

マテリアルズインフォマティクスの材料設計への適用例

- ・ 1990年 日立製作所 入社 以来、分子シミュレーションを活用した材料設計に従事。主に半導体、磁気ディスク等の電子部品、エレクトロニクス製品に適用。

(株)日立製作所 研究開発グループ

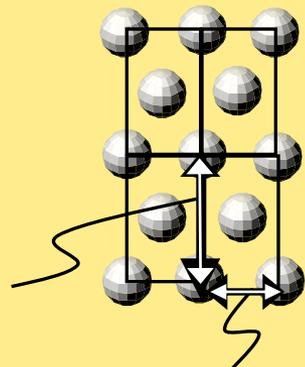
岩崎 富生

適用例(1) 電子部品の銅配線との密着性に優れたバリア金属の探索

材料の特性は、界面物性が支配的である場合が多い

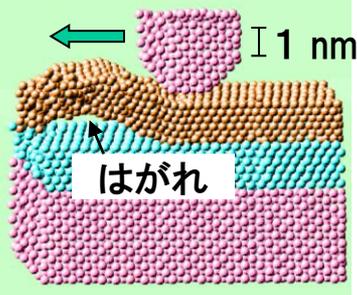
→ 界面の特徴を表す記述子(パラメータ、説明変数)に気付くことが重要

長辺格子定数

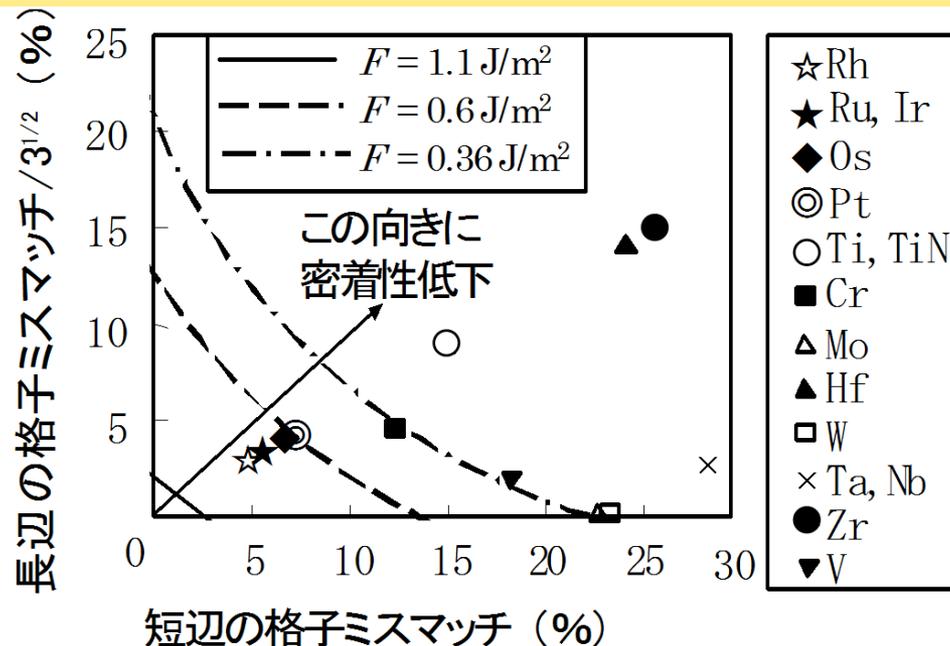


短辺格子定数
(fccおよびhcpの場合、最近接原子間距離)

界面の原子面を表す
面心長方格子と
格子定数の定義

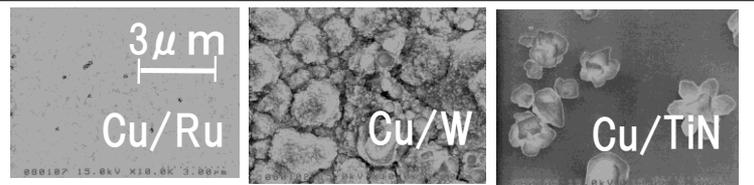


密着強度解析のためのスクラッチシミュレーション



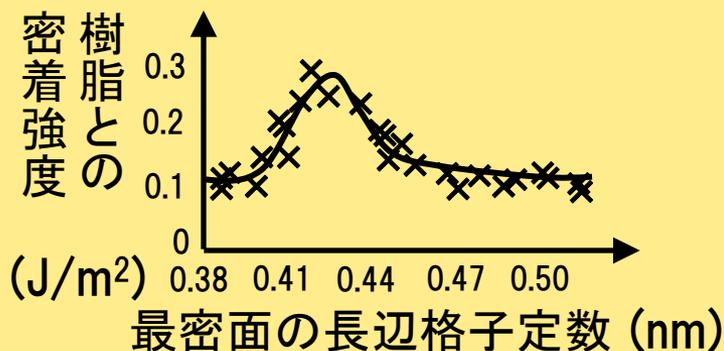
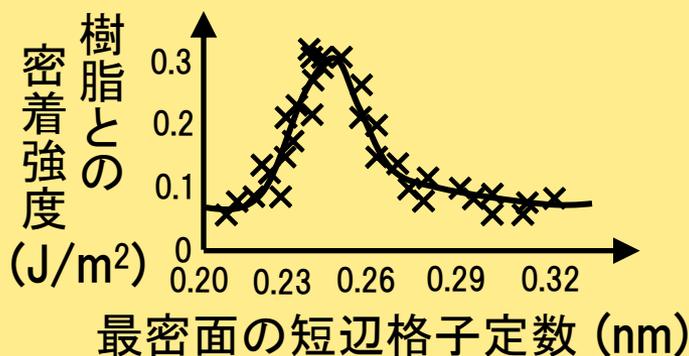
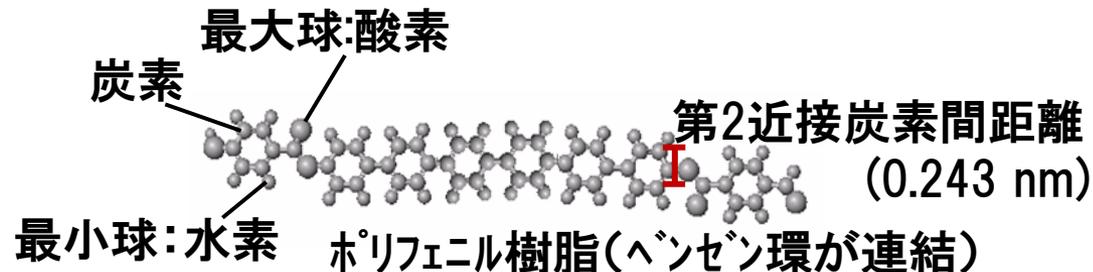
銅との剥離エネルギーを2次元格子ミスマッチを記述子として等高線表示した図(材料が実在しない領域も仮想材料シミュレーションで計算が可能)

