

平成22年4月23日現在

研究種目：基盤研究(A)
 研究期間：2006～2009
 課題番号：18206015
 研究課題名（和文） 先端デバイスの強度信頼性評価に関する解析的・実験的研究
 研究課題名（英文） Analytical and Experimental Study on the Mechanical Strength Evaluation of Advanced Devices
 研究代表者
 宮崎 則幸 (MIYAZAKI NORIYUKI)
 京都大学・大学院工学研究科・教授
 研究者番号：10166150

研究成果の概要（和文）：先端デバイスの強度信頼性評価に使用することができる解析プログラムおよび実験手法を開発した。すなわち、解析プログラムとしては、異種材界面強度の破壊力学的評価プログラム、転位密度というマイクロ情報を含む構成式を用いた転位密度評価解析プログラム、および大規模分子動力学解析プログラムを開発した。また、実験的手法としては、撮像装置として光学顕微鏡および走査型レーザ顕微鏡を用いた微小領域ひずみ計測システムを開発した。これらの解析的、実験的手法を用いて、電子デバイスの強度信頼性評価を行った。

研究成果の概要（英文）：We developed several computer programs and an experimental technique for mechanical strength evaluation of advanced devices. The computer programs developed in the present research project are a program for fracture mechanics evaluation of interface between anisotropic bimaterial, a program for dislocation evaluation using a constitutive equation including microscopic information of materials such as dislocation density, and a molecular dynamics program for large scale problems. As an experimental technique, we developed systems for measuring strain distribution of small region with the use of images taken by an optical microscope or a scanning laser microscope. We performed mechanical strength studies for electronic devices using the analytical and experimental techniques developed in the present research project.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	19,800,000	5,940,000	25,740,000
2007年度	9,500,000	2,850,000	12,350,000
2008年度	3,300,000	990,000	4,290,000
2009年度	5,300,000	1,590,000	6,890,000
年度			
総計	37,900,000	11,370,000	49,270,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学 機械材料・材料力学

キーワード：先端デバイス、ひずみ計測、分子動力学、破壊力学、有限要素法

1. 研究開始当初の背景

産業あるいは日常生活に使用する機器の

全てに電子機器が使用されているといっても過言ではない。したがって、電子機器の

故障は、安全で生産性の高い産業活動、安全で快適な生活を営む上で極力避けなければならない。そのためには電子機器の信頼性を確保することが重要である。これまでの電子材料、電子デバイスに関する研究は専らその機能に注目したものであった。しかし、電子デバイスの信頼性確保のためには、固体力学および材料強度学といった新たな観点から研究を行う必要がある。また、近年は MEMS(=Micro Electro Mechanical System)といった可動部分を有する微小機械システムも電子デバイスの製法を用いて作成されている。MEMS は可動部分を有することから、その部分から破壊が生じる可能性がある。そのため、このような単結晶材料も含め、先端デバイスの強度信頼性の確保が重要な研究課題となっている。本研究はこのような背景のもとに企画された。

2. 研究の目的

(1) 強度信頼性評価には有限要素法のような連続体力学手法だけでなく、分子動力学法のような分子・原子スケールの強度評価も必要となる。本研究では、マクロスケールからミクロスケール以下の微小領域の強度信頼性評価に適用できる解析システムを構築する。

(2) 解析結果の信頼性を担保するために、先端デバイスのようなミクロンオーダーの内部構造におけるひずみ分布測定が可能な装置の開発を行う。

(3) 開発した解析システム、ひずみ測定装置を実際の電子デバイスの信頼性評価に適用してそれらの有効性を実証する。

3. 研究の方法

(1) 解析プログラムの開発

① 異種材界面強度の破壊力学的評価プログラム

プログラムの機能：2次元体中あるいは3次元体中の異方性材料同志の界面に、き裂あるいはノッチが存在する場合の応力拡大係数を求めることができる。機械的負荷だけでなく、電子デバイスで重要な熱負荷、MEMS で重要な圧電負荷の場合についても解析可能である。

解析理論：き裂、ノッチとも Stroh formalism に基づいた解析手法を用いた。き裂については、有限要素法解と異方性異種材き裂の漸近解を重ね合わせることでモード分離を行い、M 積分法を用いた。また、ノッチについては、応力拡大係数の算出に H 積分法を用いた。

