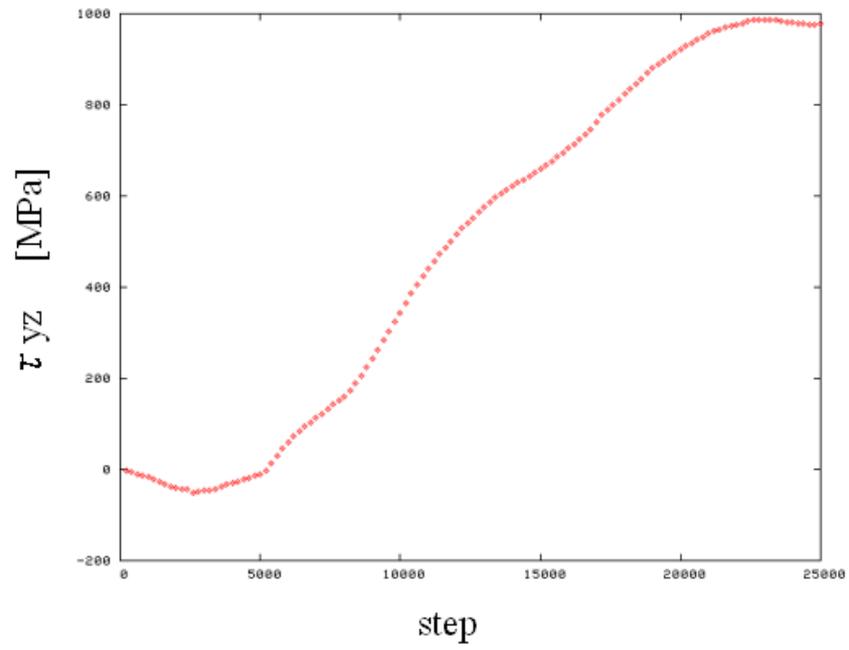


Fig.3.3.5 Cuのz方向が<011>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動

3.4. Cu の面方位が<001>であるモデルの解析結果及び考察

本節では、前節に引き続き Cu の面方位による影響を検証する。Cu の面方位を $z:<001>$, $x:<100>$, $y:<010>$ とした。

3.4.1. 接合エネルギーによる評価

計算系は以下のように変化した。material-connected state の計算系 (Cu/Ru 系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=27.5\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数は 287,932 個とした。material-separated state の Cu の計算系 (Cu 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=27.5\text{nm}$ 、 $z=6.1\text{nm}$ で、総原子数を 149,872 個、一方 Ru の計算系 (Ru 単体系) は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=26.1\text{nm}$ 、 $z=6.5\text{nm}$ であり、総原子数を 138,060 個とした。

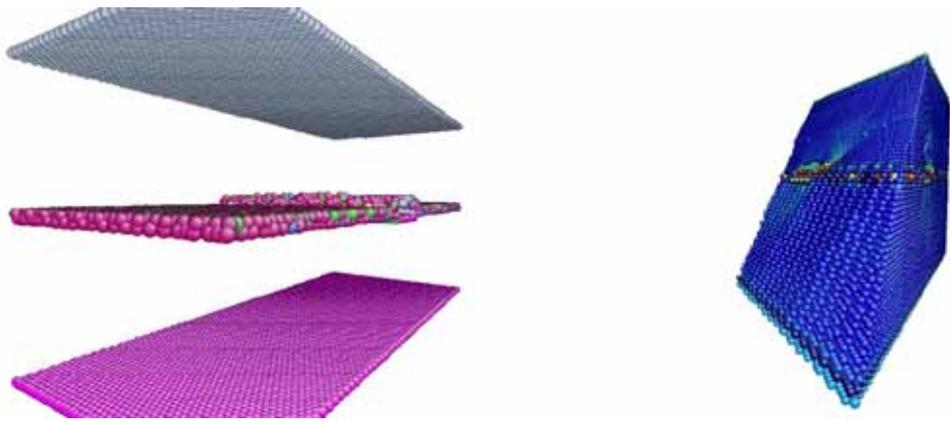
その他の条件は Cu の面方位が<111>であるモデルと等しくした。

平衡状態のエネルギーを求めると Cu-Ru 系が-1,449,252[eV]、Cu 単体系が-524,924[eV]、Ru 単体系が-917,119[eV]となった。material-connected state と material-separated state の差は 7,209[eV]であり、これを界面の面積で割り、単位面積あたりに換算し、単位変更を行うと、4.01[J/m²]であった。

