

分子シミュレーションの 材料開発への適用

解析支援ネット第3回セミナー
平成19年8月27日

岡山県立大学 情報工学部 情報システム工学科
末岡浩治

分子シミュレーションとは？

古典力学や量子力学などを基に計算機を用いて物質科学全般の現象を探るための方法論

分子動力学法, モンテカルロ法, 第一原理計算法など

第一原理計算法

「多数の原子からなる系を,その構成要素である電子と原子核の多体系として “非経験的に” 扱う計算手法」

特に,密度汎関数法に基づく第一原理計算法は,周期構造を有する固体結晶などに適用可能であり,材料物性の解析や予測に威力を発揮している.

密度汎関数法による第一原理計算のポイント

1. 多電子系の全電子密度 $\rho(r)$ を用いて, 系の全エネルギー $E[\rho(r)]$ を変分して最小値を見つけることにより, シュレーディンガー方程式を解く. 原子を動かしながら全エネルギーを計算することにより, 全エネルギーが最低となる原子構造(最安定構造)を決定できる.
2. 計算対象とする超格子(Si 64個の系など)構造を作り, 3次元周期境界条件のもとで解く.
3. 計算では, 価電子のみを扱う.

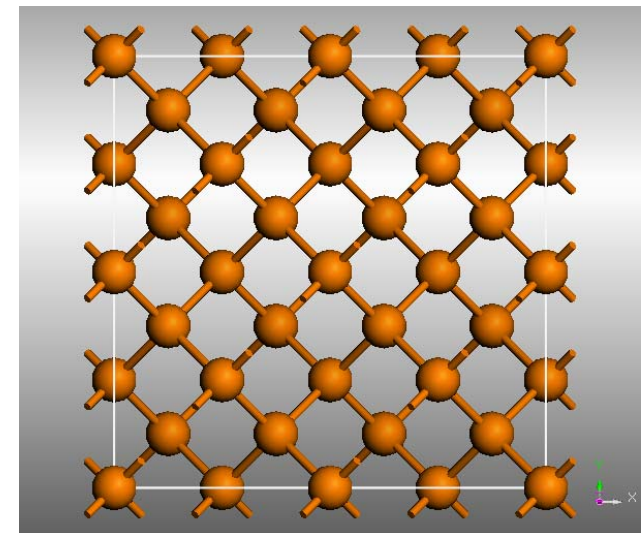


表 結晶構造と格子定数に関する計算と実験の比較.
bccは体心立方, fccは面心立方, diamondはダイヤモンド構造を示す.

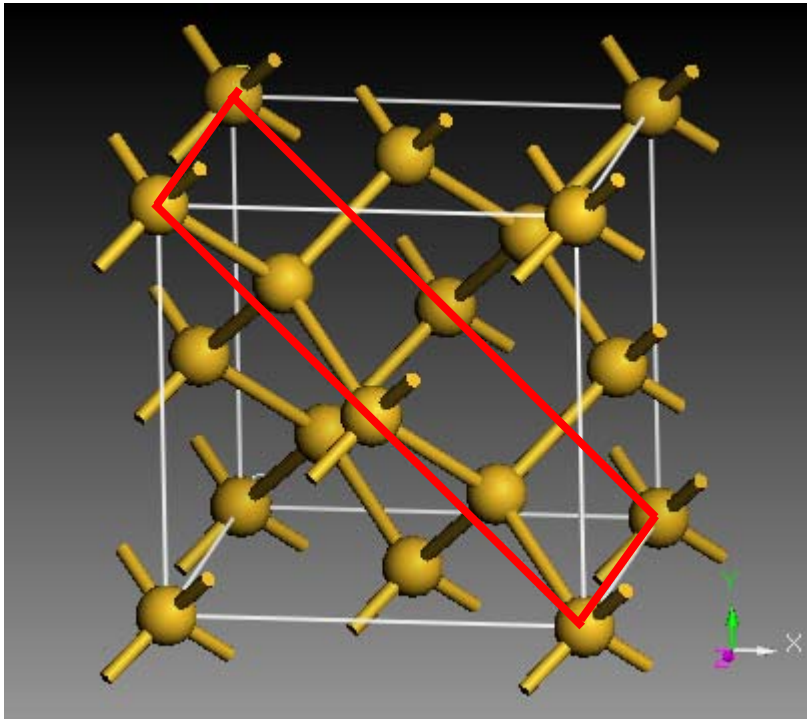
材料	結晶構造	格子定数 (nm)
Fe	bcc (This work) bcc (Exp.)	0.2843 (This work) 0.287 (Exp.)
Ni	fcc (This work) fcc (Exp.)	0.3562 (This work) 0.352 (Exp.)
Cu	fcc (This work) fcc (Exp.)	0.3631 (This work) 0.361 (Exp.)
Si	diamond (This work) diamond (Exp.)	0.5381 (This work) 0.543 (Exp.)

