

(4) 材料物性のコンピュータ・シミュレーション —金属ナノ細線の切断過程—

谷森 奏一郎

研究目的

近年、VLSIの発展は目覚ましく、将来、ナノメートルサイズの素子が作成されることが期待されている。そのために、素子間の配線に使用するナノメートルサイズの金属細線の作成とその物性の研究が盛んに行われている。長期間VLSIを安定動作させるためには、金属細線の変形機構や強度を考慮する必要がある。本研究では、ナノメートルサイズの金属細線の変形メカニズムと強度の関係をモンテカルロ・シミュレーションを用いて調べることを目的としている。

シミュレーションの方法と結果

材料として、実験でしばしば使われるAuを選んだ。細線として、Auのfcc格子から切り出され、二つの原子層に挟まれた、棒状の原子の塊(図1.a)を考えた。この細線は5層の(001)面からなり、各面には12または13個の原子が存在する。二つの原子層の間隔を徐々に広げながら、モンテカルロ法を用いて、温度300Kで原子の安定な配置を探した。二原子間の相互作用として、Morseポテンシャルを仮定した。

細線は、張力が細線の伸びに比例する弾性変形と張力が急に減少する降伏を繰り返して切断する。このことは実験でも測定されている。図1に示すように、細線が伸びるにつれて細線の原子層の数が増加する降伏は、層の数を増やす原子クラスターのすべり変形に対応すると考えている。根拠として、本研究や実験で得られている降伏応力はバルクの降伏応力に比べて数十倍大きい点があげられる。すべりの機構が細線とバルクでは異なることが、降伏応力の値に反映していると推定される。

今後の課題

今後の課題は、温度や細線のサイズ、細線の結晶

方位をかえると細線の変形がどのように変化するかを調べることである。また、細線の引張り変形だけでなく、せん断・ねじり変形も調べる予定である。

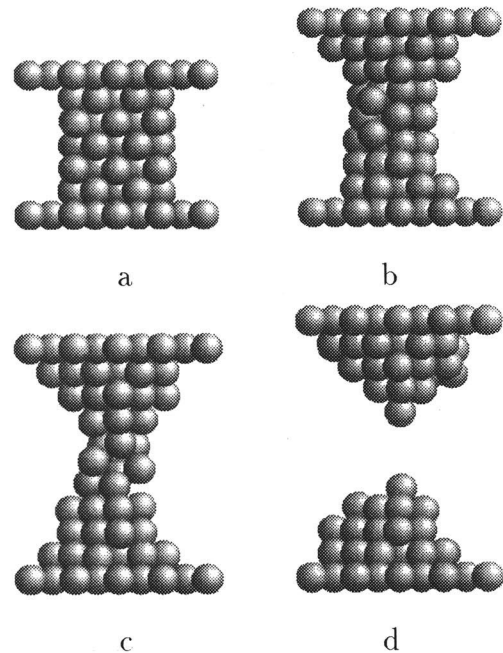


図1：細線の切断過程における原子配置の変化

研究発表

- 1) 谷森奏一郎、鳴村修二等：「金属ナノワイヤの切断のモンテカルロ・シミュレーション」, 日本金属学会・日本鉄鋼協会中四国支部合同講演大会, 松江(1998).
- 2) 谷森奏一郎、鳴村修二等：「金属細線の切断のモンテカルロ・シミュレーション」, 日本物理学会秋の分科会(1998).
- 3) 谷森奏一郎、鳴村修二：「金属細線の切断における原子緩和のシミュレーション」, 第4回分子動力学シンポジウム(日本材料学会), 京都(1998).

連絡先

TEL: 0836-35-9111(内線8831) FAX: 0836-35-9492
E-mail: tanimori@butsuri.apsci.yamaguchi-u.ac.jp