

研究室紹介(計算材料科学研究室)

茨城大学大学院理工学研究科工学野
物質科学工学科

教授 篠嶋 妥(ささじま やすし)
講師 永野 隆敏

1. はじめに

2. 計算機実験の手法

2-1 分子動力学法

2-2 モンテカルロ法

2-3 偏微分方程式の数値解法

- ・フェーズフィールド法

- ・有限要素法(FEM)

2-4 第一原理計算

3. 計算機実験の応用例

3-1 分子動力学法

- ・材料照射実験

3-2 フェーズフィールド法

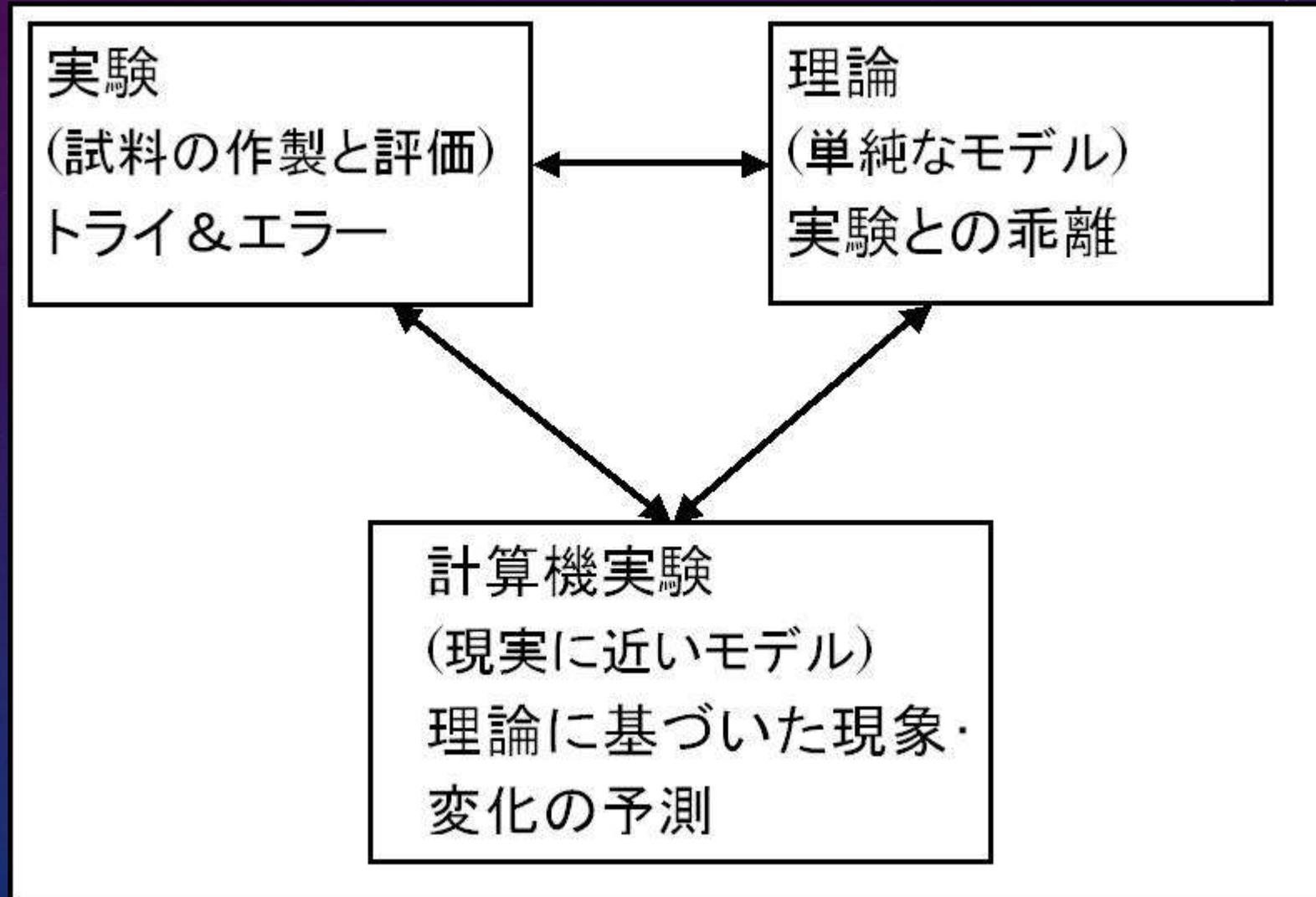
- ・結晶成長過程

3-3 有限要素法(FEM)

3-4 第一原理計算

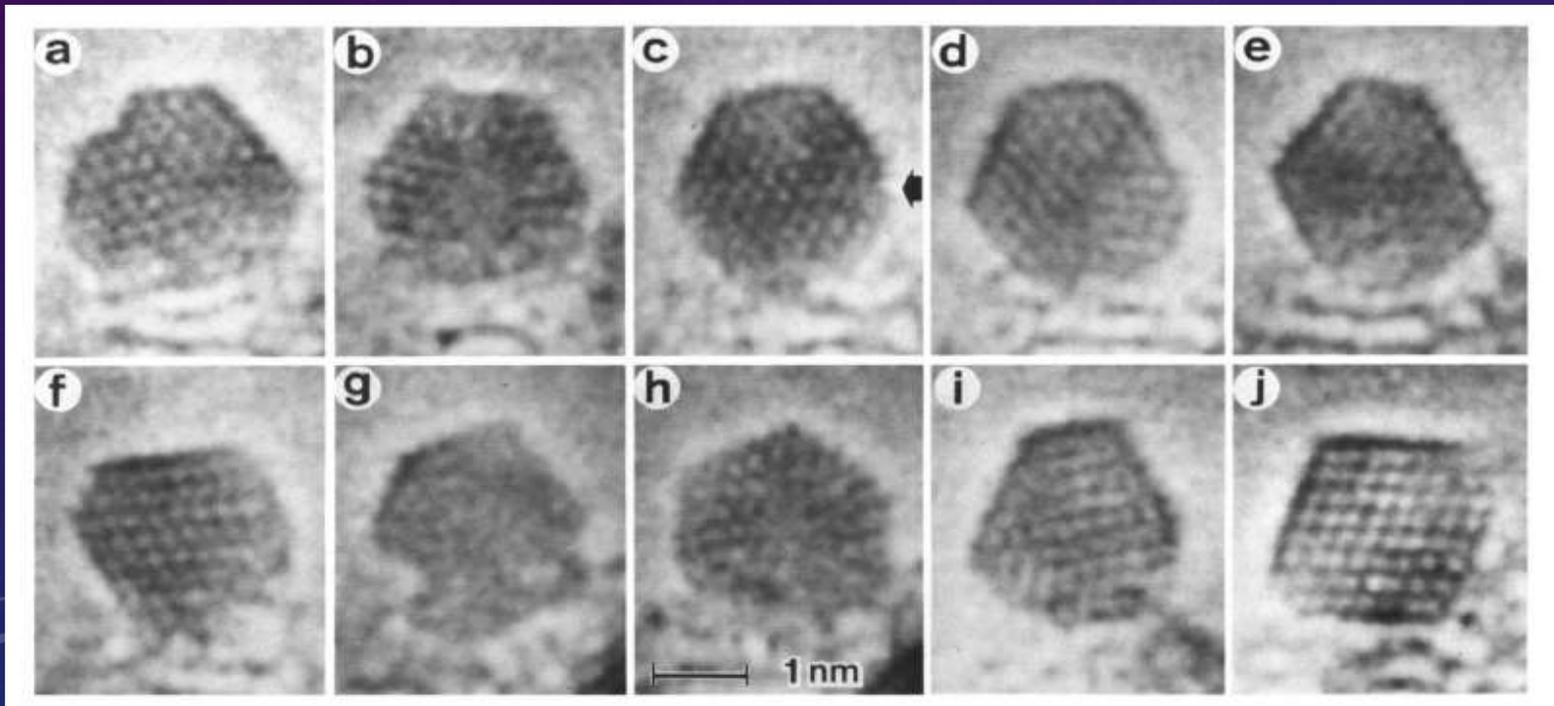
1. はじめに

材料開発のアプローチに新しいツールが加わる



- ・材料は原子でできている(原子の集合体)
- ・材料中の原子の並び方が、材料の性質を決めている
- ・普通でない原子構造を持つ人造物質が、
これまでになかった機能を持つ材料となる

