

# Tersoff 型原子間ポテンシャルを用いた分子動力学法による 引張変形下における単結晶シリコンの不安定挙動

金舛 育実\*・大村 訓史\*

(令和 4 年10月28日受付)

## Molecular dynamics study of instability behavior of single-crystal silicon under uniaxial tension using Tersoff potential

Ikumi KANEMASU and Satoshi OHMURA

(Received Oct. 28, 2022)

### Abstract

Instability behavior of single-crystal silicon under tensile deformation has been investigated by molecular-dynamics simulations based on Tersoff-type interatomic potential for the two proposed potential parameters. From the stress-strain curves obtained from the simulations, it is confirmed that the maximum tensile stress decreases with increasing temperature for both parameters. However, there are significant differences in the behavior after the stress release depending on the parameter type, indicating that defects such as dislocations or voids are formed differently.

**Key Words:** molecular dynamics, uniaxial tension, stress-strain curve, silicon, Tersoff-type potential

### 1. はじめに

シリコンは安定した構造を持つことや加工が容易なこと  
から半導体の基板として広く使用されており、その強度特  
性に関する研究がさかんに行われている。さらに近年の超  
微細加工技術の進展によって、強度特性を原子レベルで理  
解することが必要とされており、分子動力学法がその強力  
な手法として使われている<sup>1,2</sup>。分子動力学法とは、物質を  
構成する各原子の運動方程式を数値的に解くことによりそ  
の物質の性質を調べる手法である。分子動力学法から得ら  
れる結果は原子に作用する力を求めるための原子間ポテン  
シャルに依存することが分かっている。結晶シリコンの分  
子動力学シミュレーションにおいては、Tersoff 型の原子  
間ポテンシャルが用いられることが多く、Si(B)<sup>3</sup>、Si(C)<sup>4</sup>  
の 2 種類のパラメータセットが用意されている。Si(B)  
は表面の構造を精度よく記述でき、Si(C)はバルクや点欠

陥に適しているという特徴がある。結晶シリコンの強度特  
性を原子レベルで理解する上では、このような特徴に加  
え、引張変形下のような非平衡状態においてポテンシャル  
パラメータの違いが計算結果にどのような影響を与える  
かを知る必要がある。そこで、今回 Si(B)、Si(C)の 2 種  
類のポテンシャルパラメータを用いた分子動力学シミュ  
レーションを行い、引張変形下における単結晶シリコンの  
不安定挙動の違いを調べた。

### 2. 計算の詳細

結晶 Si の単位格子を  $5 \times 5 \times 5$  並べた総粒子数1000個  
の系を用い、x, y, z のいずれの方向にも周期境界条件を  
適用することで単結晶のバルクとした。分子動力学計算は  
大規模計算用の LAMMPS<sup>5</sup>を使用した。原子に作用する  
力は Tersoff 型原子間ポテンシャルを用い、2 種類のポテ  
ンシャルパラメータ Si(B)、Si(C)を使用した。具体的

\* 広島工業大学工学部環境土木工学科

なパラメーターの値は表1に示している。温度は1 K, 300 K, 600 Kの3通りとし、それぞれの温度においてMaxwell分布に従うように各原子の初速度の与え方を変え、8セット用意した。

まず、それぞれの温度に対して20 psの温度・圧力一定の分子動力学シミュレーションを行い、その後、等温・等圧アンサンブルを用いてx, y方向の応力が0になるように緩和させながら、ひずみ速度 $1.0 \times 10^9$  /sでz方向[001]に引張荷重を加え続けた。

表1 本研究で使用した Tersoff 型ポテンシャルのパラメーター<sup>2,3,4</sup>

	Si (B)	Si (C)
$A$ [eV]	$3.2647 \times 10^3$	$1.8308 \times 10^3$
$B$ [eV]	$9.5373 \times 10^1$	$4.7118 \times 10^2$
$\lambda_1$ [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	3.2394	2.4799
$\lambda_2$ [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	1.3258	1.7322
$\lambda_3$ [ $\text{\AA}^{-1}$ ]	1.3258	1.7322
$\beta$	$3.3675 \times 10^{-1}$	$1.1000 \times 10^{-6}$
$n$	$2.2956 \times 10^1$	$7.8734 \times 10^1$
$c$	4.8381	$1.0039 \times 10^5$
$d$	2.0417	$1.6217 \times 10^1$
$h$	0.0000	$-5.9825 \times 10^{-1}$
$R$ [ $\text{\AA}$ ]	3.0	2.85
$D$ [ $\text{\AA}$ ]	0.2	0.15

### 3. 結果と考察

#### 3.1 応力-ひずみ関係の温度依存性

パラメーター Si(B), Si(C)を用いた分子動力学シミュレーションによって得られた応力-ひずみ曲線の温度依存性をそれぞれ図1, 図2に示す。ここで横軸は工学ひずみ $\epsilon$ , 縦軸は応力 $\sigma$  (GPa)である。また、600 Kにおける引張過程の原子配置を図の下部に示す。