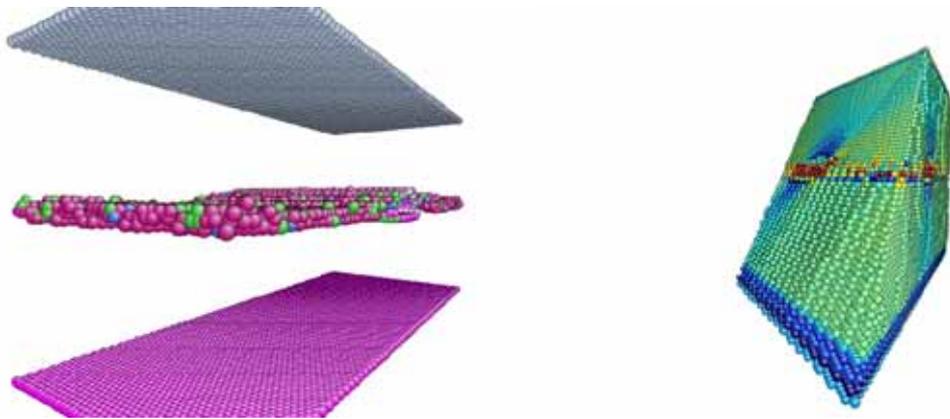
3.4.2. 界面に対する垂直応力による評価

計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=27.5\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数を 286,362 個とした。その他の条件は前節までの三つのモデルと等しくした。

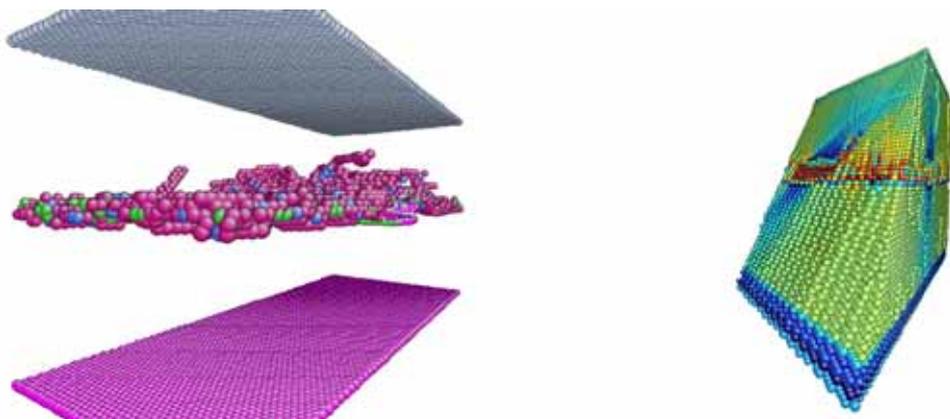
Fig.3.4.1 に、解析結果のスナップショットを示す。前節までの三つのモデルと同様に、左図は自由境界原子、欠陥原子のみを可視化した。右図は、解析モデルを主すべり面に沿って切断し、 σ_z をコンター図で表現した。最大値は 17,000[MPa]、最小値は-3,000[MPa]とした。局所的に値がこの範囲に入らない原子もあるが、その原子はカラーマップ外の色かつ彩度の低い色で表現している。



5.4[ps] (緩和計算終了時)



50[ps]



63[ps]



