

SiO₂ 及び GeO₂ 結晶とアモルファスの機械的性質に関する第一原理解析

First-principles analysis on mechanical properties

of SiO₂ and GeO₂ crystal and amorphous岡山県立大院情報工¹, グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社²○細川貴弘¹, 末岡浩治¹, 荒木浩司², 泉妻宏治²Okayama Pref. Univ., Dept. of System Engineering¹, Global Wafers Japan Co. Ltd.²○T. Hosokawa¹, K. Sueoka¹, K. Araki², K. Izunome²

E-mail: ca24020a@c.oka-pu.ac.jp

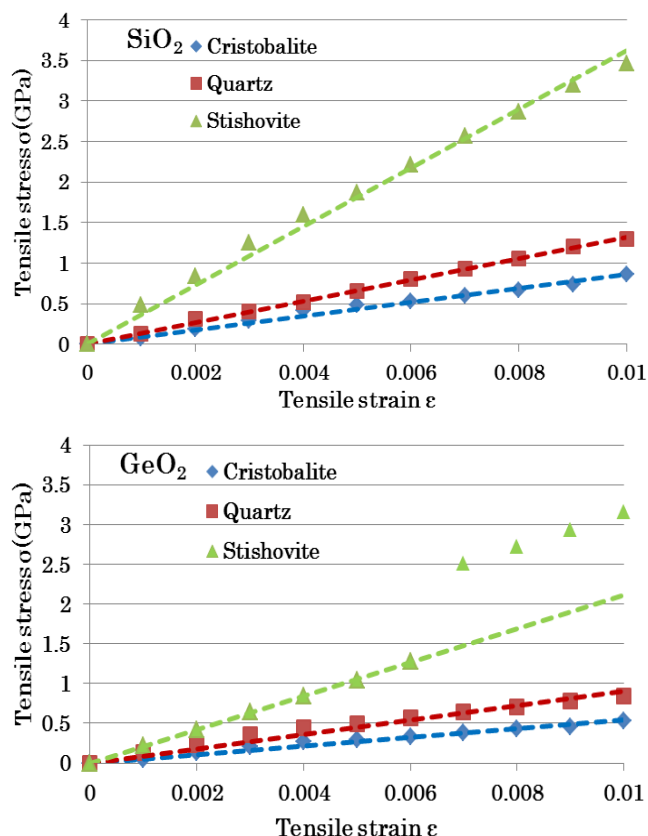
【諸言】LSI の基板として用いられる半導体 Si 単結晶や、酸化絶縁膜の SiO₂ に関する研究は広く行われてきた。最近では Si に代わる基板材料として Ge の優れた特性が注目され[1], Ge 薄膜 / Si 基板に関する研究も盛んになってきている。しかし、Ge の酸化膜である GeO₂ に関しては、その基礎物性も含め、不明な点が多い。そこで本研究では、GeO₂ 結晶とアモルファスの機械的性質を明らかにすることを目的として第一原理計算を行い、SiO₂ についての計算結果と比較した。

【計算方法】SiO₂ 及び GeO₂ 結晶モデルとして Cristobalite 型, Quartz 型, Stishovite 型を採用した。これらの計算モデルの[100]方向に 1 軸引っ張り歪みを与え、構造最適化を行った。さらに、[100]方向の応力も計算することで、[100]方向ヤング率を求めた。また、SiO₂ 及び GeO₂ のアモルファス構造を模擬した計算モデルも作成し、ヤング率を求めた。計算には、汎用第一原理計算ソフト CASTEP[2]を使用した。

【結果】図 1 に SiO₂ と GeO₂ の応力-歪み線図を示す。これより、SiO₂ の方が GeO₂ よりヤング率が高いことがわかる。また、各結晶構造において、Stishovite 型のヤング率が最大であることがわかる。表 1 に SiO₂ 結晶と GeO₂ 結晶のヤング率を整理する。なお、アモルファスに関する計算結果は当日発表する。

Table 1 Calculated [100] Young's modulus of SiO₂ and GeO₂

	SiO ₂ (GPa)	GeO ₂ (GPa)
Cristobalite	86.6	54.3
Quartz	132.4	90.7
Stishovite	361.8	211.6

Fig.1 Stress-strain diagram of SiO₂ and GeO₂ model

参考文献

- [1] J. Vanhellefont, P. Spiewak, K. Sueoka and I. Romandic, Phys. Status Solid C 6, 1906-1911,(2009).
- [2] The CASTEP code is available from Accelrys Software Inc.