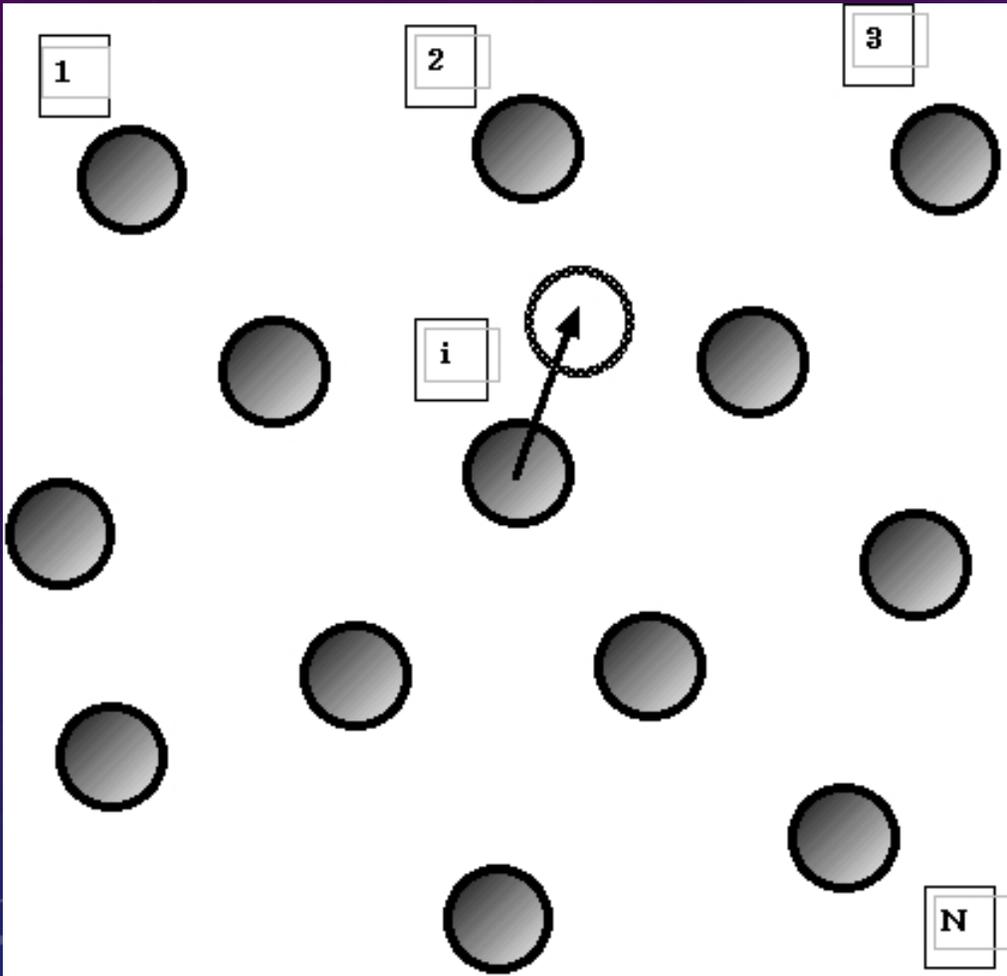
(例) 超微粒子、アモルファス、フラーレン、カーボンナノチューブ



直径 2 nm の金の超微粒子
・・・構造が連続的に変化

2-1

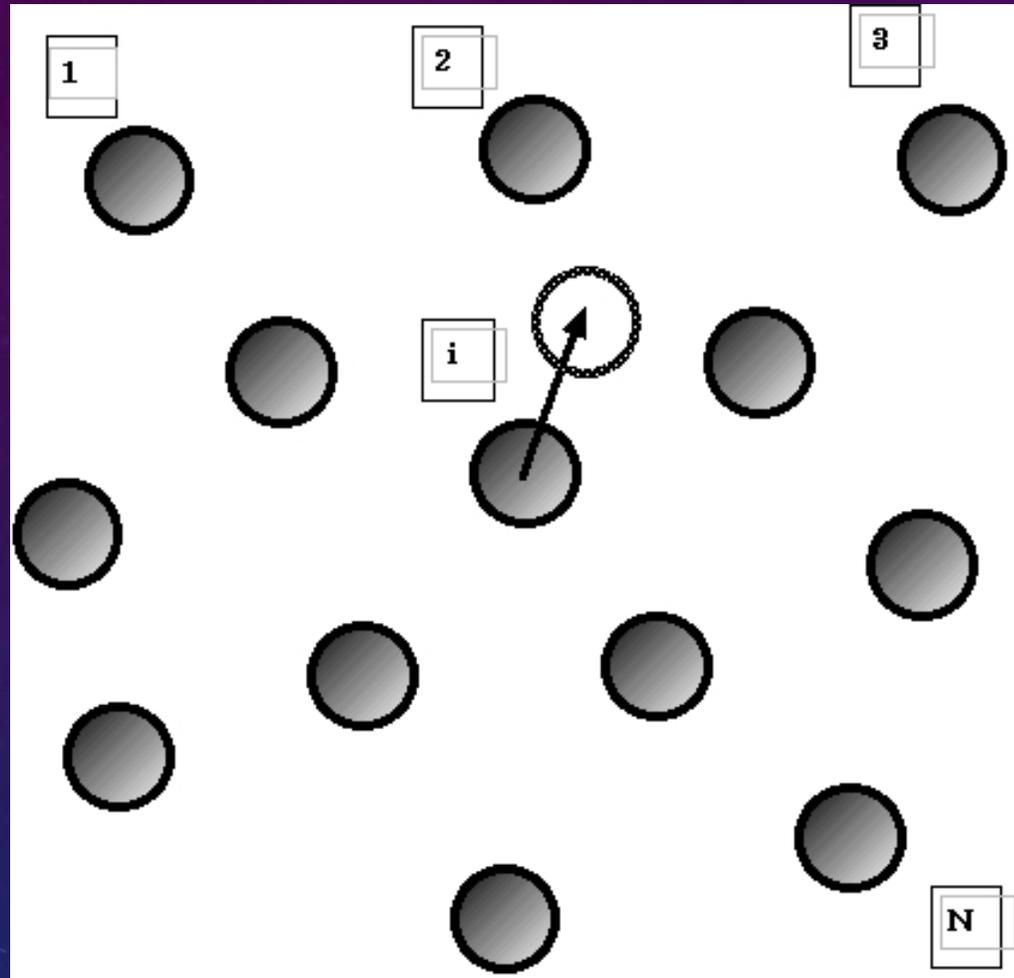
分子動力学法は、**材料の中の原子の動きを**
ニュートンの運動方程式を数値計算で解いて求める



$$\begin{cases} r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t V_i(t) + \frac{(\Delta t)^2}{2m_i} F_i(t) \\ V_i(t + \Delta t) = V_i(t) + \frac{\Delta t}{2m_i} \{F_i(t + \Delta t) + F_i(t)\} \end{cases}$$

$$F = ma$$

2-2 モンテカルロ法は、材料の中の原子配置を乱数により求める



統計的に正しい。
分子動力学法で求めるよりも楽。

粒子 i を乱数を生成して
試しに動かす。



この変化が実際に起きて
いいかどうかを
乱数を生成して決める。

起きていい確率： $p = \exp(-\Delta E / k_B T)$

一様乱数 $r < p$ ならばOK, そうでなければ配置をもとに戻す

2. 計算機実験の手法

2-3. 偏微分方程式の数値解法

- ・ 自然は物理法則に従う
- ・ 物理法則は偏微分方程式で与えられる

(例) 温度変化を記述する方程式

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right)$$

この方程式を計算機に解ける形に変形して、
プログラムを作り、計算する。 → **差分法、有限要素法**
→ 複雑な形をした物体の中の**温度変化**がわかる $T(x, y, z, t)$