表 Si単結晶のヤング率の計算値と実験値の比較.

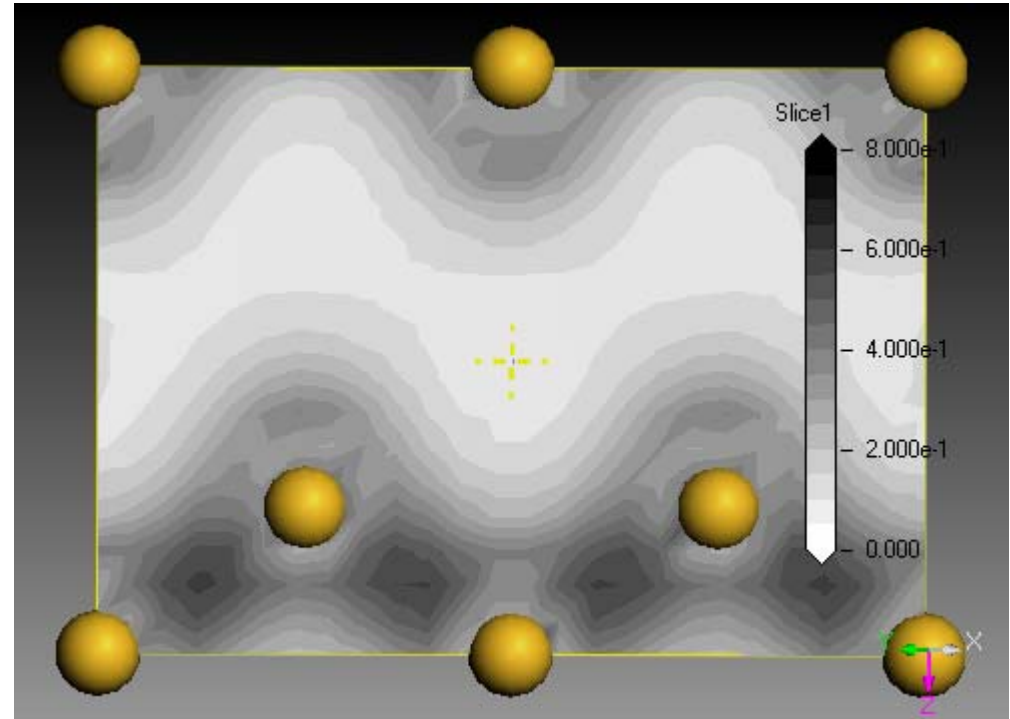
Direction	Calculation	Experiment
[100]	137.9 GPa (This work)	130 GPa
[110]	165.4 GPa (This work)	169 GPa
[111]	169.4 GPa (This work)	190 GPa