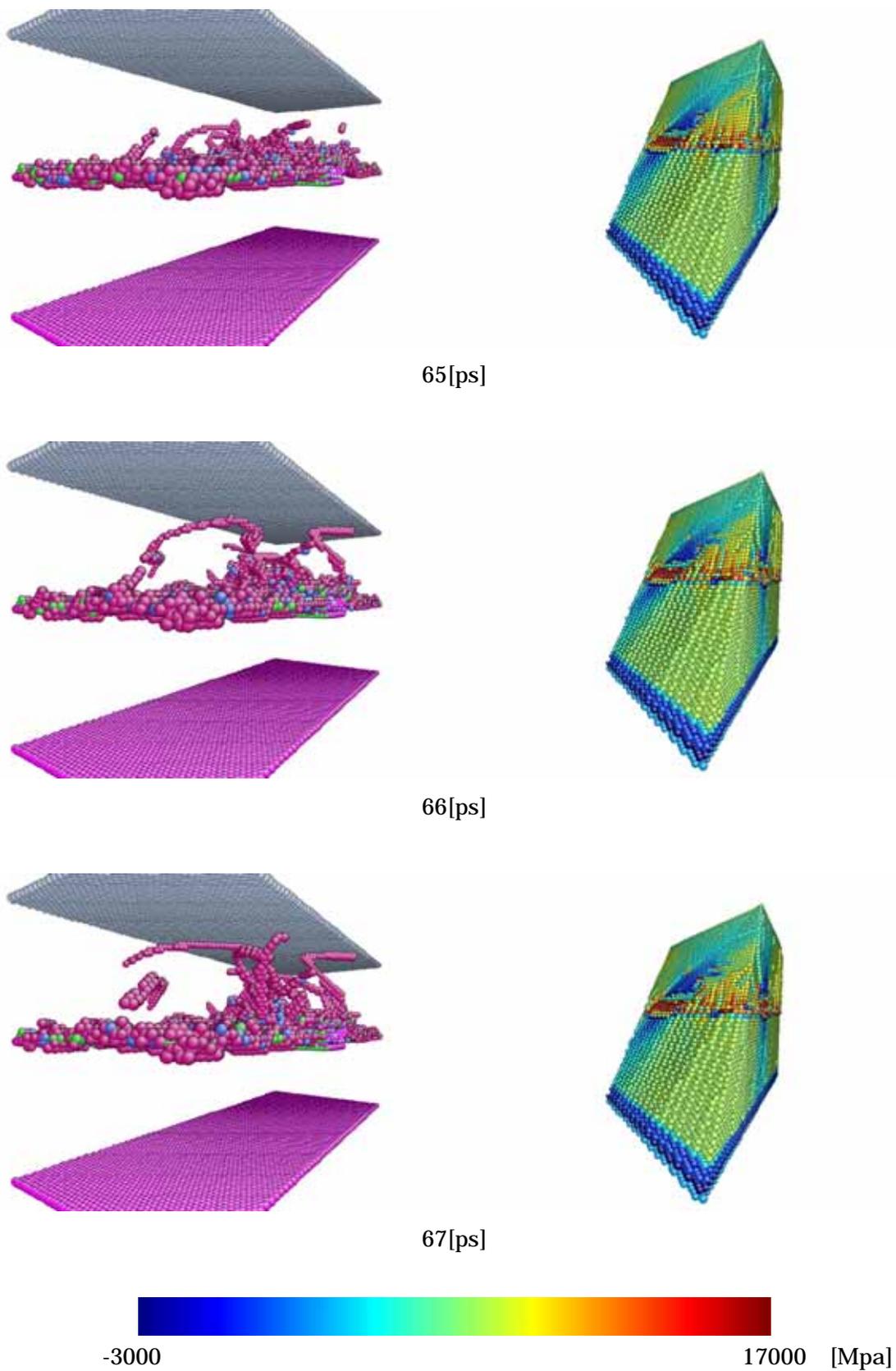


Fig.3.4.1 Cuのz方向が<001>であるモデルのスナップショット(概観)

Fig.3.4.1の左の図より、界面上の misfit 転位は、Cu の面方位が $\langle 011 \rangle$ であるモデルと同じように、界面の原子 misfit 転位の存在する部分と存在しない部分に分かれておらず、全面が misfit 転位で覆われている。また misfit 転位の z 方向の長さが大きくなっている。

前節までの三つのモデルとは異なり、最初の部分転位の時、一つの転位が進展するのではなく、ほぼ同時にいくつかの転位が、いくつかのすべり面に沿って射出され、同時に進展していった。転位の射出はき裂周辺からであった。この様子は 65[ps]の図で明確に観察できる。このモデルでは、いくつかのもすべり面とき裂が交差していることが分かる。それぞれの転位の形状は直線ではなく、転位ループを半分にした形状、Cu の面方位が $\langle 011 \rangle$ であるモデルと同じであった。

前節までの三つのモデルと同じく、転位は変位拘束原子に到達すると、それ以上進展しなかった。また転位が進展するのは Cu 側のみで、Ru 側には進展しなかった。

右のコンター図を見ていく。界面上やき裂周辺の σ_z が高いのは Cu の面方位が $\langle 011 \rangle$ であるモデルと同じである。だが今回のモデルでは前節までの三つのモデルで見られたような部分転位の転位芯への応力集中及び、部分転位がすべった面での応力緩和ははっきりとは確認できなかった。すべり面と z 方向の傾きは Cu の面方位が $\langle 011 \rangle$ であるモデルより小さいが、一度にいくつかの転位が射出されたので、目立った応力緩和、応力集中がなかったと言える。

また Fig.3.4.2 にき裂近傍の拡大図のスナップショットを示す。前節までの三つのモデルと同様に、き裂面積は大きくなったが、界面上の界面と平行方向及び Ru 側には進展せずに、Cu 側のみき裂が進展した。Cu 側での y 方向への進展の仕方は Cu の面方位が $\langle 011 \rangle$ であるモデルと似ている。だがこのモデルでも界面剥離につながるような挙動は観察できなかった。Cu の面方位が $\langle 001 \rangle$ のときも界面の密着度は大きく変わらないと言える。