- ・ 固体中の元素濃度(上と数学的に同じ式になる)
- ・ 液体の流れ
- ・ 固体中の力のかかり方
- ・ 固体中の電子の動き

**偏微分方程式を計算機で解くことで
わかる**

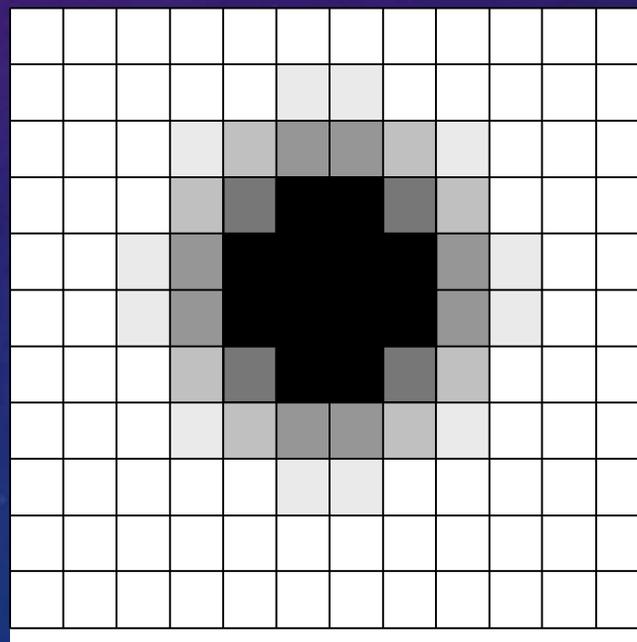
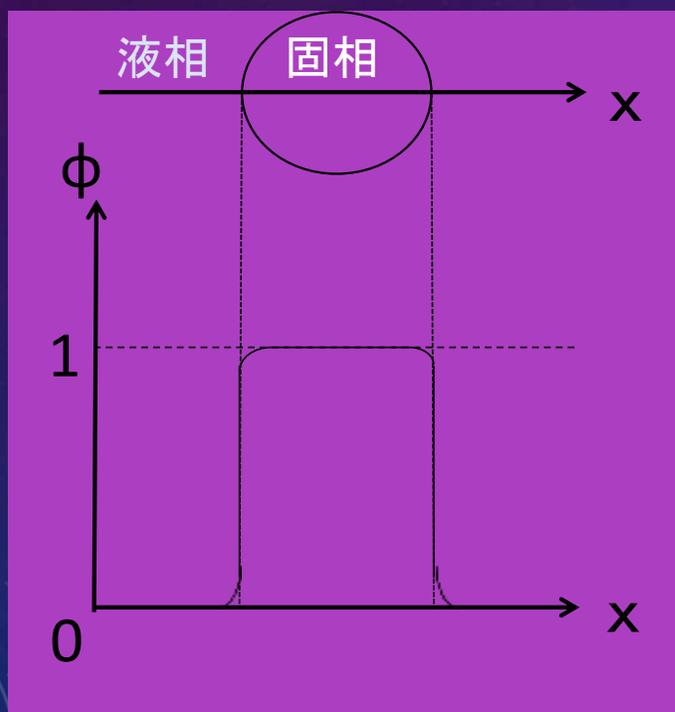
2-3 フェーズフィールド法

フェーズ = 相 (気相、液相、固相)

フィールド = 場

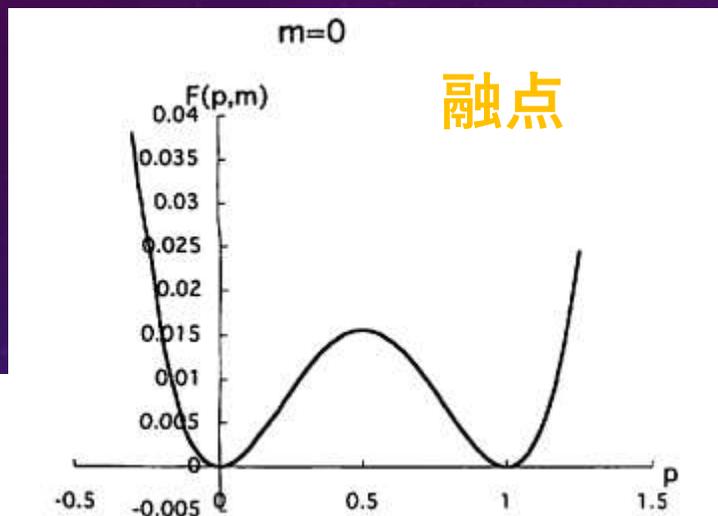
フェーズフィールドは、空間中の場所・時間の関数として相の状態を示す秩序変数である。

図は液相-固相の例、この場合液相は0、固相は1、固-液界面はその中間の値をとる。



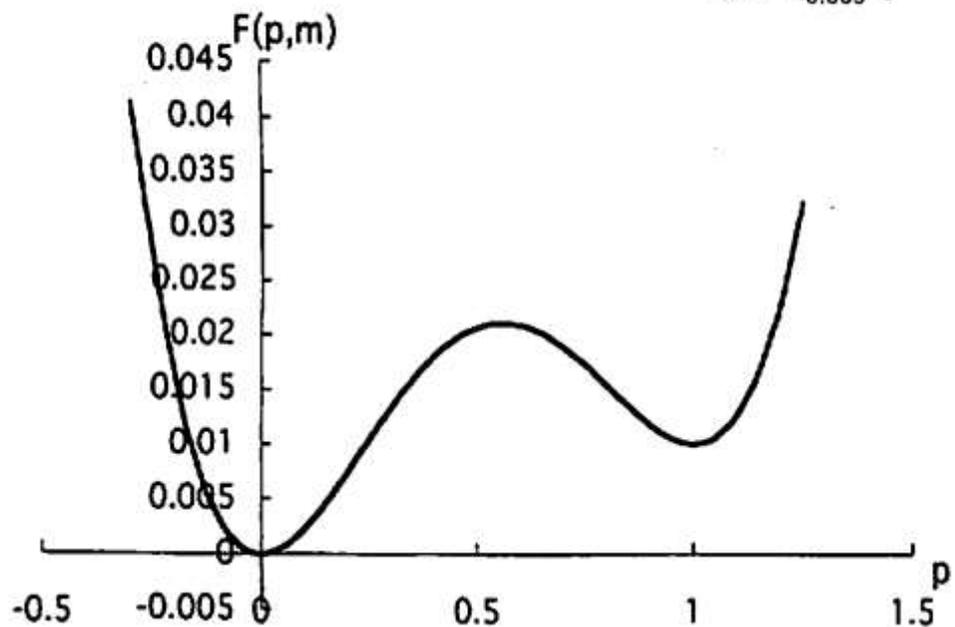
■ $\Phi=0$: 液相 ■ $\Phi=1$ 固相

熱力学的ポテンシャル(ギブスエネルギー $G=U+PV-TS$)



