

АВ ИНИТИО МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СУЛЬФИДОВ: ИДЕАЛЬНАЯ ПРОЧНОСТЬ, МЕХАНИЗМЫ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ

Вяткин Г.П., Морозов С.И.

*Южно-Уральский государственный университет, 454080, Челябинск, проспект Ленина 76,
e-mail: morozov72@gmail.com*

Полупроводниковая промышленность является в настоящее время одной из важных и наиболее динамично развивающихся индустриальных областей в мире¹. Для своего развития ей необходимы новые высокопроизводительные полупроводниковые материалы. Однако, типичная для полупроводников хрупкость легко приводит к появлению трещин, приводя к механическому разрушению полупроводниковых устройств².

Для понимания механизма деформации сульфида меди и ее сравнения с изученной ранее деформацией сульфида серебра³ была использована теория функционала электронной плотности, с помощью которой изучены реакции исследуемых структур при деформациях чистого и двухосного сдвига, одноосного растяжения.

Для получения кривых напряжения – деформация к релаксированной суперячейке последовательно шаг за шагом применялась малая деформация сдвига (1%). Полученные кривые были использованы для расчета идеальной прочности сдвига, определения механизмов деформации и разрушения монокристаллов сульфида меди. Для моделирования метода измерения твердости по Виккерсу была изучена двухосная деформация сдвига.

Полученные в результате исследования данные позволяют по новому взглянуть на механизм деформации полупроводниковых материалов, который можно использовать для разработки гибких полупроводниковых устройств.

Литература

1. Sreejith P. S., Udupa G., Noor Y. B. M., Ngoi B. K. A. Int. J. Adv. Manuf. Technol., 2001, 17, 157.
2. Barako M. T., Park W., Marconnet A. M., Asheghi M., Goodson J. Electron. Mater., 2013, 42, 372.
3. Li, G. Q. An, Morozov S. I., Duan B., Goddard III W. A., Zhang Q., Zhai P., Snyder G. J. npj Comp. Mater., 2018, 4, 44.

Работа выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление №211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.A03.21.0011.