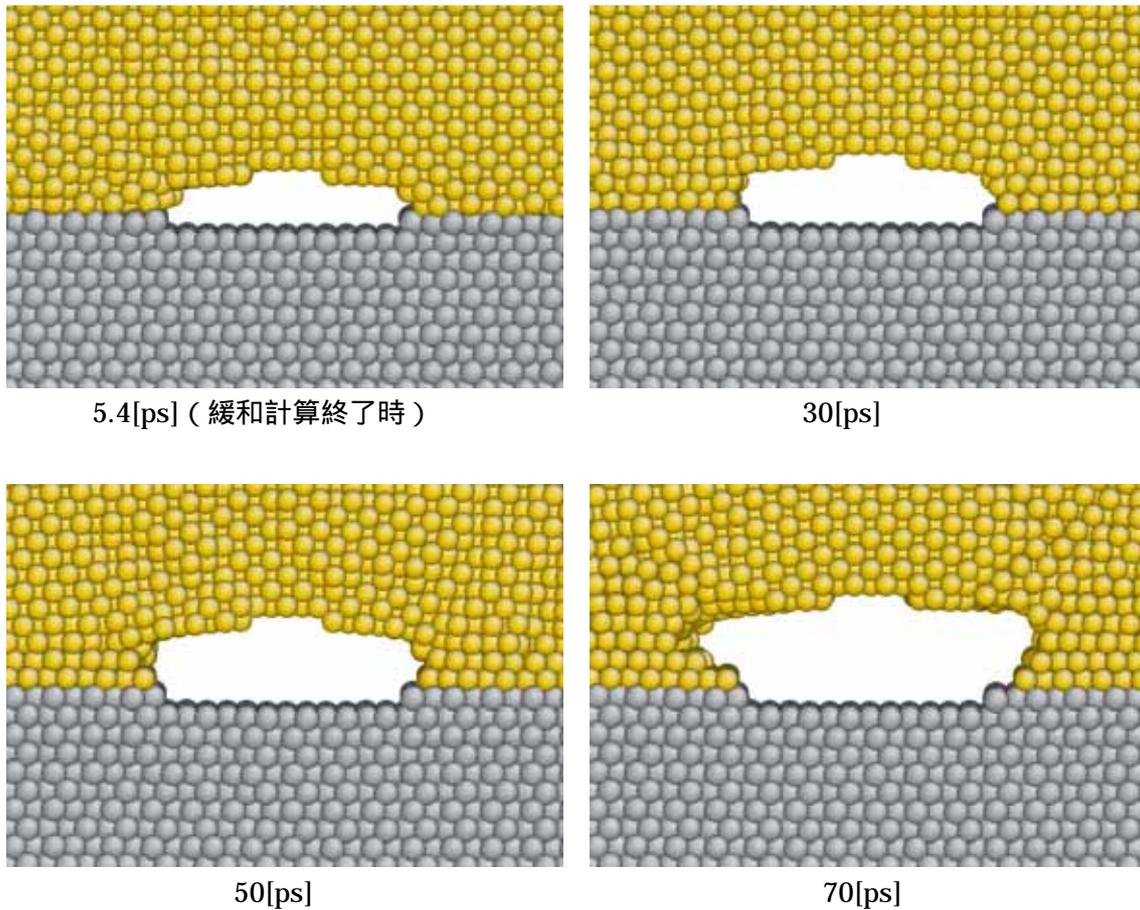


Fig.3.4.2 Cuのz方向が<001>であるモデルのスナップショット（き裂近傍の拡大図）

Fig.3.4.3 に全原子 σ_z を平均した値のstep数による推移を示す。最初の部分転位が射出されたときの物性値は、 $\sigma_z = 7.0 \times 10^3$ [MPa]、 $\epsilon = 3.81$ [%]であった。

部分転位がいくつも射出された63[ps]はstep数にすると、約60,000[step]であるが、**Fig.3.4.3**を見ると60,000[step]前後で応力緩和が起きている。コンター図でははっきりと確認できなかったが、応力緩和はどのモデルよりも明確に確認することができた。