Si結晶の電子状態計算

Siの単位胞



Si(110)面内の価電子分布



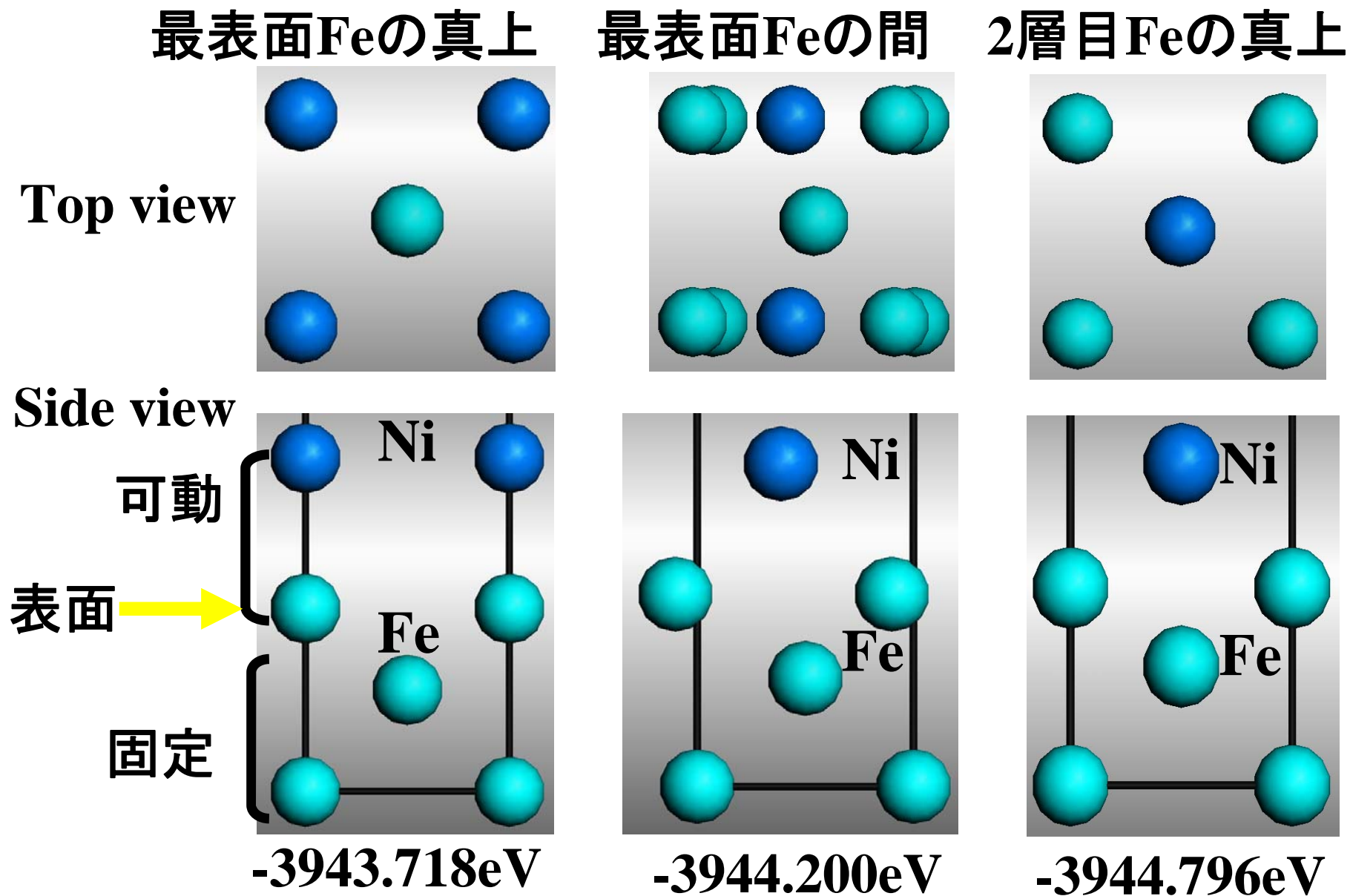
共有結合

Siの価電子数4

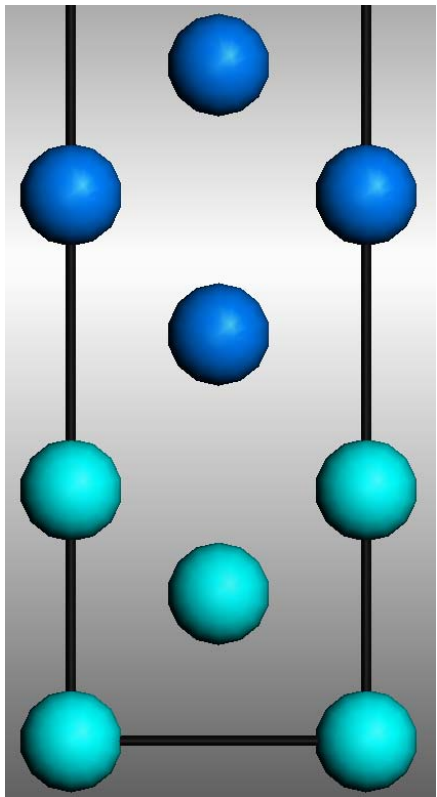
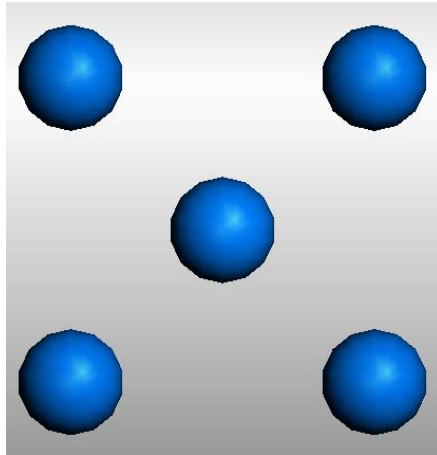
研究内容の紹介

1. めっきにおける金属界面の形成機構と
界面密着性の予測
(平成18, 19年度特別電源委託研究)
2. シリコンナノ薄膜の強度

Fe(100)表面におけるNi 1原子の安定位置



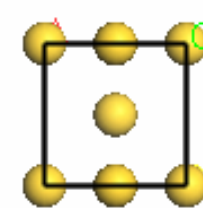
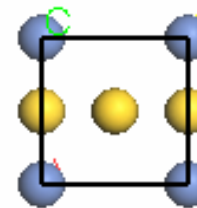
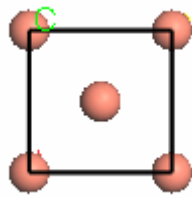
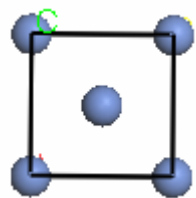
Fe(100)表面におけるNi原子の積層