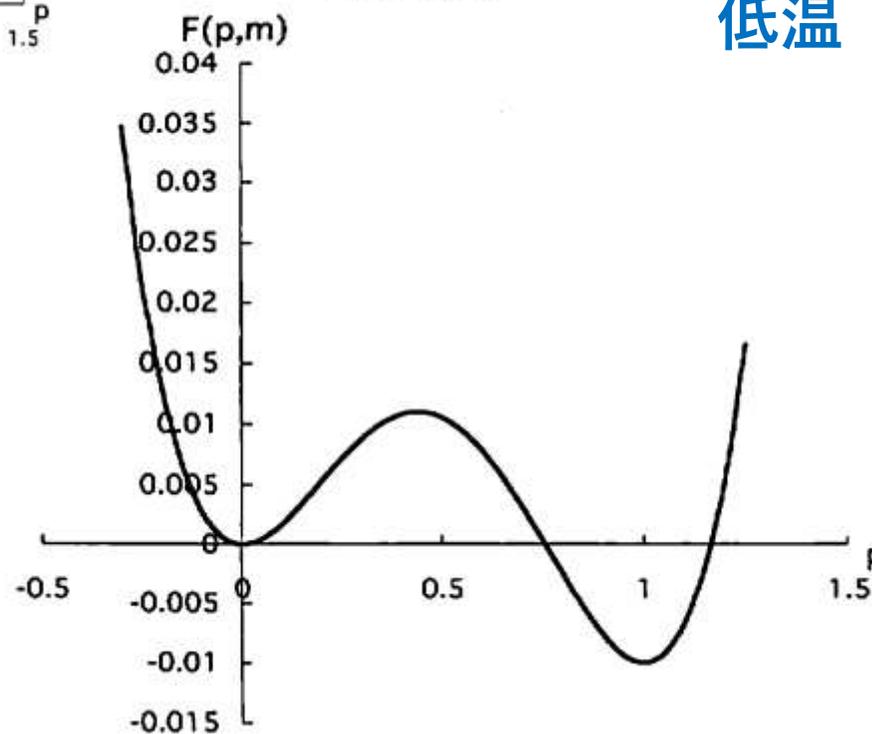
高温

$m=-0.06$



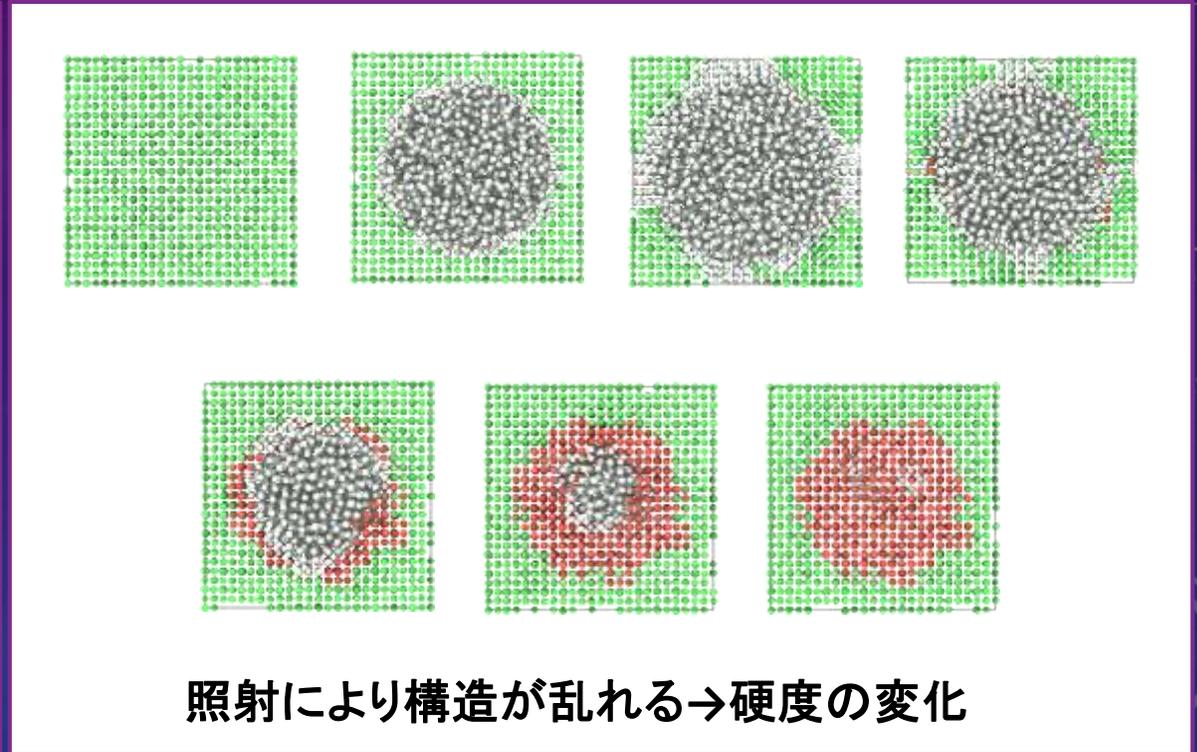
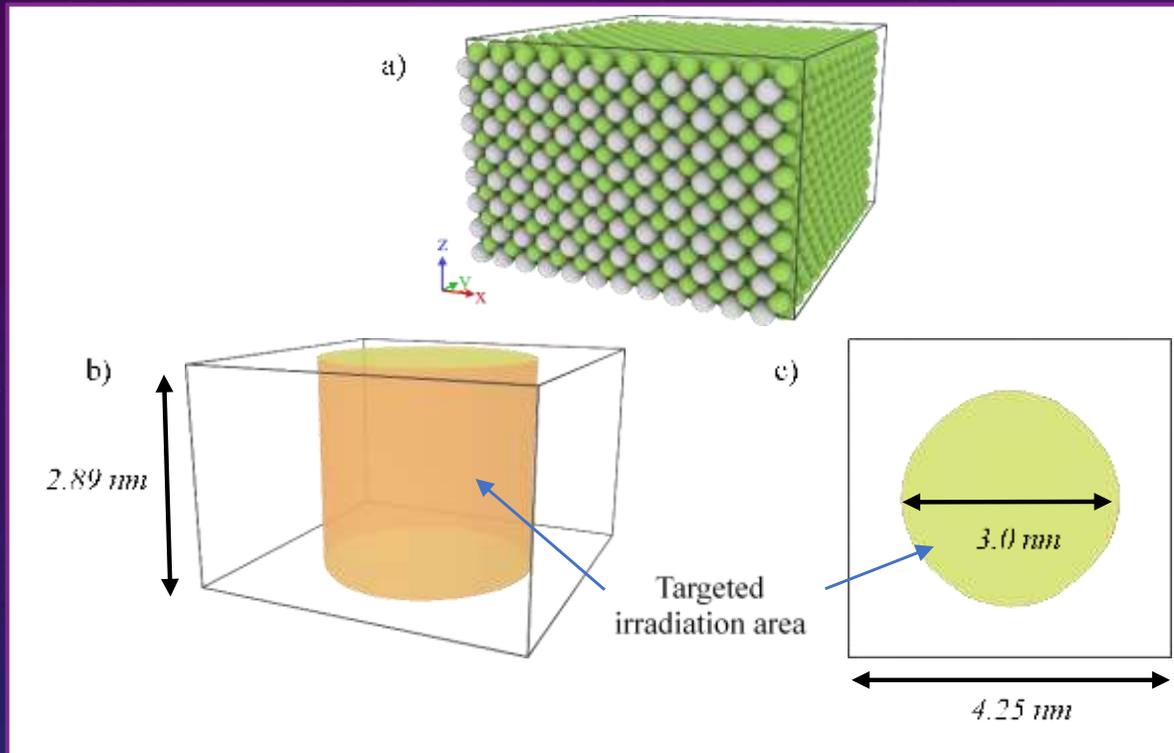
$m=0.06$

低温



3-1 分子動力学法

・材料照射実験(Ni_3Al)