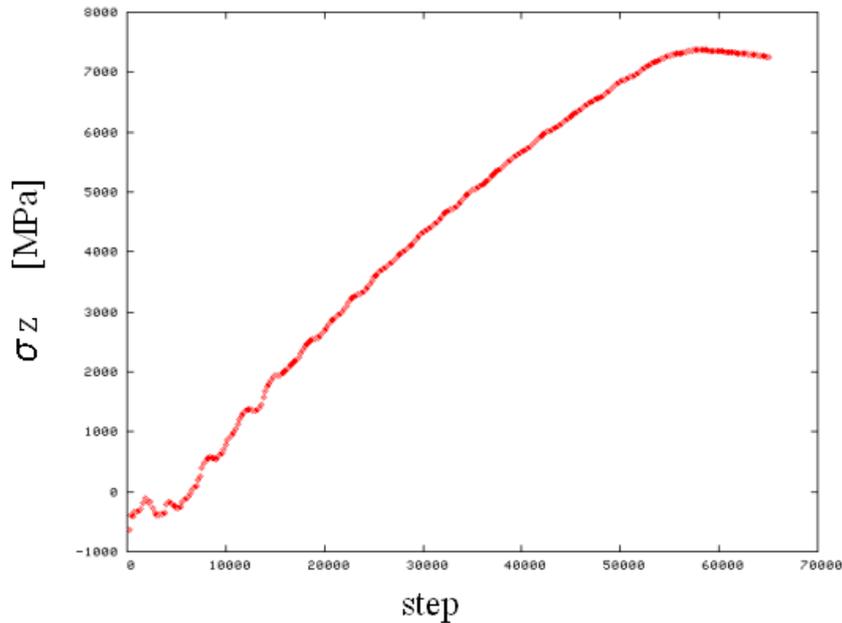


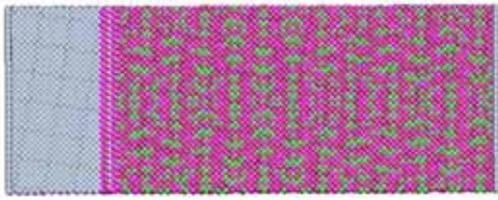
Fig.3.4.3 Cuのz方向が<111>であるモデルにおける σ_z のstep数による変動

3.4.3. 界面に対するせん断応力による評価

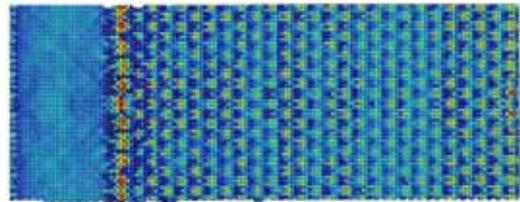
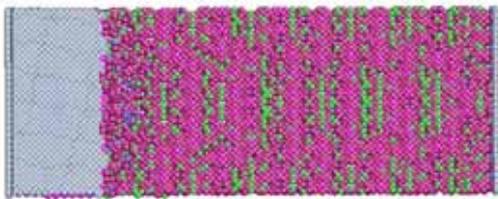
計算系は $x=10.5\text{nm}$ 、 $y=21.6\text{nm}$ 、 $z=12.7\text{nm}$ であり、総原子数を 269,227 個とした。その他の条件は前節までの三つのモデルと等しい。

Fig.3.4.4 に界面のスナップショットを示す。Cuのz方向が<111>であるモデルと同様に Fig.3.1.8 の AB 間を z 方向の上方から観察したスナップショットである。左図では配位数により着色した後、fcc 構造及び hcp 構造を保っている原子を消去し界面上の欠陥原子と y 方向の自由境界原子のみを可視化した。右図は、 τ_{yz} によるコンター図である。最大値、最小値及びカラーマップは Cu の z 方向が<111>であるモデル及び misfit 転位が存在しないモデルと等しくした。

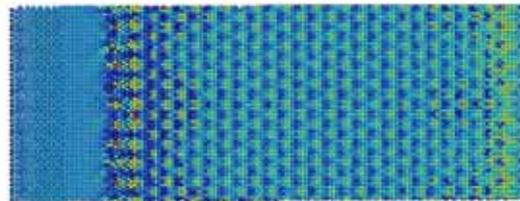
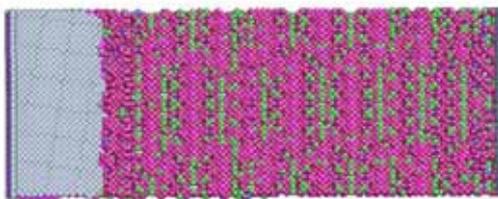
Fig.3.4.4 の左の図を見ると、misfit 転位の動きを観察することはできなかった。時間ごとに misfit 転位が変化してはいるものの、正確な進展の様子は確認できない。一方、右の図を見てみると、時間が進むと図の右端の τ_{yz} が高くなっている。またき裂周辺では、 τ_{yz} の高い部分と低い部分が互い違いになっている。Fig.3.1.9 の 16[ps]では、応力集中が起きてその後新たな misfit 転位が射出されているので、このモデルでもそのような現象がおきているのではにだろうか。



0[ps] (初期状態)



5.4[ps] (緩和計算終了時)



15[ps]



