

Title	原子モデルを用いた結晶粒界の強度と拡散特性の研究
Author(s)	齋藤, 賢一
Citation	
Issue Date	
Text Version	ETD
URL	https://doi.org/10.11501/3128994
DOI	10.11501/3128994
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

氏名	齋藤賢一
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第13094号
学位授与年月日	平成9年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当 工学研究科機械工学専攻
学位論文名	原子モデルを用いた結晶粒界の強度と拡散特性の研究
論文審査委員	(主査) 教授 北川 浩 教授 城野 政弘 教授 三宅 裕 教授 稲葉 武彦 教授 香月 正司 教授 世古口言彦 教授 花崎 伸作 教授 久保 司郎 教授 馬越 佑吉

論文内容の要旨

本論文は、金属材料中に存在する結晶粒界の強度と拡散特性について、基本構成要素である原子構造とその移動特性の力学的解析に基づく検討を行なった結果をまとめたものである。原子モデルを用いる分子動力学法とモンテカルロ法により、粒界構造と粒界エネルギー及び理想強度のかかわり、粒界近傍における原子移動の基本機構と拡散特性の評価、表面と粒界構造の動的干渉などについて検討がなされている。本論文は7章から構成され、以下の内容となっている。

第1章では、金属中の結晶粒界が材料特性に及ぼす影響についてこれまで行われてきた研究状況についてまとめると共に、原子モデルを用いて粒界の強度と拡散特性を検討する必要性について述べている。

第2章では、分子動力学法を用いる解析方法について説明し、粒界を原子モデル化するために必要な理論について述べている。また有効媒質理論に基づき誘導される原子間ポテンシャルによる原子間相互作用の評価の妥当性について検討し、アルミニウムの表面特性・熱的特性・弾性特性や対応粒界の構造、粒界エネルギーの評価値は、実験値等に基づく既往知見とほぼ一致する結果が得られることを示している。

第3章では、粒界強度を理想強度の観点から検討し、分子動力学法を用いた対応粒界の引張りシミュレーションの結果から、粒界破壊応力と破壊エネルギーは粒界エネルギーに大きく依存すること、拘束条件の影響が非常に大きいことを明らかにしている。

第4章では、粒界拡散の素過程となる、格子欠陥(点欠陥)と干渉しつつ生じる原子移動を定量的に評価した結果について述べている。粒界近傍では外力が加わってへき開やせん断変形を起こす際の原子移動量が温度の影響を強く受けることを明らかにしている。

第5章では、ストレスマイグレーションによる破壊が問題となる、電子デバイス中のアルミニウム配線のバンブー粒界を原子モデル化し、分子動力学解析を行って、その局所構造に依存して拡散量が大きく変化すること、また拡散係数は温度依存性・応力依存性・粒界構造依存性が顕著であることを示している。

第6章では、表面と粒界の会合する部分の強度特性についての検討結果を述べている。対応粒界により構成される会合部に引張荷重が加わる場合、原子層のすべりの効果が原子レベルでの応力緩和機構として重要であることを見出している。

第7章では以上で得られた結果を総括し、本論文の結論としている。

論文審査の結果の要旨

結晶粒界は結晶材料の強度特性や機能に強く影響し、特に LSI などの電子デバイスに用いられる非常に微細な寸法の材料においては、その特性を決定付ける。粒界特性の評価には、原子構造と局所的に高いエネルギーの緩和機構としての原子拡散などに伴う構造変化の詳細な検討が重要であるが、本論文では分子動力学法による解析によってこの問題の解明を行っており、主な成果を要約すると次の通りである。

- (1) 多体原子間相互作用を考慮することができる有効媒質理論に基づく分子動力学法によって、アルミニウムに対して表面特性・熱的特性・弾性特性や対応粒界の構造、粒界エネルギーなどについて実験値等に基づくこれまでの知見と比較することにより妥当な評価が得られることを検証し、不均一な原子構造に対しても精度の高い解析が可能であることを示している。
- (2) 分子動力学法により粒界構造に固有な強度の評価を行なう方法とその有効性を示すとともに、粒界破壊応力と破壊エネルギーの粒界エネルギー依存性を明らかにしている。さらに拘束の強さに依存して、粒界破壊について延性-脆性遷移を生じるメカニズムを見出している。
- (3) 有限温度におけるねじれ粒界での拡散量の定量評価を行ない、特徴的なリング拡散機構が生じること等を見出すとともに、外力負荷によるへき開やせん断変形の際の原子移動量の温度依存性を明らかにしている。
- (4) 電子デバイス中のアルミニウム配線で問題となるストレスマイグレーション機構を、原子拡散量の評価と緩和機構の2面から追求して、拡散係数の温度依存性・ひずみ依存性・粒界構造依存性が顕著であることを示すとともに、表面と対応粒界により構成される会合部に引張荷重が加わる場合、原子拡散に加えて原子層のすべりの効果が大きいことを明らかにしている。

以上のように、本論文は、原子構造の動的な変化を力学的に解析することによって、結晶粒界の強度・機能特性を律している基本的機構を明らかにするとともに、LSI 中の配線などの微細寸法部品の強度評価に対して新しい可能性を示唆する知見を得ており、その成果は、材料強度学や材料設計学の発展に寄与するところが大きい。よって、本論文は博士論文として価値あるものと認める。