図1に示すように、パラメーター Si(B)を用いた場合、1 Kでは $\epsilon = 0.4$ 付近で一度応力が減少したものの応力開放は起こらず再び応力は増加している。300 Kにおいては、 $\epsilon = 0.3$ 付近で応力開放が起こる。また、600 Kにおいては、 $\epsilon = 0.25$ 付近で応力開放が起こっている。1 K, 300 Kでは初速度の与え方による影響は小さく、ほぼグラフが一致している。一方、600 Kでは応力開放が起こるまでに与えるひずみにばらつきがあり、解放後も初速度の与え方による影響が他の温度に比べて大きい。

パラメーター Si(C)を用いた場合(図2), 1 Kでは $\epsilon = 0.42$ 付近で応力開放が起こり、応力が12 GPaほど低下し、その後応力は増加している。300 Kと600 Kにおいては $\epsilon = 0.33$ ,  $\epsilon = 0.26$ 付近でそれぞれ応力開放が起こって

いる。ともにグラフの概形は一致しており、応力が解放された後はひずみを加えても応力の増加はほとんど見られない。

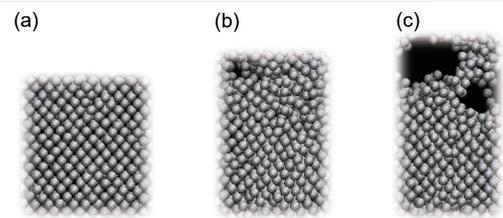
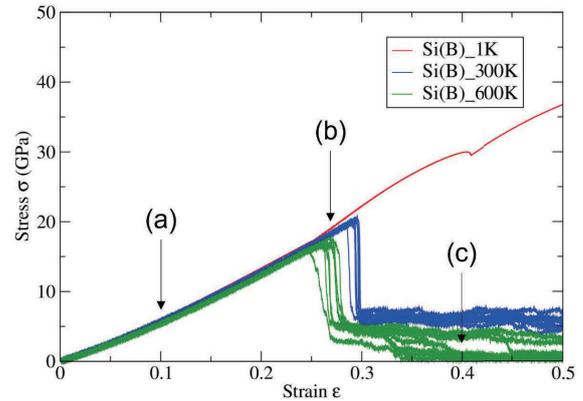


図1 (上部) パラメーター Si(B)を用いた計算から得られた応力-ひずみ曲線。赤, 青, 緑の線はそれぞれ, 1 K, 300 K, 600 Kの結果を示す。(下部) 600 Kの引張過程(a)  $\epsilon = 0.1$ , (b)  $\epsilon = 0.27$ , (c)  $\epsilon = 0.4$ における原子配置

#### 3.2 Si(B), Si(C)の応力-ひずみ曲線の違い

Si(B), Si(C)のどちらのパラメーターを使用しても、温度が高くなるにつれ、応力開放が起こるまでに与えられるひずみは小さくなり、最大応力も低下する。しかし、Si(C)の方が300 Kと600 Kの差が大きい。また、600 Kではどちらも $\epsilon = 0.27$ 付近で応力開放が起こるが、その後の挙動がSi(C)に比べSi(B)の方が初速度の与え方による影響が大きく、ばらつきが出ている。

#### 3.3 Si(B), Si(C)の引張変形下の原子配置の違い

600 Kにおける原子配置(a)  $\epsilon = 0.1$ , (b)  $\epsilon = 0.27$ , (c)  $\epsilon = 0.4$ について考察する。図1, パラメーター Si(B)を使用した場合の(a)  $\epsilon = 0.1$ では、構造はほとんど変化していない。しかし(b)  $\epsilon = 0.27$ においては原子構造が乱れ、数原子サイズのボイドが形成された(図1-(b)の左上部)。(c)  $\epsilon = 0.4$ では、 $\epsilon = 0.27$ で形成された微小なボイドが成長し数十原子サイズのボイドとなっており、上部に集中して発生している。一方、図2のパラメーター Si(C)を使用した場合において、(a)  $\epsilon = 0.1$ では、Si(B)の場合と同様、構造はほとんど変化しておらず図1-(a)とあまり違いは見られない。(b)  $\epsilon = 0.27$ においては、原子構造の乱れが生じている。(c)  $\epsilon = 0.4$ では系全体の原子配置が崩れている

が、Si(B)のようなボイド（図1-(c)）は形成されていない。この違いは、応力開放後の挙動にも影響を与えている。図1の応力-ひずみ曲線を見ると、600 Kの応力開放後の挙動が初速度の与え方によって大きくばらついていることがわかる。