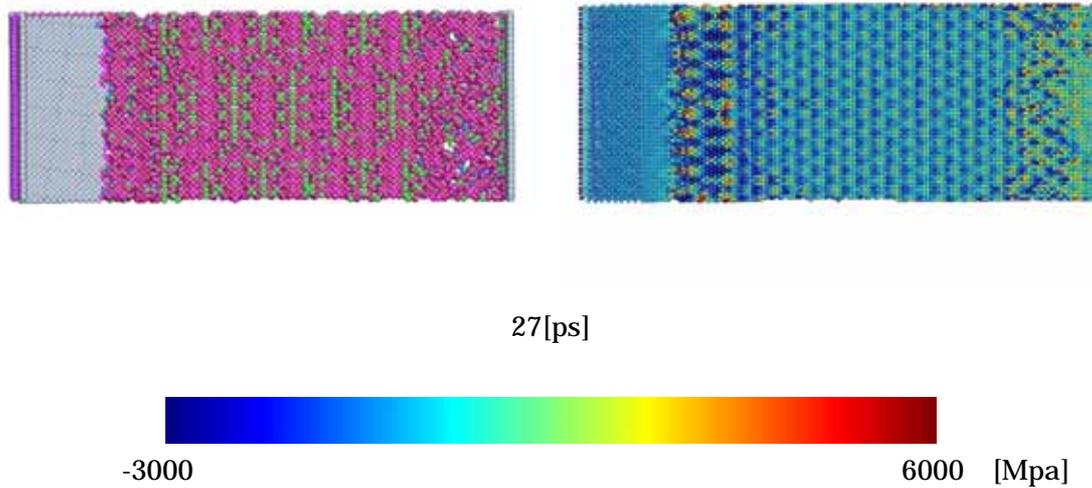


Fig.3.4.4 Cu の z 方向が<001>であるモデルの界面のスナップショット（せん断応力）

Fig.3.3.5 にこのモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を示す。ここでの τ_{yz} は全原子の平均値である。

τ_{yz} の最大値は 7.1×10^2 [MPa] だった。この値は Cu の z 方向が<111>であるモデルの 118[%]、misfit 転位が存在しないモデルの 23[%]に当たる値である。このことより明確な misfit 転位の動きは確認できなかったが、応力緩和が起きていたと言える。

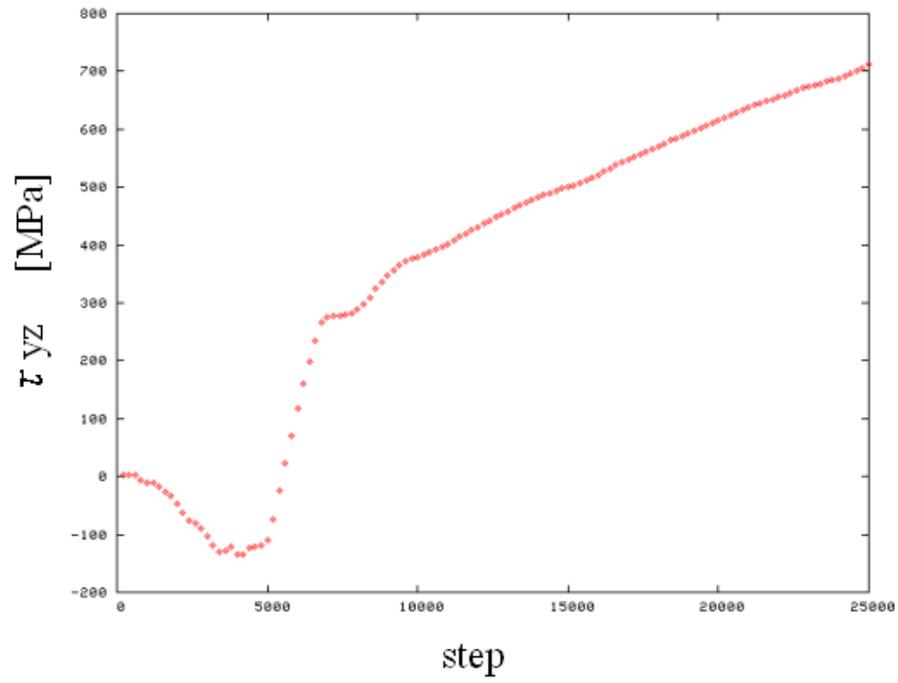


Fig.3.4.5 Cuのz方向が<001>であるモデルにおける τ_{yz} のstep数による変動

3.4.4. 界面剥離に対する Cu の面方位の影響

本節では Cu の面方位が界面剥離に与える影響を考察するため、Cu の z 方向がそれぞれ <111>、<011>、<001>であるモデルを比較していく。

まず前節で考察した misfit 転位の影響が Cu の z 方向がそれぞれ<011>、<001>であるモデルにも当てはまるかを考える。

接合エネルギーによる評価。第3章より Cu の z 方向が<111>であるモデルは 4.56[J/m²]、Cu の z 方向が<011>であるモデルは 3.48[J/m²]、Cu の z 方向が<001>であるモデルは 4.01[J/m²]となった。<111>モデルと比較して<011>モデルは 24%、<001>モデルは 12%小さな値だった。接合エネルギーのみ考慮すると、<111>モデル、<001>モデル、<011>モデルの順に安定である。