SEMによるCu表面の観察結果



銅との2次元格子ミスマッチの小さい高融点白金族(Ru等)が有効

適用例(2) ポリフェニル樹脂との密着強度に優れた金属材料の探索



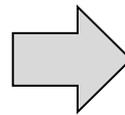
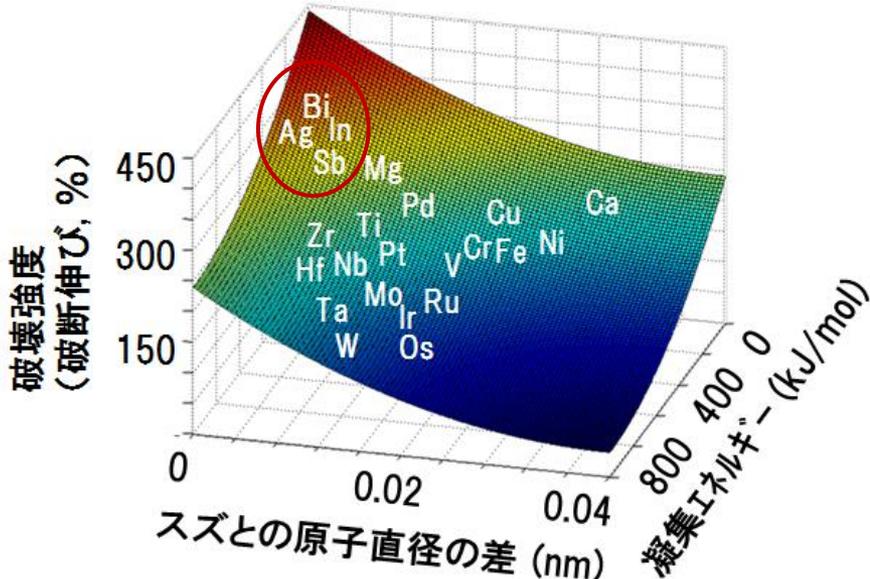
応答曲面法を用いて界面強度のシミュレーション結果を2変数関数で表現

特徴パラメータ	金属の最適条件
格子定数 (短辺)	ベンゼン環の 第2近接炭素間距離 (0.243 nm)
格子定数 (長辺)	上記の√3倍 (0.421 nm)

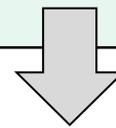
上記最適条件を満たす積層金属Cu/Ru/Coが密着性確保に最適である

適用例(3) 鉛フリーはんだの破断伸びを向上させる添加元素

パワーデバイス向けのはんだ材



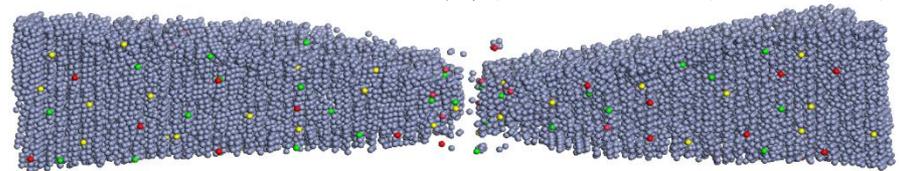
特徴パラメータ (説明変数)	添加元素の最適条件
原子半径	スズと同じ
凝集エネルギー	ゼロ(小さいほど良い)



銀、ビスマス、インジウム、アンチモンの添加が有効

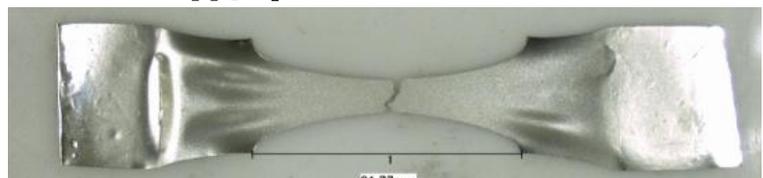
破断伸びをパラメータの関数で表現
(材料が実在しない領域も
仮想材料シミュレーションで計算が可能)

銀、ビスマス、インジウムを添加した結果



シミュレーション結果
破断伸び: 298%

5 nm



実験結果
破断伸び: 295%

10 mm