

Title	分子動力学法を電子デバイス強度評価に適用するためのマルチスケール解析手法に関する研究
Author(s)	松岡, 俊樹
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/46983
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、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

氏名	まつ 松 岡 俊 樹
博士の専攻分野の名称	博士(工学)
学位記番号	第 20391 号
学位授与年月日	平成 18 年 3 月 24 日
学位授与の要件	学位規則第 4 条第 1 項該当 工学研究科ビジネスエンジニアリング専攻
学位論文名	分子動力学法を電子デバイス強度評価に適用するためのマルチスケール解析手法に関する研究
論文審査委員	(主査) 教授 座古 勝 (副査) 教授 佐藤 武彦 教授 山本 孝夫 教授 澁谷 陽二

論文内容の要旨

ユビキタス・コンピューティングのための次世代電子デバイスは、小型・高密度化が求められる。それらの製造技術はもとより、その設計・評価技術確立も重要な課題である。数値計算は評価に有効な手段であるが、従来の数値解析では取り扱える規模が限定されており、製品サイズから構成要素サイズまでを一括して取り扱うことは困難である。それに加えて、電子部品の性能はナノオーダーの構成要素に依存するため、原子領域を考慮して特性評価を行う必要がある。このような背景から、本研究目的は、原子から製品全体を表現するマクロ場までを扱えるマルチスケール解析手法の構築にある。本論文は、マルチスケール解析手法の提案とその手法の妥当性の検証を行ったものであり、全 5 章で構成した。

第 1 章は緒論として、本研究の背景と研究目的について記述した。

第 2 章では、次世代電子デバイス設計・開発に必要となる解析技術を明確にするため、現在のマルチスケール解析技術について記述した。

第 3 章では、分子動力学法を用いて、電子デバイスに使用されている金属と高分子を対象に物性値算出を試みた。まず、金属薄膜の物性値を算出した結果、実験と定性的な一致を得た。さらに、電子デバイスの絶縁材料として必要不可欠な高分子についても物性値算出を記述した。解析対象を、最も一般的な結晶性ポリエチレンとし、解析結果と実験値と比較し、高精度で物性値を予測できることを示した。さらに、薄膜デバイスに使用されているアモルファス構造のポリイミドの物性値算出を試みた。まず、単純な構造のポリイミドを対象に第一原理計算と比較することで、ポテンシャルの妥当性を確認した。そのポテンシャルを用いて、アモルファス構造を作成し、系のエネルギー変化から物性値算出を行った。解析では原子数 1000 以下と少量のモデルに関わらず、実験値を大略良く反映していることを示した。

第 4 章では、マクロ・メゾ・ミクロの 3 スケールの連続体モデルを同時に扱う M^3 法の定式化と精度検証について記述した。精度検証の結果、 M^3 法は従来の有限要素法とほぼ同程度の解が得られることを示した。さらに、 M^3 法と分子動力学法の連結のための手法を提案した。提案手法の妥当性評価は、モデルを設定し、従来の分子動力学法と提案手法による結果の比較より行った。その結果、両者ともほぼ同等の値が得られた。そのことから、手法の妥当性が確認された。さらに、薄膜電子デバイスを対象として解析を行い、ミリオーダーからナノオーダーまでを同時に

計算できることを示した。

第5章では、得られた結果と知見を記述し、本論文の結論とした。

論文審査の結果の要旨

次世代電子デバイスは、小型・高密度化が求められる。それらの製造技術はもとより、その設計・評価も重要な課題であり、有限要素法による数値計算の導入が進んでいる。しかし、従来の有限要素法では取り扱えるスケール差が限定されており、製品サイズから薄膜などの構成要素サイズまでを一括して取り扱うことは困難である。加えて、電子部品の性能はナノオーダーの構成要素に依存するため、原子領域を考慮して特性評価を行う必要がある。かかる理由から、本論文では、3スケールの連続体モデルを同時に取り扱い可能な有限要素解析手法である M^3 法と、分子動力学法を連結することで、原子挙動まで取り扱い得るマルチスケール解析手法を提案している。

原子領域を対象とした場合、力学的物性値はバルク材と異なることが知られていることから本論文では、電子デバイスに適用される材料に対して、分子動力学法を導入し、力学的物性値を算出している。次世代電子デバイスの抵抗体として使用される金属薄膜について、その力学的物性値を算出し、ある厚み以下ではバルク材と大きく変わることを明らかにしている。また、絶縁材料として使用されている高分子材料を対象に、力学的物性値算出を試みている。試験値との比較から、分子鎖のフレキシビリティを考慮することが物性値算出には重要であることを明らかにしている。また、様々な化学構造の高分子の力学的物性値を簡易的に算出可能であることを示している。

分子動力学法と有限要素法の連結については、 M^3 法に準連続体力学を導入し、まず、原子モデルと連続体モデル間の相互作用を考慮した原子挙動まで把握できるマルチスケール解析手法を定式化し、次いでそのプログラム開発ならびに欠陥を有する原子モデルに対して手法を適用し、その妥当性を示している。さらに、薄膜電子デバイスを対象として解析を実施し、ミリオオーダーの基板からナノオーダーの薄膜を同時に解析可能であることを実証している。

以上のように、本論文は製品レベルから原子レベルの構造要素の相互影響を考慮したマルチスケール解析手法の開発に関する研究をまとめたものである。開発した手法で原子の構造変化から分子シミュレーションを用いて様々な物性値を求め得るので、機能評価への適用も可能となるなど、工学に寄与するところは大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。