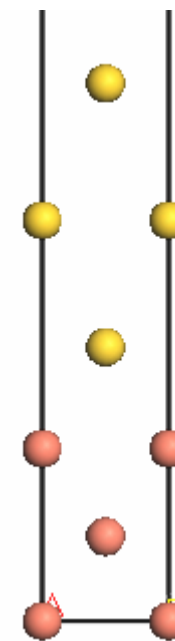
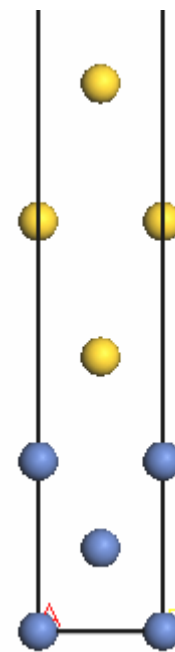
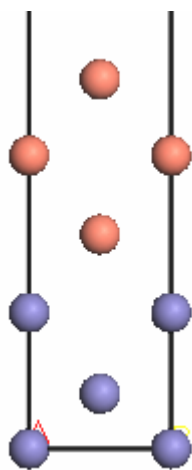
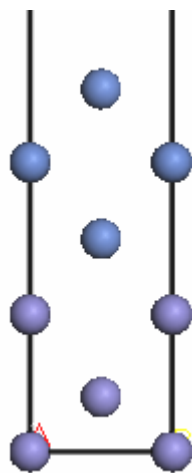
Fe(100)表面において, Ni原子はFeと同じbcc構造に対応した配置を取りながら積層する.

Fe, Ni, Cu表面に積層するNi, Cu, Au原子の 最安定配置

**Top
view**



**Side
view**



Ni/Fe(100)

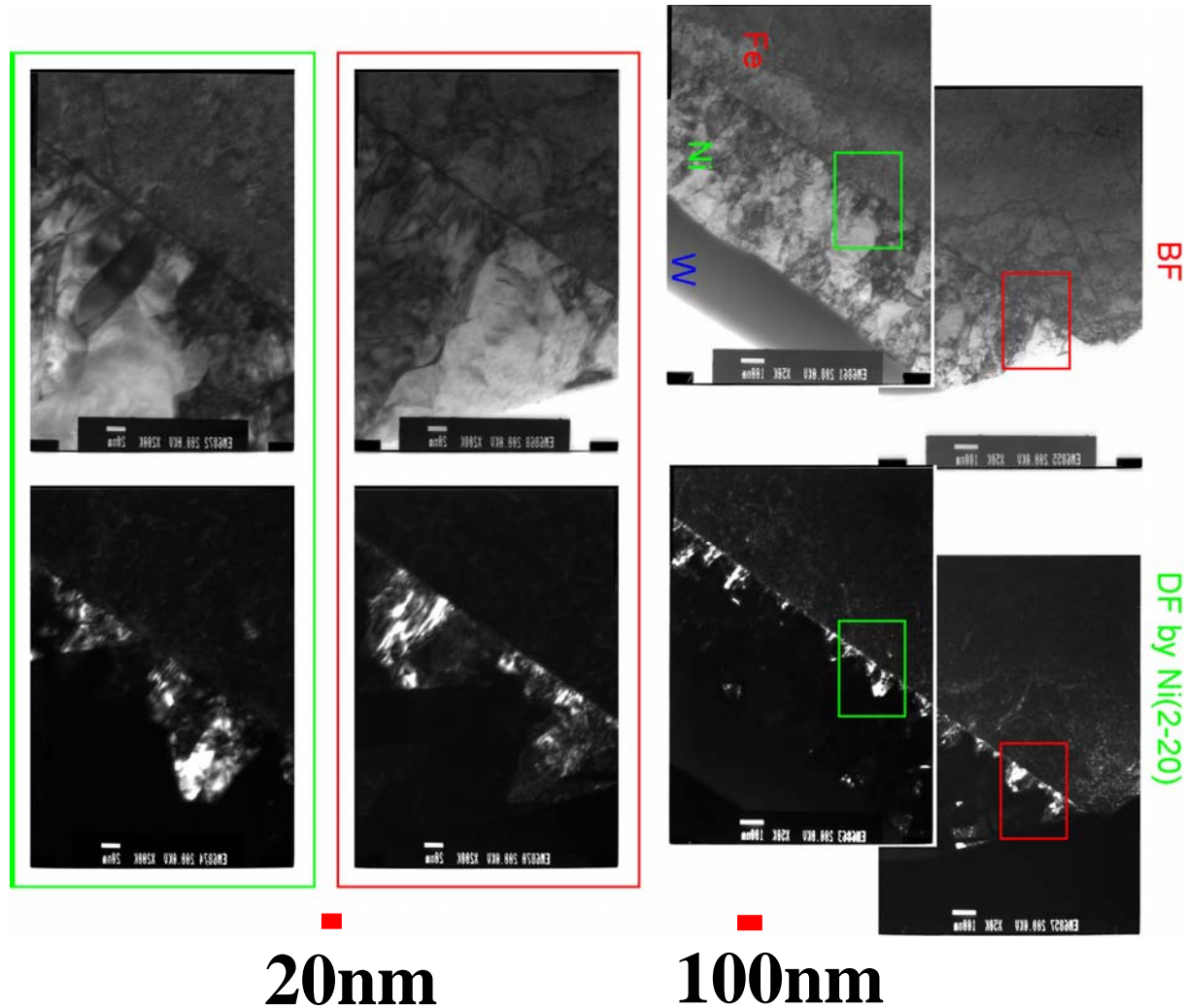
Cu/Fe(100)