② ミクロな情報を含む構成式を用いた転

位密度評価解析プログラム

プログラムの機能：単結晶材料育成過程、インゴットアニール過程および成膜過程における熱応力負荷に伴う転位密度の経時変化を求めることができる。また、転位の発生によって生じる残留応力起因の複屈折現象を解析できる。

解析理論：転位密度というミクロな情報を含んだ構成式を有限要素解析に用いることにより、有限要素法という連続体力学解析の枠内で転位密度というミクロな情報の経時変化を求めるようにした。なお、弾性係数、特定の滑り方向の存在といった結晶異方性を厳密に考慮した。また、複屈折現象の解析には光路差の計算が必要となるが、この計算には厳密解法としての Jones calculus と近似解法である平均応力法があるが、両者の関係を考察した結果、後者の方法を採用した。

③ 大規模分子動力学解析プログラムの整備

プログラムの機能：クラスター計算機システム（並列計算機環境）で解析可能な分子解析プログラムを開発する。

解析理論：経験ポテンシャルを用いた古典分子動力学法を用いる。

(2) 微小領域ひずみ測定装置の開発

撮像装置として、光学顕微鏡および走査型レーザ顕微鏡を用い、変形前の基準画像と変形後の画像を画素単位で相関をとることにより変位を求めるデジタル画像相関法ソフトウェア、変位を座標により偏微分してひずみ分布を求めるためのソフトウェア、試験片に機械的負荷を加える負荷装置および試験片を加熱する加熱装置からなる微小領域ひずみ計測装置を開発した。これらの計測システムを用いることにより、50 μm 程度の大きさの領域のひずみ分布を 100 μstrain 程度の精度で測定することが可能となった。

4. 研究成果

(1) 解析プログラムの開発

① 異種材界面強度の破壊力学的評価プログラム

圧電材料における電氣的-機械的連成作用は、工業製品に幅広く利用されている。これらは多くの異方性材料から構成されており、界面端部を有する構造のものが多い。界面端部では応力集中が起こり、破壊の起点となることが知られている。そのため、圧電効果を考慮した異種材界面端部の応力分布特性や破壊挙動を理解し、強度評価手法を確立することが望まれる。

本研究では、H 積分を圧電問題に拡張して、圧電効果を考慮した異方性異種材界面端部の特異応力場の解析手法を開発した。また、均質体中のき裂、異種材界面き裂にも適用可能な、より一般的な応力拡大係数の定義を提案する。この応力拡大係数では、接合端部近傍の応力、電気変位、変位および電気ポテンシャル場の漸近解を表現でき、この定義を用いてさまざまな異方性異種材界面端部の特異応力場を評価した。

図1に示す LiNbO₃ と LiTaO₃ の界面き裂を有する構造の接合材に、5MPaの引張り荷重、1MPaの面外せん断荷重、さらに 0.1C/m²の電気変位を加えた場合を解析した。特異性固有値、応力拡大係数の結果を表1に示す。応力拡大係数から得た界面上の応力および電気変位の漸近解と有限要素解析結果を比較したものを図2に示す。図2において応力、電気変位の漸近解は有限要素解析結果と一致しており、応力拡大係数は正しい値であるといえる。

界面端部の応力場、変位場、電気変位場、電気ポテンシャル場を解析する上で重要な H 積分を異方性材料の圧電問題に拡張し、異方性異種材界面端部の特異応力場解析手法を開発した。また、界面端部の特異性応力場の大きさを示す指標として、新しい応力拡大係数の定義を提案した。応力拡大係数より求めた漸近応力場・電気変位場は有限要素界の結果と一致しており、特異場を正しく表現できていることが間接的に証明された。

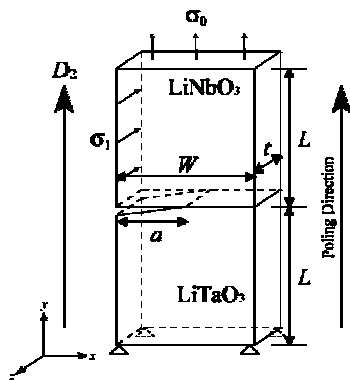


図1 LiNbO₃ と LiTaO₃ の界面き裂を有する構造の接合材

表1 特異性固有値および応力拡大係数

モード	I	II	III	IV
特異性固有値	0.500	0.500	0.500	0.500
		-0.013i	+0.013i	
応力拡大係数	35.24	0.092	-29.31	0.263