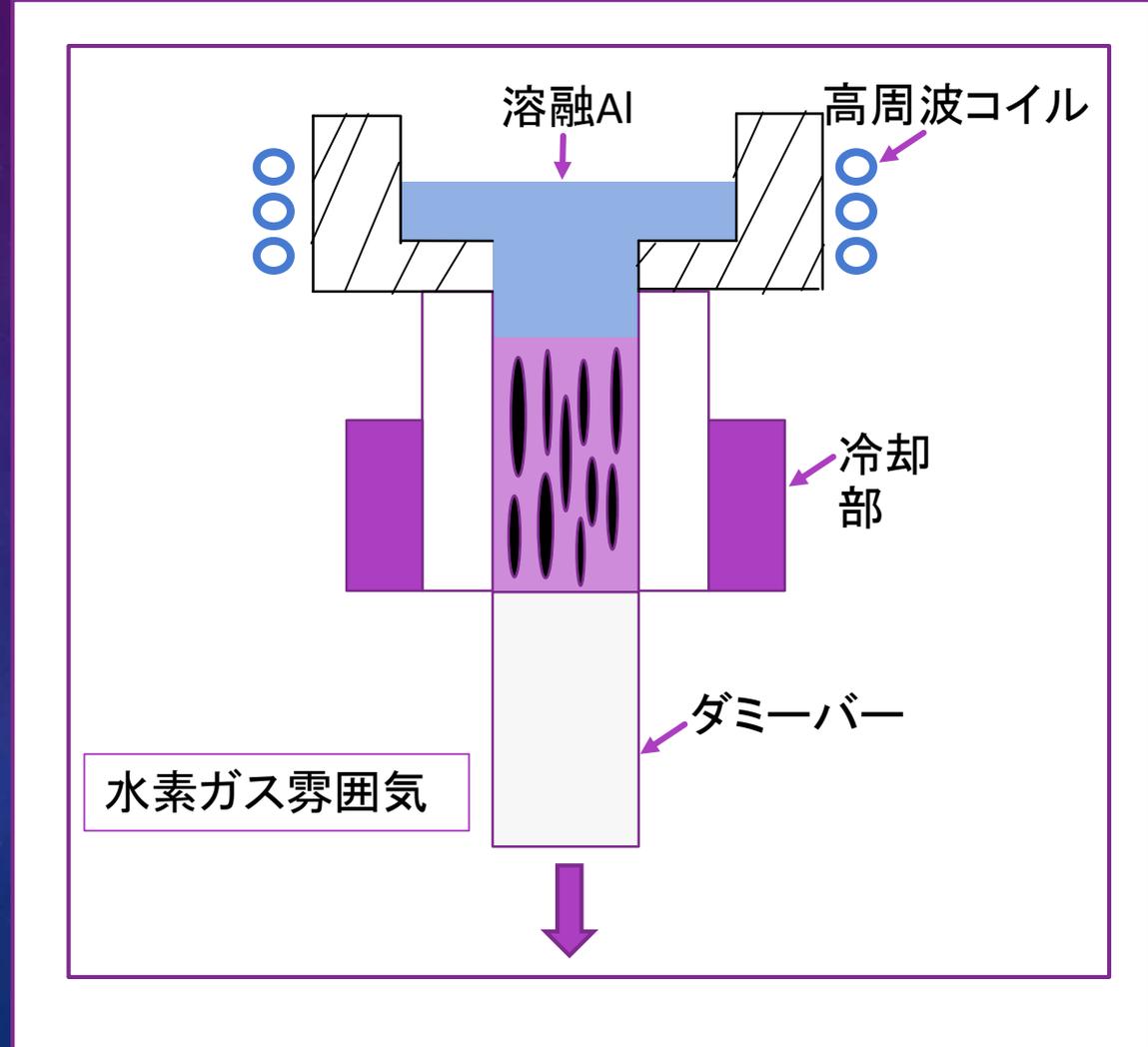
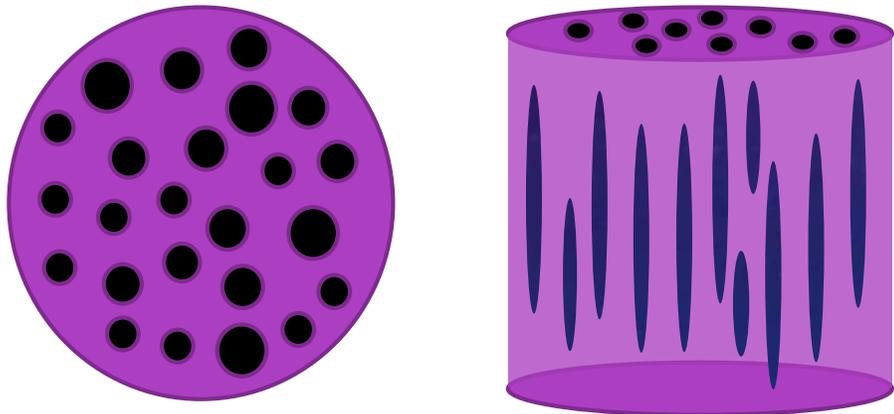
Ahmad Ehsan Mohd Tamidi, Yasushi Sasajima and Akihiro Iwase,
Materials Transactions, Vol. 61, No.1, pp. 72- 77 (2020)
[doi:10.2320/matertrans.MT-M2019241]