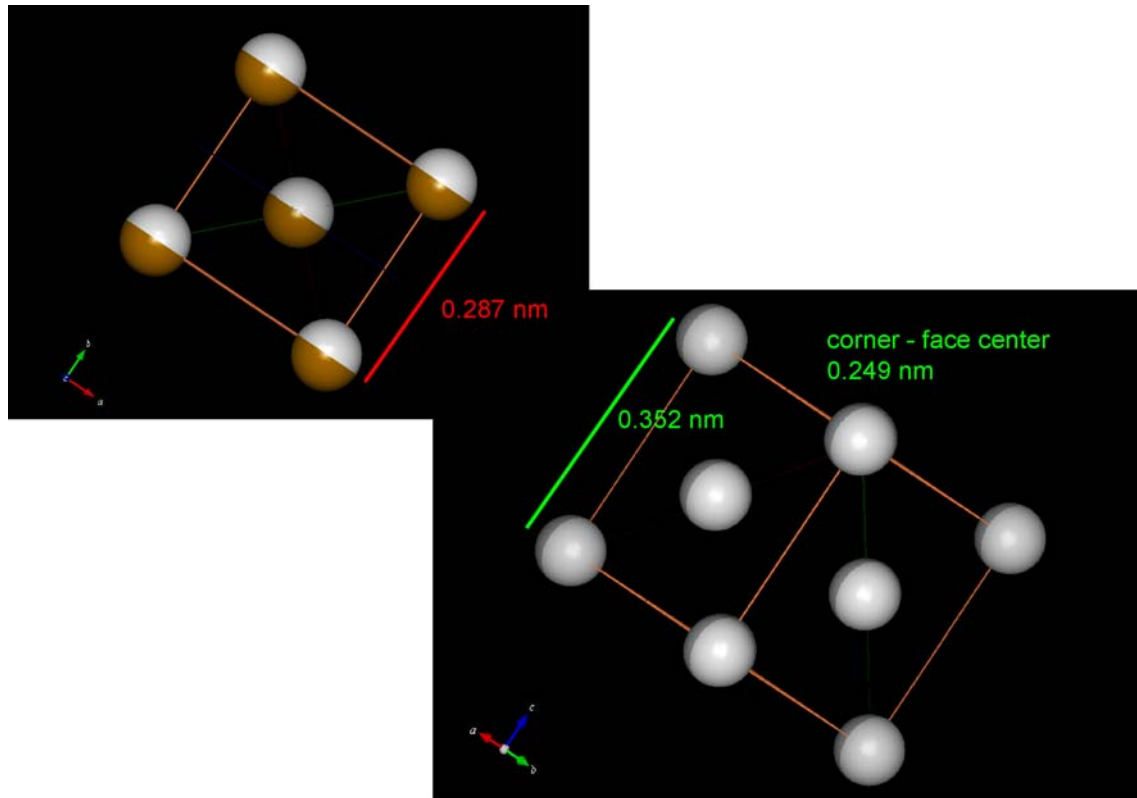
Au/Ni(100)

Au/Cu(100)