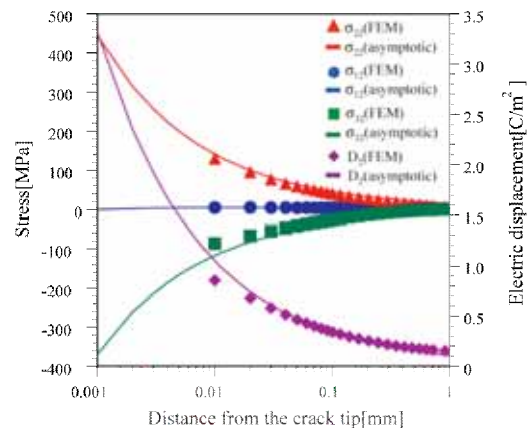


図2 異種材界面に沿った応力分布

②ミクロな情報を含む構成式を用いた転位密度評価解析プログラム

成膜プロセスの転位密度評価: クリープひずみ速度が転位密度の関数として与えられるクリープ構成式 Haasen-Alexander-Sumino モデル (以降 HAS モデルと呼称する) を用いて、Si 単結晶へ GaAs をヘテロエピタキシャル成長させるプロセスの転位密度評価解析を行った。図3に解析体系、図4に GaAs 膜内のプロセス終了後の応力分布及び転位密度分布をそれぞれ示す。ここで応力は12個あるすべり系の分解せん断応力の和を示す。この解析コードは、Si 単結晶へ GaAs をヘテロエピタキシャル成長させるプロセスの最適化のためのツールとして用いることが可能である。

残留応力による複屈折現象の解析: 本研究では、高温域においてひずみ速度をパラメータとした CaF₂ 単結晶の圧縮試験を実施し、同単結晶のクリープ構成式を決定した。さらに、このクリープ構成式を用いた非線形有限要素解析により、<100>方向育成および<111>方向育成の CaF₂ 単結晶のアニール後の残留応力を求めた。その後、得られた残留応力から平均応力法により光路差の値とその分布を算出し、実験結果との比較を行った。光路差の計算には平均応力法を用いた。

解析対象は直径 200mm、厚さ 40mm の円板状の CaF₂ 単結晶インゴットである。<100>方向育成および<111>方向育成の単結晶について解析を行った。図5(a)、(b)に<100>方向育成および<111>方向育成単結晶の単位厚さ当たりの光路差分布をそれぞれ示す。<100>方向育成単結晶、<111>方向育成単結晶のいずれの光路差分布でも、結晶異方性に起因した対称性が見られ、それぞれ4回対称および6回対称となっている。図6(a)、(b)に

実験から得られた典型的な光路差分布を示す。図 5 (a)と図 6 (a)を見比べると、 $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶においては、解析により光路差の分布形状およびその大きさを正しく評価できていることが確認できる。一方、図 5 (b)と図 6 (b)より $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶では、解析と実験から得られた光路差の値は概ね一致しているものの、解析結果で見られた 6 回対称の分布が実験結果では見られない。これは $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶の光路差が非常に小さく、複屈折計測装置で分布を正確に確認できないことが原因となっている。6 回対称の解析結果は立方晶系である CaF_2 単結晶の結晶対称性から考えて妥当である。よって解析により正しく複屈折を評価できていると判断する。