3-2 フェーズフィールド法

ロータスアルミニウムにおけるポア成長の最適条件探索

ロータス金属・・・

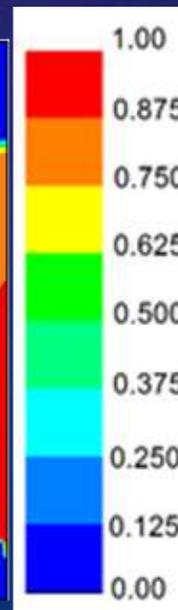
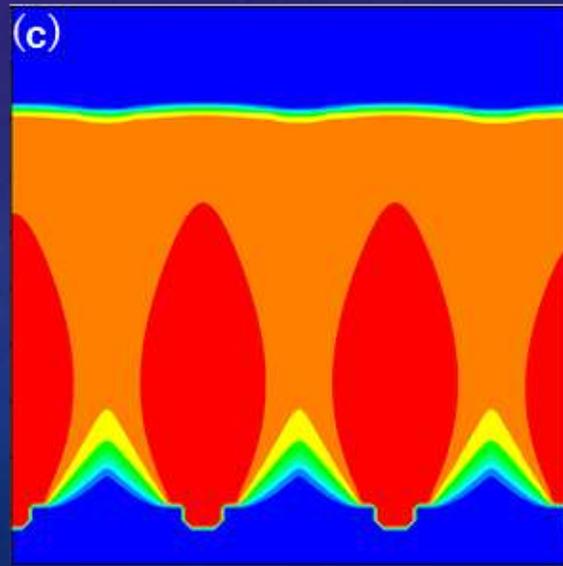
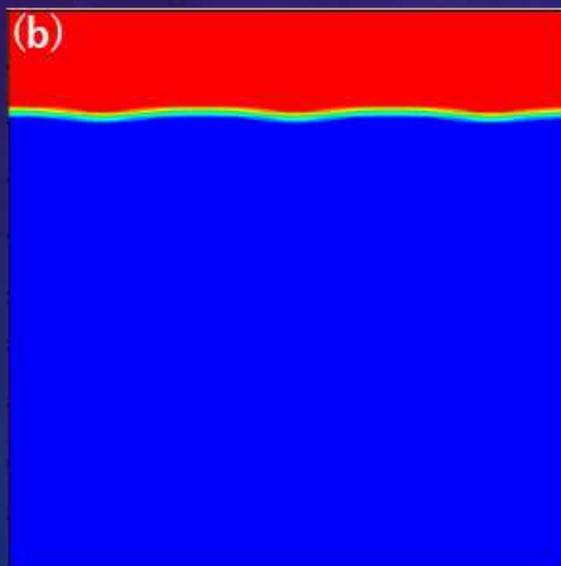
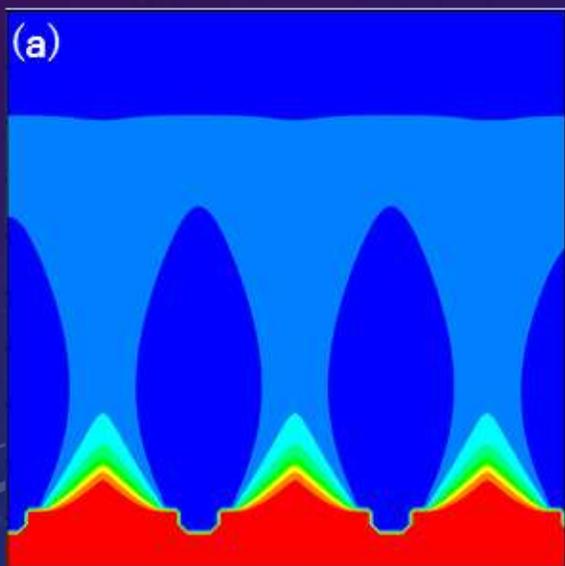
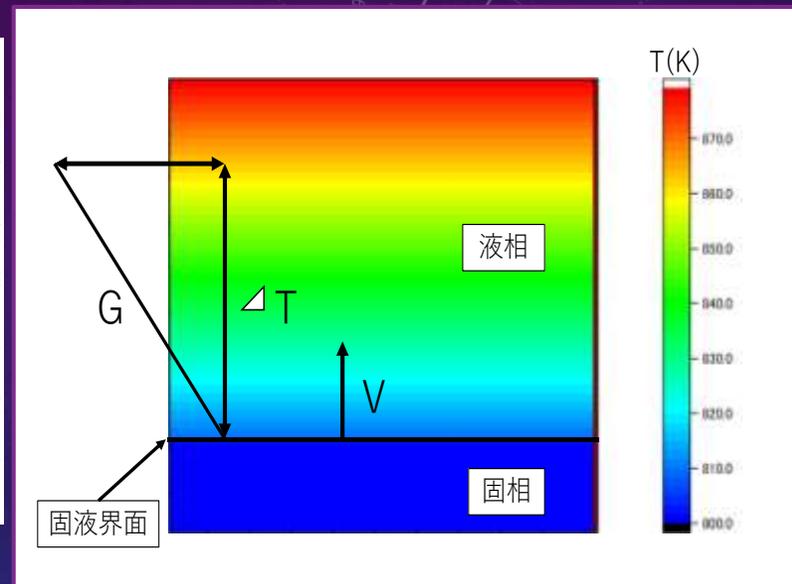
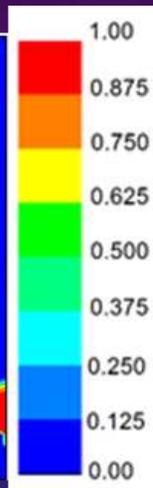
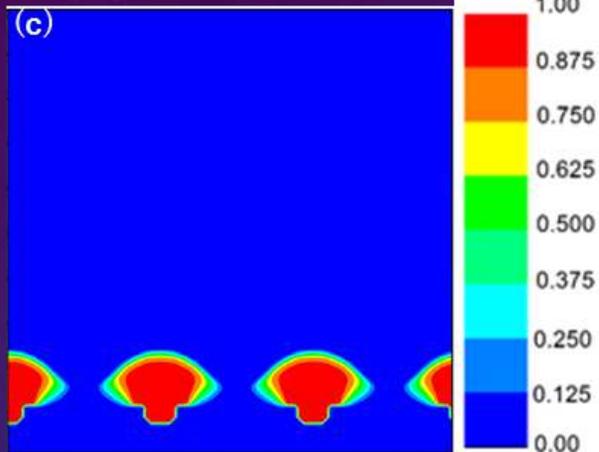
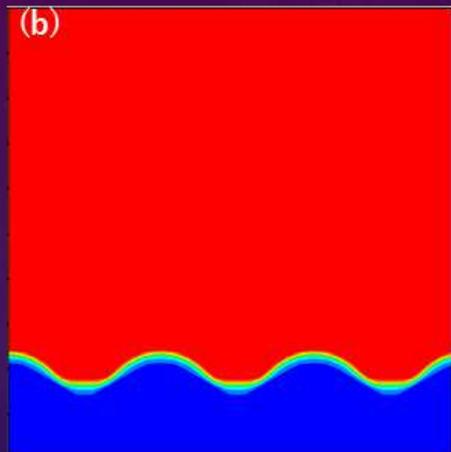
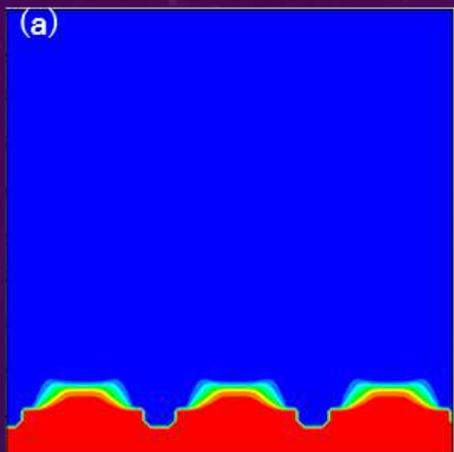
空隙である多数の気孔(ポア)を有するポーラス材料の中でも一方向に伸びた気孔を有する金属材料。



固相

液相

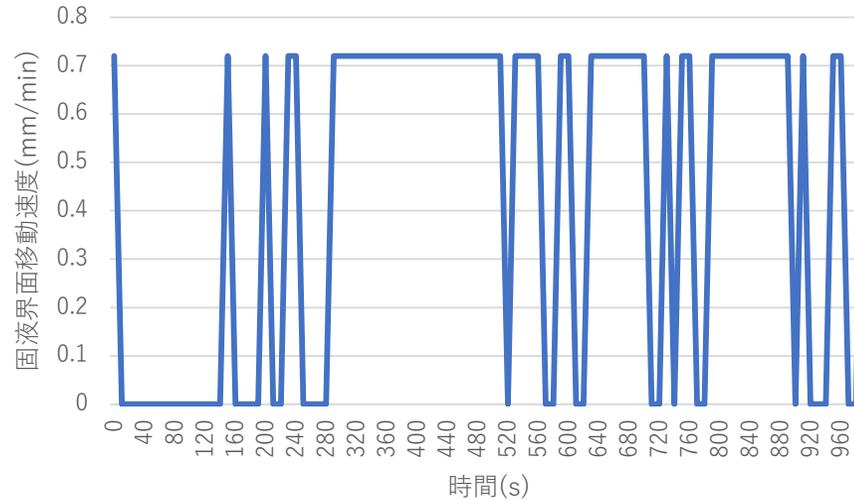
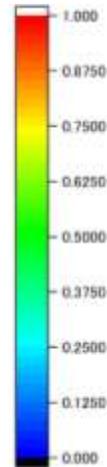
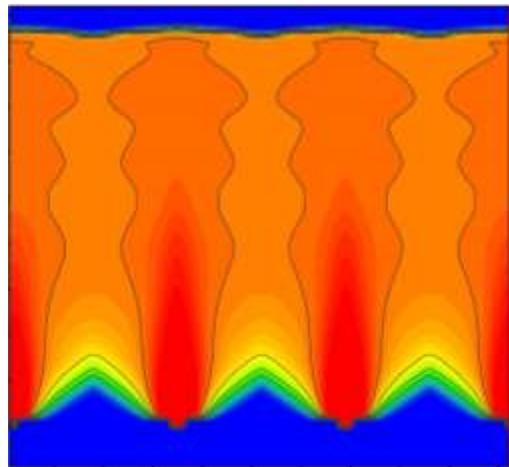
氣相



劉濱, 池田輝之,
篠嶋 妥,
輕金屬 第68卷(5),
pp. 257 – 258 (2018)