第一原理計算結果とめっき実験との比較

Fe(001)基板上のNiめっき膜界面のTEM観察





界面の方位関係の 解析結果

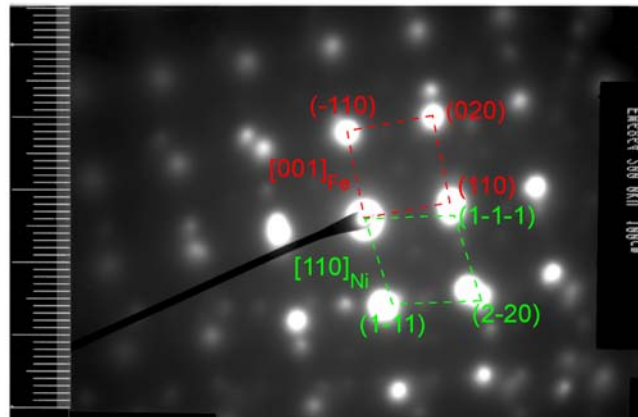
$\text{Fe}(100) // \text{Ni}(110)$

$\text{Fe}[010] // \text{Ni}[-110]$

$\text{Fe}[001] // \text{Ni}[001]$

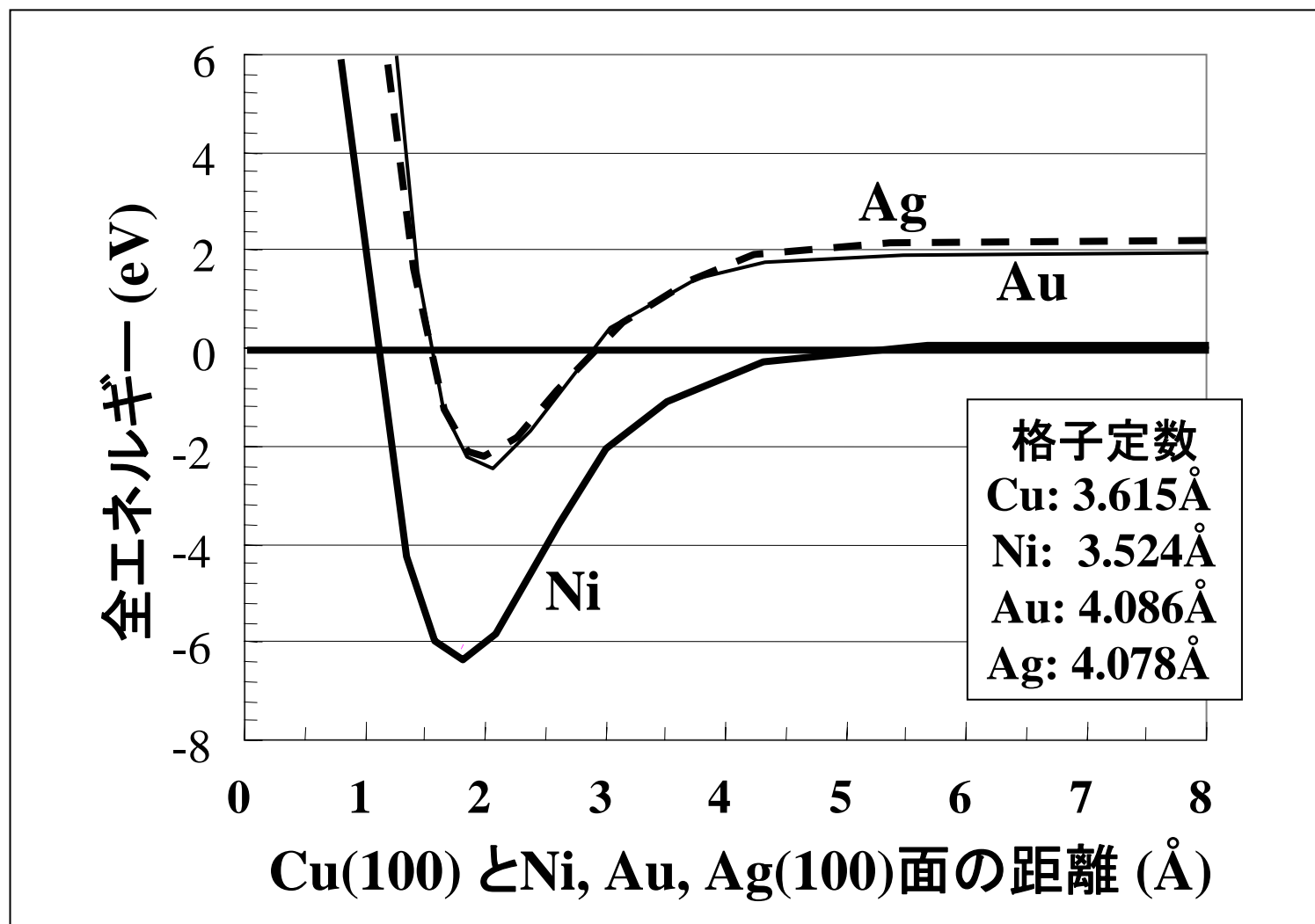
第一原理計算と対応

TEMでは、Ni原子の