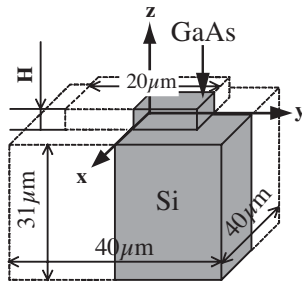


図 3 Si 単結晶へ GaAs をヘテロエピタキシャル成長の解析対象

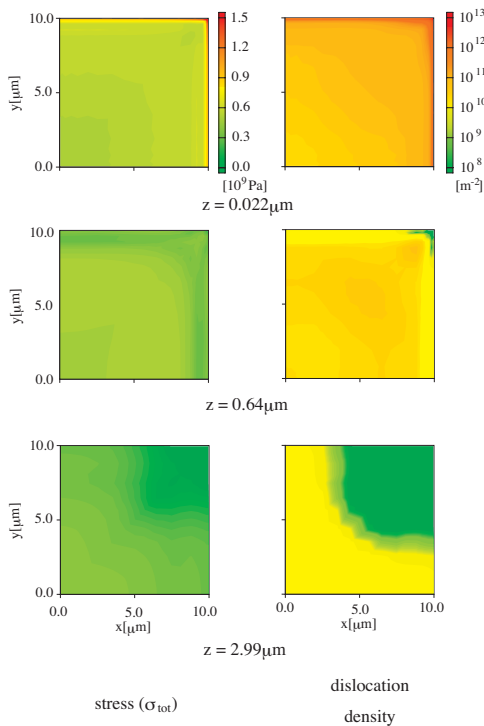
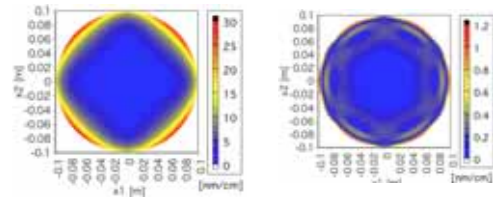
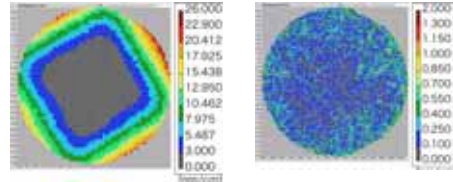


図 4 プロセス終了後の応力分布及び転位密度分布



(a) $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶 (b) $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶

図 5 光路差分布の解析結果



(a) $\langle 100 \rangle$ 方向育成単結晶 (b) $\langle 111 \rangle$ 方向育成単結晶

図 6 光路差分布の解析結果

③ 大規模分子動力学解析プログラム

金属中へ水素が侵入することによって、破断伸びが減少したり、疲労き裂の成長速度が加速したりする、いわゆる水素脆化現象が広く知られている。水素脆化現象は微量な水素原子により引き起こされる。水素脆化と関連して、き裂進展に及ぼす水素の影響の関する分子動力学解析を行った。

分子動力学シミュレーションにおいては、原子間ポテンシャルの選択が重要であり、その特性を理解して使用する必要がある。現在、bcc 鉄-水素系を取り扱うことのできる原子間ポテンシャルは三つ、すなわち、Morse ポテンシャル、Wen らの開発した EAM ポテンシャル、Ruda らの開発した EAM ポテンシャルが提案されている。基本的な物性値評価の結果、これらのうち Wen らの開発した EAM ポテンシャル（以降、EAM-W と略称する）が現時点で最も優れた鉄-水素系の原子間ポテンシャルであると考え、本研究では EAM-W を採用することにした。

図 7 に、分子動力学解析の結果得られた α 鉄のき裂進展の状況を、水素を含む場合と含まない場合についてそれぞれ示す。ここで、(a)と(b)は水素を含む場合であり、(c)は水素を含まない場合である。なお、(a)と(b)では(b)の方が、水素が高濃度に含まれている。図 7 より、水素を含む場合は $\{112\}$ すべり面でき裂が進展する様子が高い頻度で確認された。き裂端部から射出される転位の転位芯近傍を詳細に見ると、転位芯付近に水素がトラップされているのがわかった。また、き裂端部の様相を詳細に観察することにより、転位が生成する $\{112\}$ すべり面上に水素が集まり、そこからき裂が進展していくことがわかった。これらの結果から、

き裂先端近傍の転位芯付近にトラップされた水素がすべり面での割れを助長しているといえる。

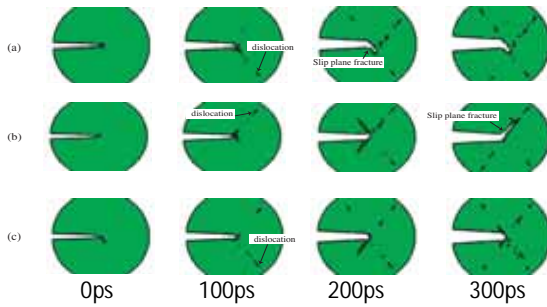


図7 き裂進展に及ぼす水素の影響
(a)(b) : 水素を含む、(c) : 水素を含まない

(2) 微小領域ひずみ測定装置の開発

撮像装置として走査型レーザ顕微鏡を用いたデジタル画像相関法による微小領域ひずみ計測装置(図8)を用いて Flip Chip 電子パッケージの微小はんだバンプの測定を行い、この測定結果をもとに、非線形有限要素解析の問題点を抽出して解析モデルの改良を行った。