界面に対する垂直応力による評価。各モデルの最初の部分転位が射出されたときの物性値を Table.3.3 に示す。 σ_z に関しては、<111>モデルと比較して<011>であるモデルは 15%、<001>モデルは 35%大きな値となった。 に関しては、<111>モデルと比較して<011>であるモデルは 46%、<001>モデルは 114%大きな値となった。

| | σ_z [MPa] | [%] | step |
|----------|-------------------|------|--------|
| <111>モデル | 5.2×10^3 | 1.78 | 27,000 |
| <011>モデル | 6.0×10^3 | 2.60 | 37,000 |
| <001>モデル | 7.0×10^3 | 3.81 | 52,000 |

Table.3.4 転位射出時における Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルの物性値

Fig.3.4.6 に Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける σ_z の step 数による変動を示す。全体的な傾向として、<111>モデル、<011>モデル、<001>モデルの順に高い値となっている。

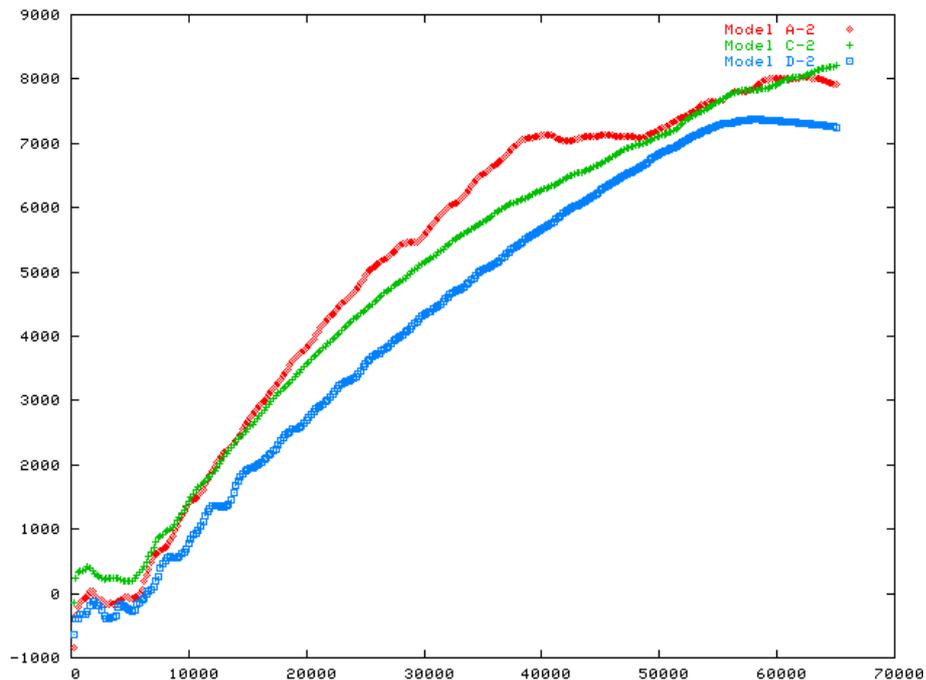


Fig.3.4.6 Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける σ_z の step 数による変動

界面に対するせん断応力による評価。各モデルの misfit 転位の動きを、Fig.3.1.8、Fig.3.3.3、Fig.3.4.3 より比較してみると、<111>モデルは明確な misfit 転位の動きを確認することができるが、<011>モデル、<001>モデルはスナップショットを見る限り、misfit 転位のはっきりした動きを確認することは出来なかった。

Fig.3.4.7 に Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動を示す。<111>、<011>、<001>モデルの最大値はそれぞれ、misfit 転位が存在しないモデルの最大値 3,000[MPa]の 20%、33%、23%となった。つまり τ_{yz} は misfit 転位が存在しないモデルと比較して十分に緩和されている。