位置を決定するのは
難しい。



界面を含む制限視野の電子線回折

Ni, Ag, Au/Cu(100)の全エネルギー計算

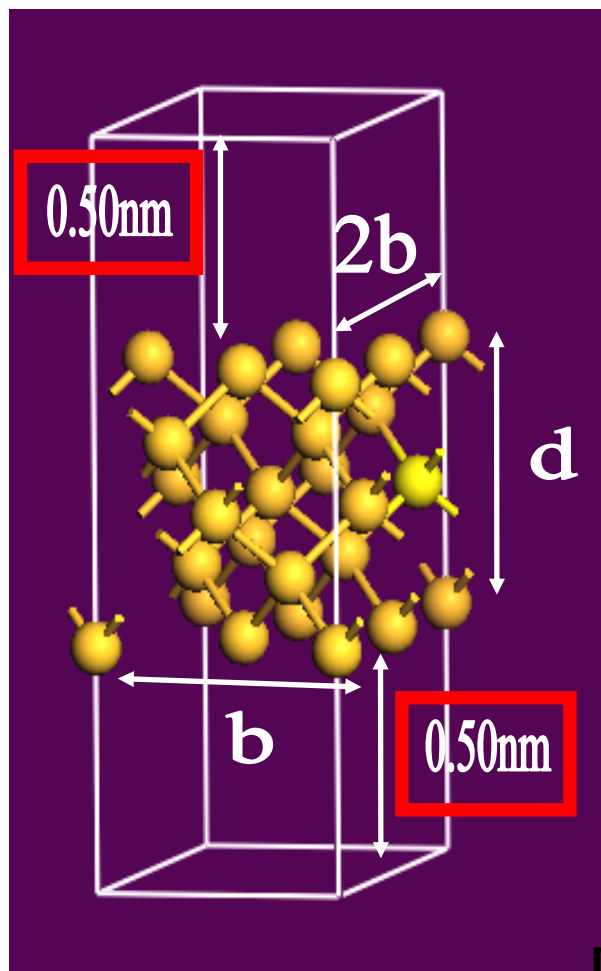


NiとCuが最も密着性が高い。

格子定数差が大きい組み合わせほど、整合歪が大きい。

2. シリコンナノ薄膜の強度

Siナノ薄膜の引張り変形解析



真空スラブを原子層の上下に
0.50nmずつ設ける

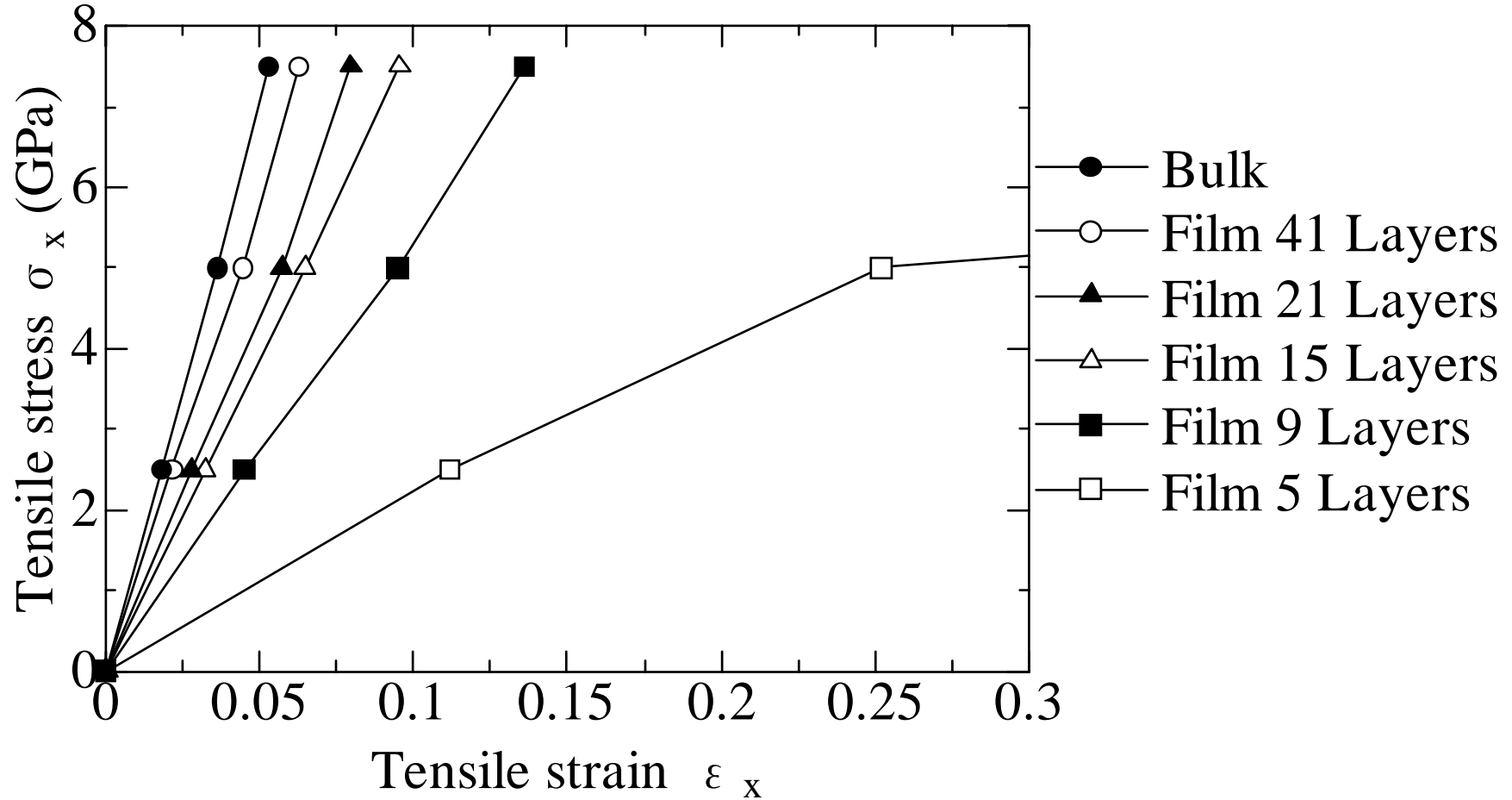
3次元周期境界条件