計測に用いた Flip Chip パッケージは Si chip、Buildup 材、Underfill 材、はんだバンプ、ガラスエポキシ樹脂コア層から構成されている。計測の際は、50mm 角のパッケージから、中央部分を 6mm×25mm に切り出し、加熱炉内に設置した。温度を 25℃～125℃まで 25℃ずつ 昇温約 2 分、保持約 5 分で加熱し、各保持後に共焦点レーザ顕微鏡を用いて断面画像を取得した。取得画像にデジタル画像相関法を適用し、得られた離散点変位から移動最小自乗法によりひずみ分布を算出した。25℃ずつのひずみ増分を足し合わせることで、25℃～125℃までのひずみ分布を計測した。

図9に、実験によって得られたはんだバンプ周辺のせん断ひずみと垂直ひずみの分布図を示す。

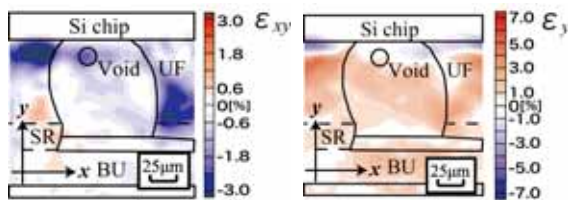


図9 デジタル画像相関法により計測された
はんだバンプ周辺ひずみ分布

本実験体系について、はんだの弾塑性クリープ、Underfill 材は粘弾性を考慮し、他の材料は等方弾性体と仮定した非線形有限要素解析を行い、実験によるひずみ測定結果と比較した。その結果、解析結果と実験結果に相違が認められたが、そのような相違は有限要素解析において Underfill 材のポアソン比として瞬間ポアソン比を用い、その粘弾性緩和特性を考慮しなかったことに起因することがわかった。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計34件)

- ① R. Matsumoto, S. Taketomi, S. Matsumoto, N. Miyazaki, Atomistic Simulations of Hydrogen Embrittlement, International Journal of Mechanical Sciences, 査読有, Vol.52, No.2, 2010, pp.334-338.
- ② Y. Kitamura, N. Miyazaki, T. Mabuchi, T. Nawata, Birefringence Simulation of Annealed Ingot of Magnesium Fluoride Single Crystal, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol.311, No.15, 2009, pp.3954-3962.
- ③ R. Matsumoto, T. Inoue, S. Taketomi, N. Miyazaki, Influence of Shear Strain on the Hydrogen Trapped in bcc-Fe: A First-Principles-Based Study, Scripta Materialia, 査読有, Vol.60, No.7, 2009, pp. 555-558.
- ④ Y. Nomura, T. Ikeda, N. Miyazaki, Stress Intensity Factor Analysis at an Interfacial Corner between Anisotropic Bimaterials under Thermal Stress, Engineering Fracture Mechanics, 査読有, Vol.76, No.2, 2009, pp.221-233.
- ⑤ N. Shishido, T. Ikeda, N. Miyazaki, Strain Measurement in a Microstructure Using Digital Image Correlation for a Laser-Scanning Microscopic Image, CMES-Computer Modeling in Engineering & Sciences, 査読有, Vol.35, No.1, 2008, pp.1-19.
- ⑥ R. Matsumoto, N. Miyazaki, Critical Length of Shear Band in Metallic Glass, Scripta Materialia, 査読有, Vol.59, No.1, 2008, pp.107-110.
- ⑦ M. Koganemaru, T. Ikeda, N. Miyazaki, Residual Stress Evaluation in Resin-Molded IC Chips Using Finite Element Analysis and Piezoresistive Gauges, Microelectronic Reliability, 査読有, Vol.48, No.6, 2008, pp.923-932.
- ⑧ H. Ogino, N. Miyazaki, T. Mabuchi, T. Nawata, Birefringence Simulation of Annealed Ingot of Calcium Fluoride Single

Crystal, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol.30, No.1, 2008, pp.221-228.