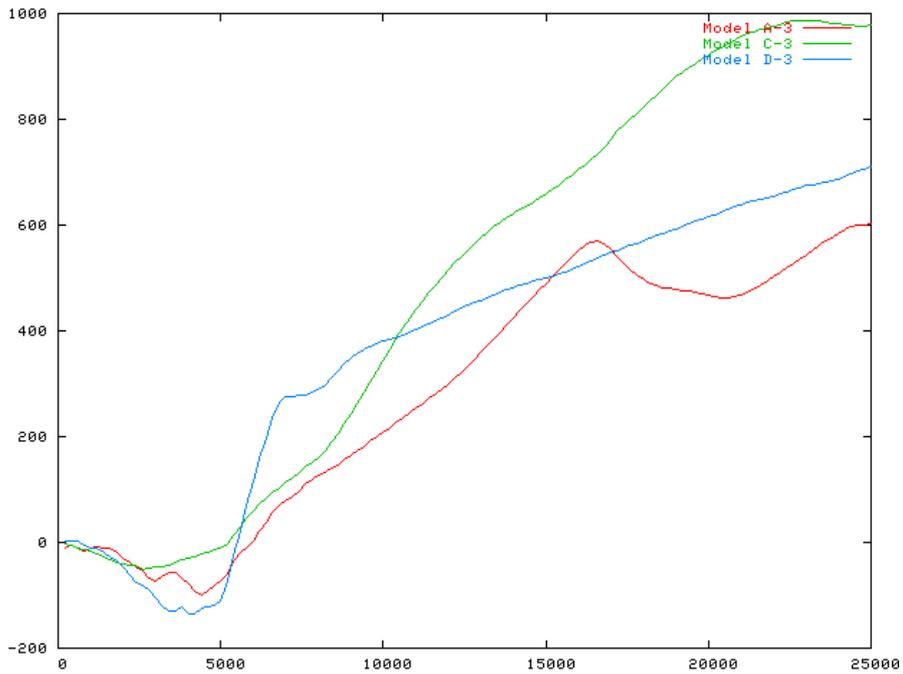


Fig.3.4.7 Cu の z 方向がそれぞれ<111>、<011>、<001>であるモデルにおける τ_{yz} の step 数による変動

以上の点より、前節で考察した misfit 転位の影響は 3 モデルともに当てはまることが分かった。

次に Cu の面方位による影響について考察する。

転位ループの発生する方向や、部分転位射出時の応力値は異なるものの、misfit 転位の有無で確認したような明確な差異は観察されなかった。

第4章 結果

本研究では Cu-Ru 間の界面剥離強度を取り扱ったのだが、どのモデルでも界面剥離は起きることはなかった。このことは Cu-Ru 間の界面がとても密着性が良く安定していることを示している。

全モデルの解析を通して、Ru には部分転位の射出及び進展が見られなかった。これは Cu と Ru の積層欠陥エネルギーを比較した場合、Ru のほうが5倍以上大きいことに起因した。またき裂も Cu 側には進展したが、Ru 側には進展しなかった。

界面に存在する misfit 転位について。界面に垂直応力を加えたときは垂直応力及び主すべり面での応力緩和には影響をあたえないが、ひずみに注目すると、部分転位が Cu に射出されるのを妨げる働きがあった。一方、界面にせん断応力を加えたときは界面上 misfit 転位の移動及び新たな misfit 転位の射出があり、せん断応力を緩和していた。

misfit 転位が存在すると、密着エネルギーは小さくなり、界面上に応力集中場ができる。今回は剥離に至らなかったが、さらに大きなひずみをかけると、misfit 転位の存在するモデルのほうが、剥離に至りやすいだろう。

Cu の面方位による影響については、大きな違いは確認できなかった。

参考文献

- [1] 岩崎富生 Adhesion-Strength Calculation and Measurement Techniques for Interfaces between Nano-scale Thin Films 応用数理 Vol.14, No.4 (20041222) pp. 334-345
- [2] 北村隆行 平方寛之 高橋可昌 低次元ナノ構造体の界面剥離発生・伝ば過程のその場観察 M&M2005 材料力学カンファレンス No.05-9 p.19,20
- [3] 結城良治、石川晴雄、岸本喜久雄、許金泉編著 培風館 「界面の力学」(1993)
- [4] X.W.ZHOU, H.N.G.WADLEY, R.A.JOHNSON ATOMIC SCALE STRUCTURE OF SPUTTERED METAL MULTILAYERS Acta mater. 49 (2001) p.4005 - 4015
- [5] T.Iwasaki Molecular dynamics study of adhesion strength and diffusion at interface between interconnect materials and underlay materials Computational Mechanics 25 (2000) p.78 - 86
- [6] 原祥太郎 ナノレイヤー金属材料における界面と転位の相互作用 The 19th Computational Mechanics Conference No.06-9 p.607、608
- [7] N.Bernstein E.B.tadmor Tight-binding calculations of stacking energies and twinnability in fcc metals (2004)

謝辞

本研究を進めるにあたり、酒井伸介教授、泉聡志助教授、原祥太郎助手をはじめとする酒井・泉研究室のみなさまには多大なご支援をいただきありがとうございました。

分子動力学法を学習するうえで、原助手にはとてもお世話になりました。質問に丁寧に答えて頂いたり、助言を頂いたりしたこと、とても感謝しています。泉助教授には研究会の度に、研究の指針となるような助言をしていただけて、とても参考になりました。

また諸先輩方には温かく接していただき、とても楽しい研究室生活を過ごすことが出来ました。

同輩の皆さんの頑張りは研究を進める上で大きな励みとなりました。

充実した一年を過ごすことが出来たのは、お世話になった皆さんのおかげです。本当にありがとうございました。

以上

p . 1 - p . 7 2 完

卒業論文

平成19年 2月 2日 提出

50245 松本 祐樹