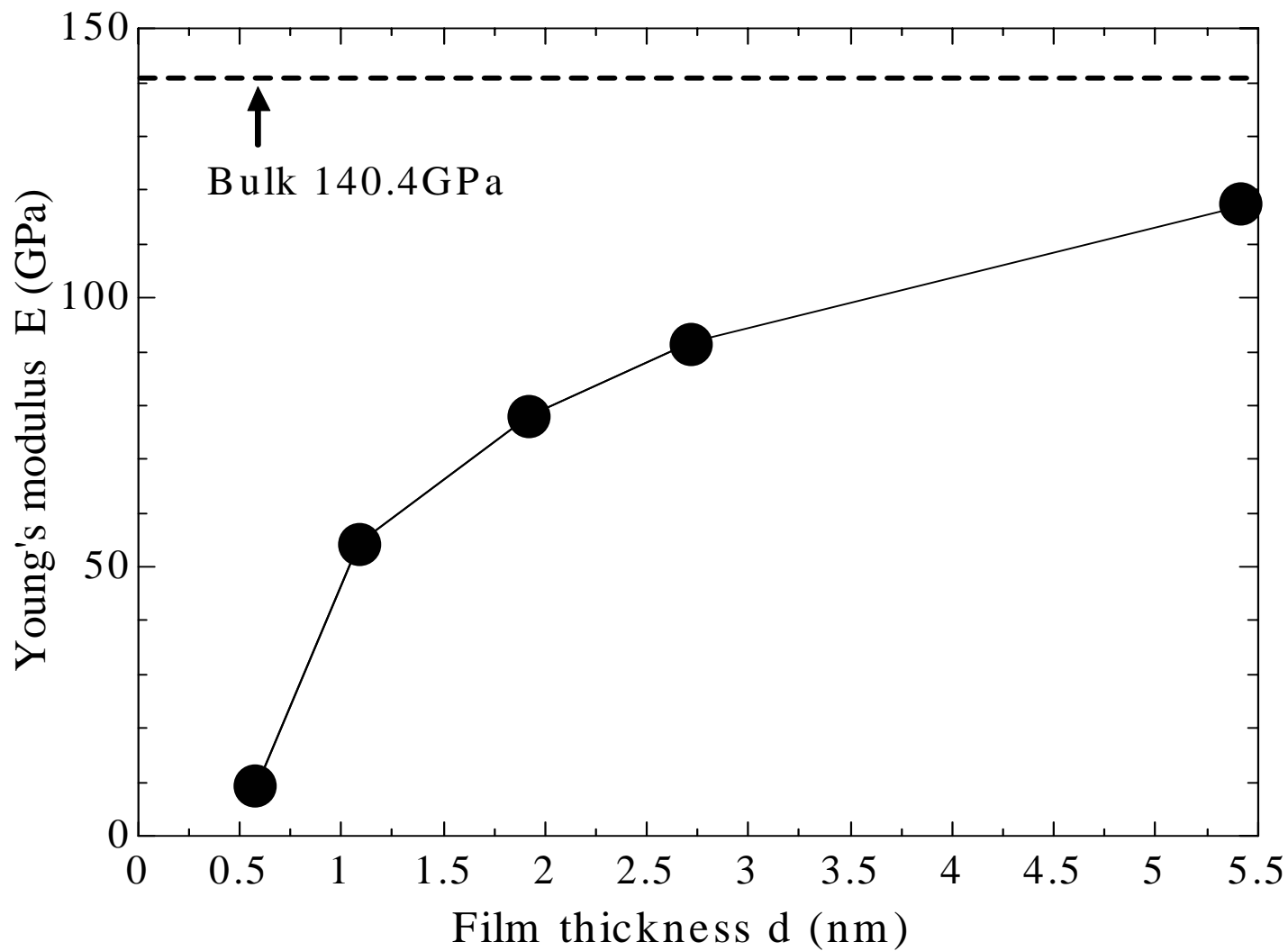
厚さdの無限に広がる薄膜
Y方向には1.0nmごとに
イメージセルが繰り返す

Siナノ薄膜引張り変形シミュレーションセル (原子層5層)

計算結果



Siナノ薄膜[100]引張り変形シミュレーション
により得られた応力-歪み線図



Siナノ薄膜におけるヤング率と膜厚の関係

さらに、以下の研究も行っています。

1. 金属や半導体のナノ薄膜やナノ細線の強度
2. 歪み半導体の材料物性
3. シリコン単結晶中の金属不純物の挙動

共有結合性とイオン結合性を併せ持つ