- ⑨ M. Nagai, T. Ikeda, N. Miyazaki, Stress Intensity Factor Analysis of a Three-dimensional Interface Crack between Dissimilar Anisotropic Materials, Engineering Fracture Mechanics, 査読有, Vol. 74, No.16, 2007, pp. 2481-2497.
- ⑩ N. Miyazaki, Dislocation Density Evaluation Using Dislocation Kinetics Model, Journal of Crystal Growth, 査読有, Vol.303, No.1, 2007, pp.302-309.

〔学会発表〕 (計 144 件)

- ① K. Yoshida, T. Ikeda, N. Miyazaki, H. Tomokage, Device Simulations of Mechanical Stress Effects on Electrical Characteristics of nMOSFETs: Impact of Local Stress in nMOSFETs, ASME/Pacific Rim Technical Conference and Exhibition on Packaging and Integration of Electronic and Photonic Systems, MEMS, and NEMS (InterPACK'09), 20 July 2009 (San Francisco, USA).
- ② R. Matsumoto, S. Taketomi, N. Miyazaki, Atomistic Study of Hydrogen Distributions around Lattice Defects and Defect Energies under Hydrogen Environment, 12th International Conference on Fracture (ICF12), 16 July 2009 (Ottawa, Canada).
- ③ T. Kanno, T. Ikeda, N. Miyazaki, H. Tanaka, T. Hatano, Reliability Evaluation of Flip Chip Packages Using the Digital Image Correlation Method and the FEM Analyses, International Conference on Electronics Packaging 2009 (ICEP2009), 15 April 2009 (Kyoto, Japan).
- ④ N. Miyazaki, H. Ogino, Y. Kitamura, T. Mabuchi, T. Nawata, Birefringence Simulations of Annealed Ingot of Calcium Fluoride Single Crystal (Consideration of Creep Behavior of Ingot during Annealing Process), SPIE Advanced Lithography 2009, 26 February 2009 (San Jose, USA).
- ⑤ R. Matsumoto, S. Taketomi, Y. Inoue, N. Miyazaki, Estimation of Hydrogen Distribution Around Dislocations Based on First Principle Calculations, 2008 International Hydrogen Conference – Effects of Hydrogen on Materials –, 10 September 2008 (Wyoming USA).
- ⑥ T. Ikeda, Y. Nomura, N. Miyazaki, Stress Intensity Factors Analyses of a Three-Dimensional Interface Corner between Dissimilar Anisotropic Materials under Thermal Stress, 8th World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) in Conjunction with 5th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences

and Engineering (ECCOMAS 2008), 2 July 2008 (Venice, Italy).

- ⑦ N. Miyazaki, R. Matsumoto, S. Taketomi, Application of Computational Mechanics to Hydrogen Embrittlement (Plenary Lecture), International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), 20 March 2008 (Honolulu, USA).
- ⑧ N. Shishido, T. Ikeda, N. Miyazaki, Full Field Displacement Measurement Using Digital Image Correlation method for Laser Scanning Confocal Microscopic Image, International Conference on Computational and Experimental Engineering and Science (ICCES'08), 20 March 2008 (Honolulu, USA).
- ⑨ N. MIYAZAKI, Dislocation Density Evaluation Using Dislocation Kinetics Model, 5th International Workshop on Modeling in Crystal Growth (Invited Lecture), 13 September 2006 (Bamberg, Germany).

〔図書〕 (計 1 件)

- ① 矢川元基, 宮崎則幸 (編集), 計算力学ハンドブック, 朝倉書店, 2007年4月.

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 1 件)

名称: 撮影画像におけるゆがみの構成方法

発明者: 宍戸信之、池田 徹、宮崎則幸

権利者: 宍戸信之、池田 徹、宮崎則幸

種類: 特許

番号: 特開 2007-299219

出願年月日: 2006年4月28日

国内外の別: 国内

〔その他〕

ホームページ等

<http://solid.me.kyoto-u.ac.jp/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

宮崎 則幸 (MIYAZAKI NORIYUKI)

京都大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号: 10166150

(2) 研究分担者

池田 徹 (IKEDA TORU)

京都大学・大学院工学研究科・准教授

研究者番号: 40243894

松本龍介 (MATSUMOTO RYOSUKE)

京都大学・大学院工学研究科・助教

研究者番号: 80363414