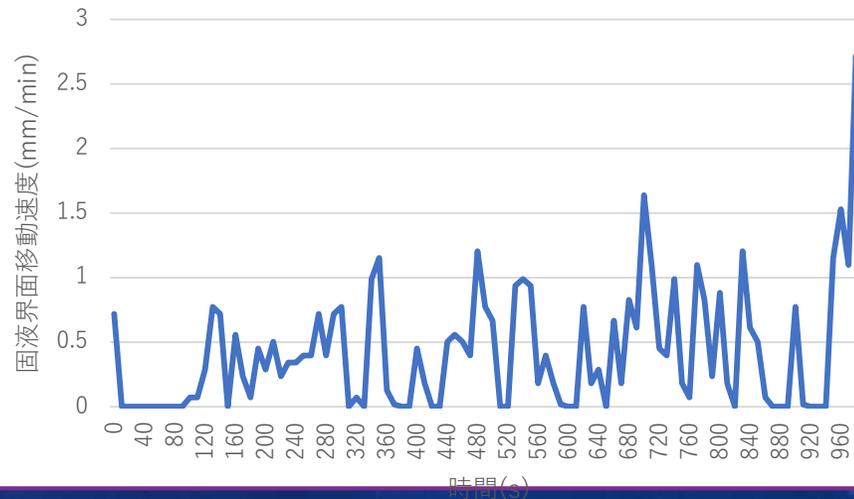
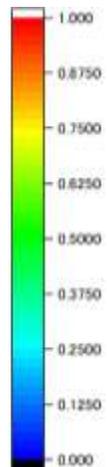
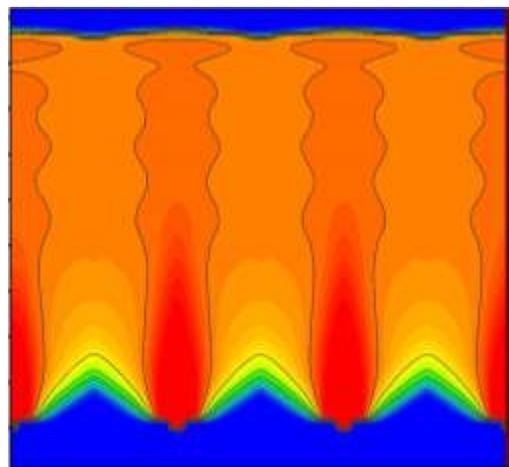
ポアサイズの変動に合わせて固液界面移動速度Vを変動

固液界面停止プログラム



制御のタイミング
 $\Delta t_{\text{check}} = 4 \text{ s}$

比例制御プログラム



比例定数
 $K_p = 0.00009$

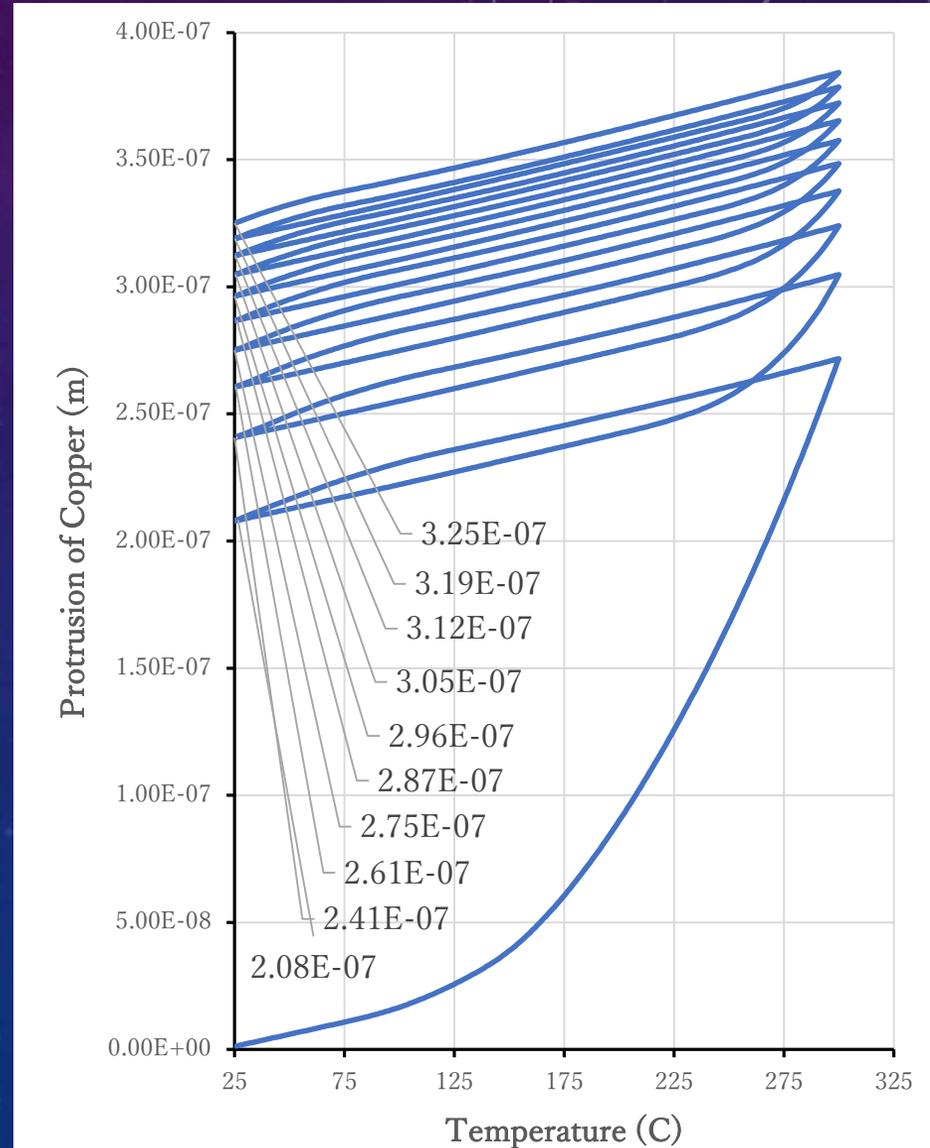
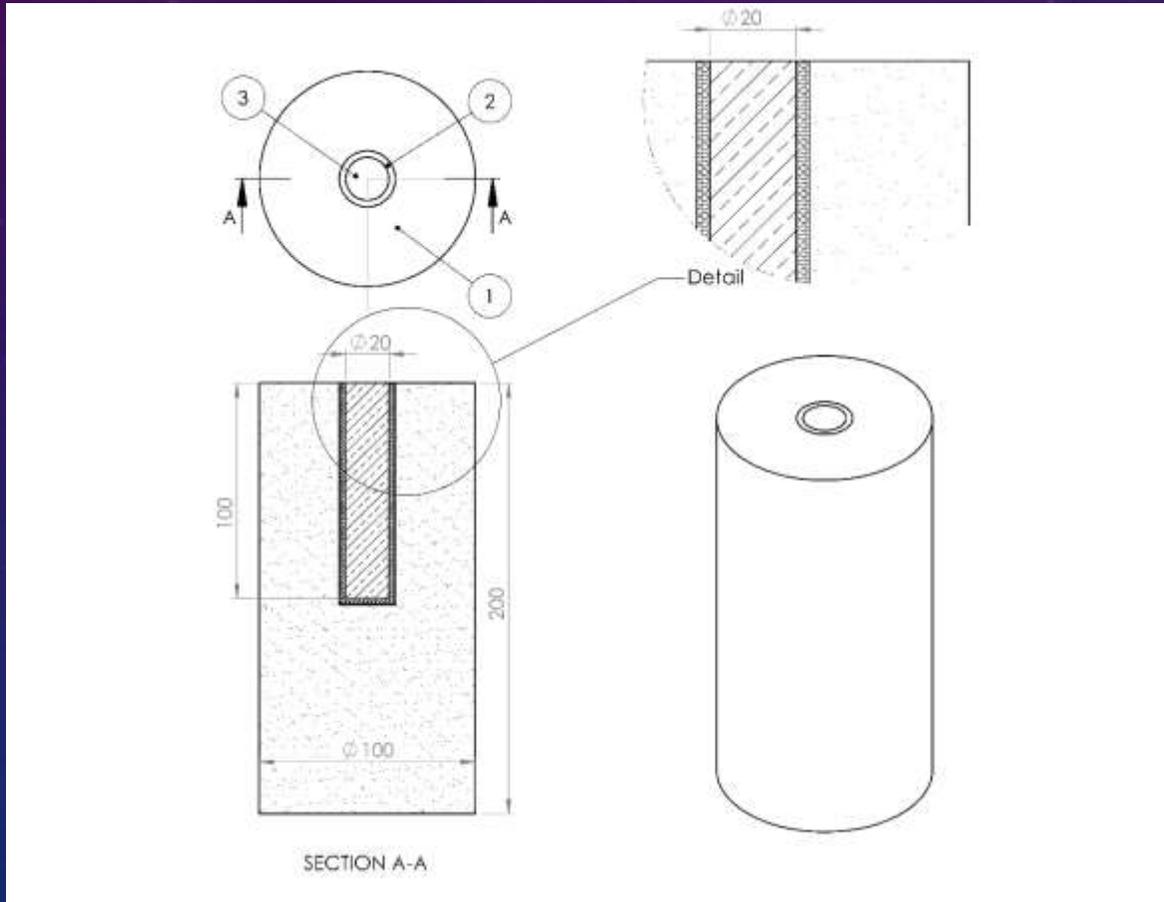
制御のタイミング
 $\Delta t_{\text{check}} = 3.5 \text{ s}$

