



Title	Ab-initio Calculations of Atomic, Electronic Structure, and Structural Properties of β -Si ₃ N ₄
Author(s)	Belkada, Rachid
Citation	大阪大学, 2001, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/42346
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	べるかだ Belkada	らしーど Rachid
博士の専攻分野の名称	博 士 (工 学)	
学 位 記 番 号	第 1 6 2 1 7 号	
学 位 授 与 年 月 日	平成 13 年 3 月 23 日	
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科機械システム工学専攻	
学 位 論 文 名	Ab-initio Calculations of Atomic, Electronic Structure, and Structural Properties of β -Si ₃ N ₄ β -Si ₃ N ₄ における原子配列、電子構造および構造的性質の第一原理計算	
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 奈 賀 正 明	
	(副査) 教 授 澁 谷 陽 二 教 授 北 川 浩 教 授 森 博 太 郎 助 教 授 柴 柳 敏 哉	

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は局所密度近似を用いる密度汎関数理論に基づき β -Si₃N₄ の結晶構造と電子構造について研究した結果をまとめたものであり、以下の 6 章から構成されている。

第 1 章は緒言であり、これまでの研究現状および本研究の目的と研究内容について述べている。

第 2 章では、本研究で用いた計算方法について説明している。

第 3 章では、 β -Si₃N₄ の最も安定な格子定数と単位胞内原子座標のセットを構造緩和計算による全エネルギー最小化法で求めている。安定な格子定数は、 $a_0 = 0.7562 \pm 0.00015$ 、 $c_0 = 0.2893 \pm 0.00007$ (nm) であり、内部原子座標である Si-N の長さ、N-Si-N の結合角度も決定している。体積弾性率 (B_0) および弾性率 C_{13} および C_{33} の信頼性の高い値を求めている。

第 4 章では、 β -Si₃N₄ の最も安定な構造について価電子密度を計算している。価電子密度分布は、Si から N 原子へ価電子が部分的に移動していることを示し、Si-N 結合は、イオン結合と共有結合を併せ持っていることを明らかにしている。 β -Si₃N₄ の安定構造についてバンド構造を計算している。価電子バンド幅を 18.2 (eV)、バンドギャップ値を 4.3 (eV) と計算しており、これらの値は実験結果とよく一致していることを示している。

第 5 章では、安定構造の電子構造を用い Hellman-Feynman 力により原子位置の構造緩和計算を行い、 β -Si₃N₄ における $P6_3/m$ と $P6_3$ 構造の構造安定性の比較を行っている。実験的に認められた格子定数付近の $P6_3$ 構造はいずれも構造緩和により $P6_3/m$ 構造に移行することを示している。計算された $P6_3$ 構造の全エネルギーは N 原子の z 軸の変化にともないわずかに減少することを示している。

第 6 章では、本研究で得られた結果をまとめ、総括している。

論 文 審 査 の 結 果 の 要 旨

本論文では、局所密度近似を用いる密度汎関数理論に基づく第一次摂ポテンシャル法を適用し、 β -Si₃N₄ の結晶構造と電子構造を解明し、正確な格子定数および原子の内部座標、弾性率や価電子分布、バンド構造を明らかにするとともに、 β -Si₃N₄ における $P6_3/m$ と $P6_3$ 構造の構造の比較を行い、 $P6_3/m$ の構造安定性を検討したものであり、

以下に本研究の成果を要約すると以下の通りである。

(1) β - Si_3N_4 の構造緩和計算による全エネルギーの体積変化による全エネルギー最小化法から、最も安定な格子定数と単位胞内原子座標のセットを求めた。安定な格子定数は $a_0 = 0.7562 \pm 0.00015$ 、 $c_0 = 0.2893 \pm 0.00007$ (nm) であり、内部原子座標である Si-N の長さおよび、N-Si-N の結合角度も決定している。これらの結果は本研究に用いた計算法が精度の高いものであることを示している。さらに、体積弾性率 (B_0) = 263 (GPa) および弾性率 $C_{11} = 112.976$ (GPa) および $C_{33} = 550.172$ (GPa) の信頼性の高い値を求めている。

(2) β - Si_3N_4 の最も安定な構造について $z = \frac{1}{4}c_0$ における価電子密度を計算し、価電子密度の等高線図を得ている。価電子密度分布は、Si から N 原子へ価電子が部分的に移動していることを示し、Si-N 結合は、イオン結合と共有結合を併せ持っていることを明らかにしている。 β - Si_3N_4 の安定構造についてバンド構造を計算している。価電子バンド幅を 18.2 (eV)、バンドギャップ値を 4.3 (eV) と計算しており、これらの値は実験結果とよく一致していることを示している。 β - Si_3N_4 の単位胞には、6 個の Si と 8 個の N 原子があり、計 64 個の価電子があり、そのうち 16 個が下部価電子バンドに、48 個が上部価電子バンドに収容されており、価電子バンドはすべて充満していることを明らかにしている。

(3) 安定構造 β - Si_3N_4 の電子構造を用い Hellman-Feynman 力により原子位置の構造緩和計算を行い、 β - Si_3N_4 における $P6_3/m$ と $P6_3$ 構造の構造安定性を比較を行っている。実験的に認められた格子定数付近のを $P6_3$ 構造はいずれも構造緩和により $P6_3/m$ 構造に移行することを示している。計算された $P6_3$ 構造の全エネルギーは N 原子の z 軸の変化にともないわずかに減少することを示している。本研究の計算結果は β - Si_3N_4 において $P6_3/m$ が最も安定な構造であることを明らかにしている。

以上のように、本論文は、 β - Si_3N_4 の正確な格子定数、原子の内部座標などの結晶構造、弾性率および Si、N 原子の回りの価電子分布やバンド構造などの電子構造を局所密度近似を用いる密度汎関数理論に基づく第一次摂動ポテンシャル法を適用し、 β - Si_3N_4 の結晶構造と電子構造を解明したもので、これらは β - Si_3N_4 の機械材料学的性質の理解する上で基礎となり得るもので、機械工学に新しい知見を与えるものとして、機械システム工学に寄与することが大きい。よって本博士論文として価値あるものと認める。