622 ナノ薄膜の混合モード界面端はく離の 原子シミュレーション

Atomic Simulation on Mixed Mode Delamination of Nanoscale Thin Film from Interface Edge

○ 伏野 亮史 (京大院) 正 梅野 宜崇 (京大工) 正 北村 隆行 (京大工)

Ryoji FUSHINO, Yoshitaka UMENO and Takayuki KITAMURA

Graduate School of Engineering, Kyoto University, Yoshidahonmachi Sakyo-ku, Kyoto 606-8501

Key Words :Molecular Dynamics, Delamination, Thin Film, Interface Edge,
Interface Strength, Mixed Mode

1 結 言

薄膜材料の界面端は、材料のミスマッチによる応力集中が生じるため、はく離の起点になりやすい。したがって、薄膜材料の強度評価のためには、界面端からのはく離挙動を明らかにする必要がある。しかし、膜厚がナノオーダーになると、連続体力学に基づく評価ができないことが指摘されており、原子モデルによる評価が必要である。

そこで本研究では、ナノ薄膜接合体を対象に I・II 混合モードでの界面端はく離の原子シミュレーションを行い、はく離発生時の応力分布について検討した。

2 シミュレーション材料

原子間相互作用がモデルポテンシャルで表される 2 つの仮想材料 Material 1, Material 2 から成る 2 層積層材 (図 1) を対象とする。Material 1, 2 とも fcc 構造で、界面が (001) 面となるよう配置する。モデルポテンシャルには、経験的 2 体間ポテンシャルである Morse ポテンシャルを用いる。距離 r 離れた原子対によるエネルギーは

$$\Phi(r) = D \left(e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right) \quad (1)$$

で与えられる。ここで、 D , α , r_0 は原子の特性を表すパラメータである。Material 1, 2 のパラメータの値 (表 1) は、両材の格子定数が等しく、Material 2 の弾性係数が Material 1 のその約 2.5 倍となるよう設定した。異種原子間のパラメータ D_{1-2} , α_{1-2} , r_{01-2} は次の組合せ法則の式から評価する⁽¹⁾。

$$D_{1-2} = (D_1 D_2)^{1/2} / 10 \quad (2)$$

$$\alpha_{1-2} = (\alpha_1 + \alpha_2) / 2 \quad (3)$$

$$r_{01-2} = (q_1 q_2)^{1/2} + \ln 2 / \alpha_{1-2} \quad (4)$$

$$q_i = r_{0i} - \ln 2 / \alpha_i \quad (5)$$

ただし、界面の結合の強さを表す D_{1-2} は界面における比較的弱い結合を模擬するため、 D_1 , D_2 の相乗平均の 1/10 とした。

3 界面の理想強度

本材界面の理想強度 (界面端が存在しないときの界面強度) を求める。図 2(a) に示すセルに x , y 方向に周期境界条件を課し、分子動力学法による原子シミュレーションを行った。Material 2 の下端 2 層を拘束し、Material 1 の上端 1 層に引張荷重とせ

Fig. 1 Schematic illustration of simulation object.

Table 1 Parameters in Morse potential.

	$D[\text{eV}]$	$\alpha[1/\text{nm}]$	$r_0[\text{nm}]$
Material 1	0.3429	13.59	0.2866
Material 2	0.7395	15.63	0.2751

ん断荷重を同時に負荷することで、界面破壊を生じさせた。界面破壊時の界面応力の引張成分 σ_{zz}^c , せん断成分 τ_{yz}^c を図 2(b) に示す。プロット点を結んだ線はほぼ直線とみなすことができ、その直線式は

$$0.159\sigma_{zz}^c + 0.319\tau_{yz}^c = 1 \quad (6)$$

と表せる。ここで、次に示す応力指標 ν を考える。

$$\nu \equiv 0.159\sigma_{zz} + 0.319\tau_{yz} \quad (7)$$

すなわち、 ν は引張・せん断混合モードにおける応力指標であり、 $\nu=1$ は理想強度に達したことを意味する。

4 混合モード界面端はく離の原子シミュレーション

図 3 にシミュレーションセルを示す。原子数は Material 1 が 1320 (セルサイズ: $a_0 \times 55a_0 \times 6a_0$), Material 2 が 1440 (セルサイズ: $a_0 \times 60a_0 \times 6a_0$) である (a_0 は格子定数)。 x 軸方向には周期境界条件を適用した。図 4 に示すように、Material 2 の下端 2 層を固定層とし、まず Material 1 の上端 1 層にせん断荷重 $F_y=0.1\text{nN}$ を負荷した。その後 Material 1 の上端 2 層端部にある 8 つの原子に引張荷重 F_z を徐々に負荷していったところ、 $F_z=0.228\text{nN}$ において図中 A の界面端から脆性的に

Fig. 2 Ideal strength of interface.

Fig. 3 Simulation cell for delamination from interface edge.

Fig. 4 Constraint and loading system in mixed mode delamination.

はく離が発生した。はく離に至る過程およびはく離発生時において、界面以外の部位に塑性変形は見られなかった。

各負荷段階における界面上の引張応力 σ_{zz} とせん断応力 τ_{yz} の分布を図5, 6に示す。引張応力分布では $y \leq 3\text{nm}$ の領域で応力集中が発生しているが、界面端応力は無限大に発散せず、特異応力場とはならない。これは、界面がその理想強度以上の応力を受けもつことができないためである。せん断応力分布では界面端近傍での応力集中は見られない。式(7)より評価した界面上の ν の分布を図7に示す。負荷が大きくなると、界面端より内側の位置の ν が順に1に達し、はく離発生時には、界面端から約1nmの位置の ν が1に達する。これは、はく離が発生するとき界面端から約1nmの領域の応力が界面の理想強度に達していることを示している。

Fig. 5 Tensile stress distribution along interface under various loads.

Fig. 6 Shear stress distribution along interface under various loads.

Fig. 7 Stress index distribution under various loads.

文 献

- (1) S. K. Das, D. Roy and S. Sengupta, *J.Phys.F*, **7**, (1977), pp.5-13