3-3 有限要素法(FEM)

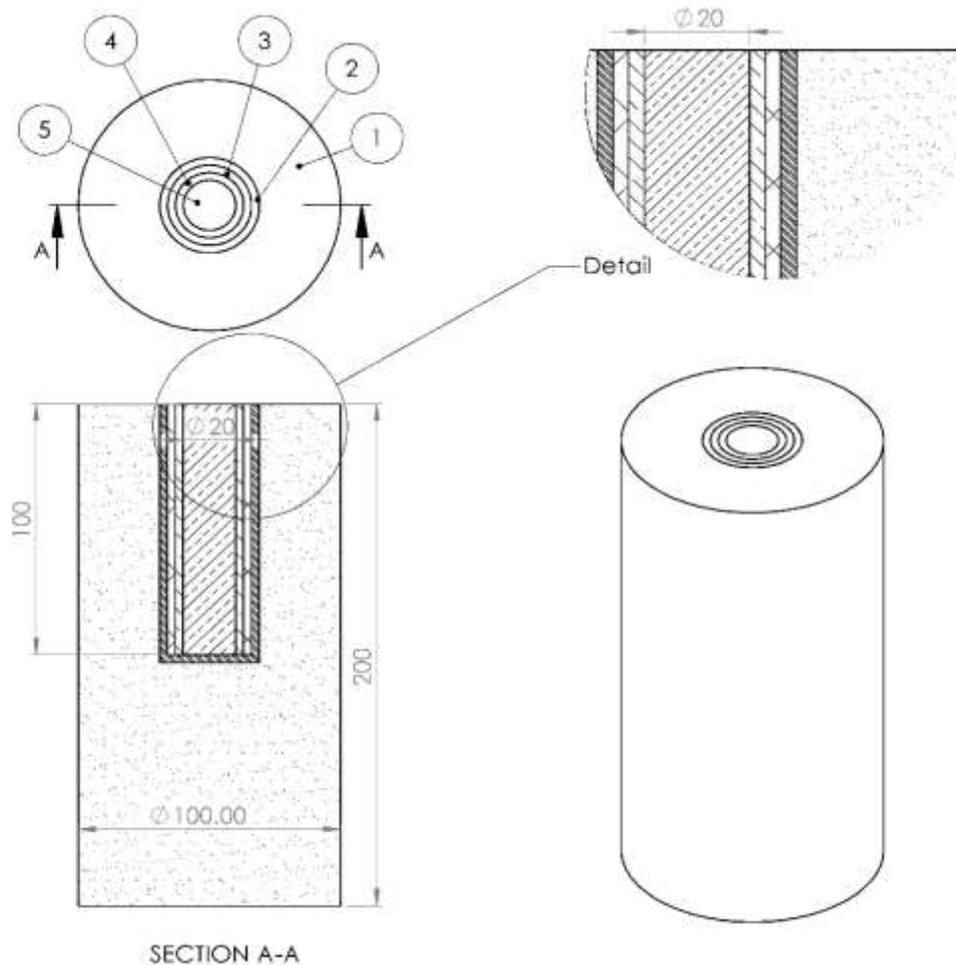
熱処理時における塑性変形を完全に抑制した LSI 配線用バリア膜

TSV(スルーシリコンビア)用バリア材
シリコンを貫通する金属配線

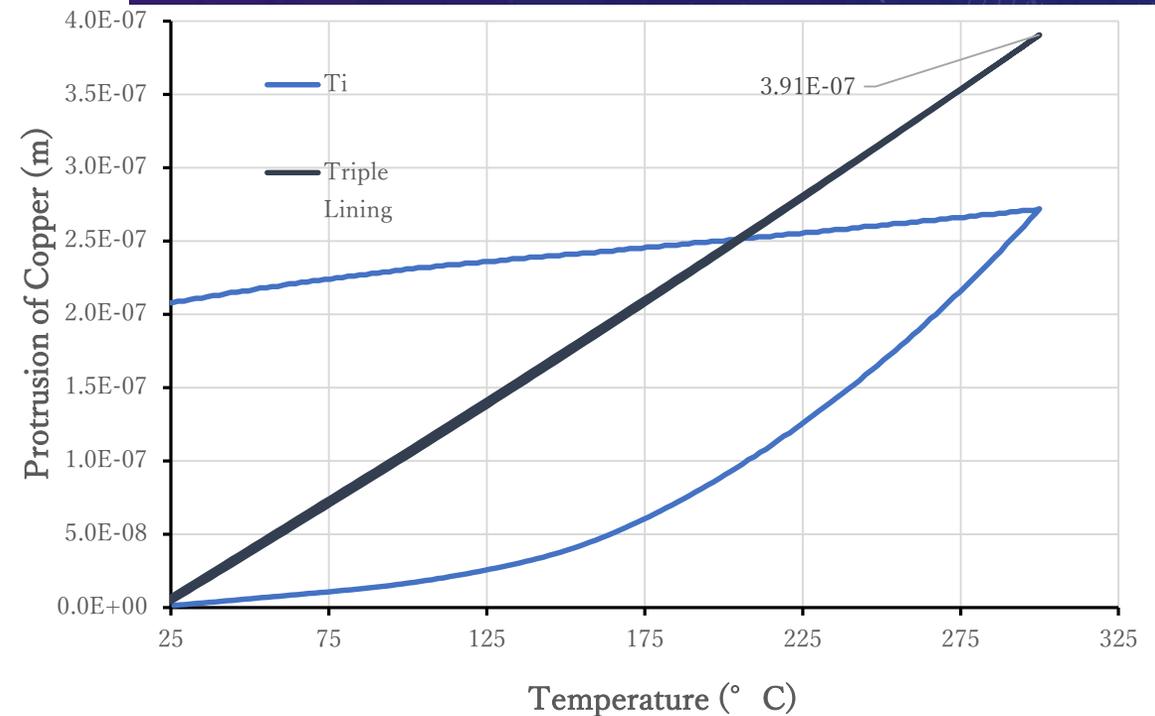
- 1. Silicon
- 2. Titanium (3 μm)
- 3. Copper



3層構造バリア (アルミニウム/AK-100高分子/タングステンバリア、 底部はアルミニウムのみ)のジオメトリ



1. Silicon
2. Tungsten ($0.5 \mu\text{m}$)
3. AK-100 Polymer ($0.5 \mu\text{m}$)
4. Aluminum ($0.5 \mu\text{m}$)
5. Copper



Cuスルーシリコンビア (TSV)の熱処理に伴うCu突出を抑制するバリア膜の探索を行った。三層構造膜とし、内側は基体であるシリコンよりも高いヤング率、外側は銅よりも高い熱膨張率、中間層はシロキサンのように柔らかい樹脂層とすれば、Cu突出をほぼ完全に抑制できることを発見した。

篠嶋 妥, Yazdan Zare, 大貫 仁, 特願2018-205406, “配線構造”

Yazdan Zare, Yasushi Sasajima and Jin Onuki, J. Electron. Mater., Vol.49, pp. 3692–3700 (2020)

<https://doi.org/10.1007/s11664-020-08076-z>