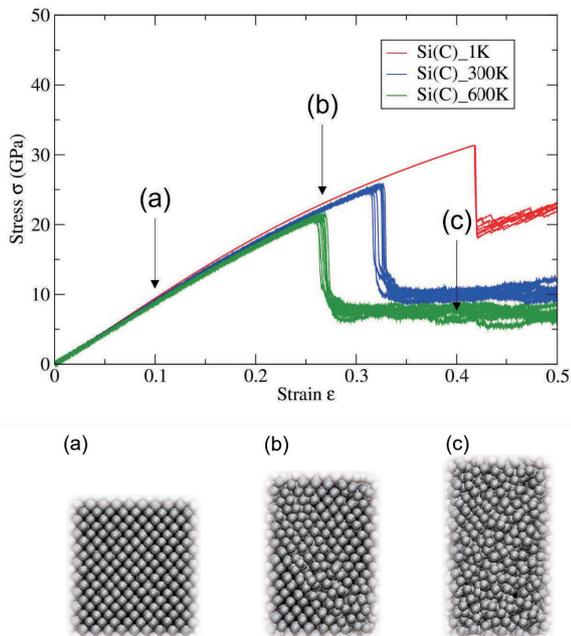


図2 (上部) パラメーター Si(C)を用いた計算から得られた応力-ひずみ曲線。赤、青、緑の線はそれぞれ、1 K、300 K、600 Kの結果を示す。(下部) 600 Kの引張過程(a)  $\epsilon = 0.1$ , (b)  $\epsilon = 0.27$ , (c)  $\epsilon = 0.4$ における原子配置

これは図1-(c)のようなボイドが形成された場合は破断に伴って応力が解放されやすいが、初速度の与え方によってはボイドが形成される場所や大きさが異なるなどして、 $\epsilon = 0.5$ までに破断に至らないことがあるためである。一方、パラメーター Si(C)を用いた場合はボイドが形成されないため、応力開放後の挙動は初速度の与え方に依存せず、Si(B)の場合（図1）に比べグラフの概形にばらつきがない。

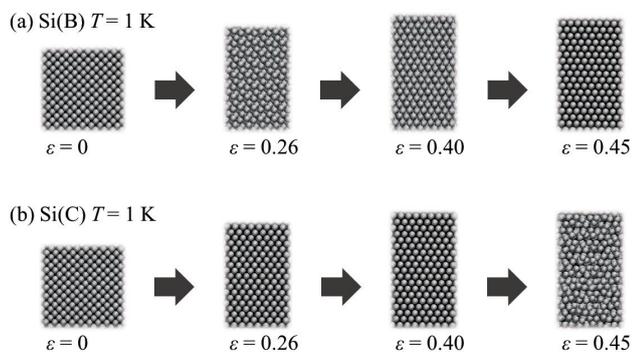


図3 1 Kにおける引張変形下での原子配置。(a)パラメーター Si(B)を用いた場合 (b)パラメーター Si(C)を用いた場合。

1 Kにおける応力-ひずみ曲線を見ると、図1に示すように、パラメーター Si(B)を用いた場合、 $\epsilon = 0.4$ 付近で応力が1 GPaほど減少しているが、再び応力は増加している。これは図3-(a)に示すように構造全体で転位が発生した後すぐに構造が回復したためだと考えられる。一方、パラメーター Si(C)を用いた場合、このような構造の回復は見られない。しかしながら、応力開放後に応力が再び増加している。これは $\epsilon = 0.41$ で構造が変化したあとも、ある程度引張強度を持っているためだと考える。

#### 4. まとめ

今回、Si(B)、Si(C)の2種類のポテンシャルパラメーターを用いた分子動力学シミュレーションによって引張変形下における単結晶シリコンの不安定挙動について検討し、以下の結果が得られた。

どちらのパラメーターにおいても温度が高くなるにつれ応力開放が起こるまでに与えられるひずみは小さくなり、最大応力も低下する。しかしながらパラメーターの種類によって応力開放後の挙動に違いがあり転位やボイドなどの欠陥の形成状況が異なる。1 Kでの引張変形の場合、Si(B)を用いると応力開放は起こらないがSi(C)を用いたシミュレーションでは $\epsilon = 0.4$ 付近で構造が乱れ応力開放が起こる。また600 KではSi(B)を用いると初速度の与え方によって応力開放が起こるまでに与えられるひずみと応力開放後の挙動にばらつきが出ている。一方Si(C)を用いた場合、初速度の与え方によるばらつきは小さい。

#### 謝 辞

本研究は公益財団法人サタケ技術振興団の助成を受けたものです。

#### 文献

- 1 K. Shimamura *et al* J. Phys.: Conf. Ser. **402** 012044 (2012)
- 2 大石直樹, 神戸大学大学院博士課程前期課程機械工学専攻 修士論文 (2010)
- 3 J. Tersoff Phys. Rev. B **37** 6991 (1988)
- 4 J. Tersoff Phys. Rev. B **38** 9902 (1988)
- 5 A. P. Thompson *et al* Comp Phys Comm, **271** 10817 (2022)