

審査の結果の要旨

氏名 久保 淳

本論文は、デバイス材料の信頼性を評価するための計算科学的アプローチとして原子モデリングによる解析法に注目し、高精度なシミュレーションを行うためのモデリング手法を提案するとともに、さまざまなデバイス材料に対する原子モデリング解析を行ってその妥当性を検討したものである。

デバイス材料の信頼性評価を考えると、原子レベルの構造が変化することが直接的に材料としての信頼性に影響する「構造的信頼性」と、構造の乱れに起因する物性変化が材料の機能性（磁性など）に変化をもたらすことでデバイス材の信頼性に影響する「機能的信頼性」に分類できる。さらに前者は、理想的には温度効果を取り除いた静力学的取扱いが可能な特性（理想強度など）、および本質的に原子の熱揺動によってもたらされる特性（拡散など）の 2 つに分類することができ、それぞれ「静力学的構造信頼性」、「動力学的構造信頼性」と呼ぶことを提案する。このような三種類の信頼性に分類し、それぞれに応じた原子モデリング手法を考えることが重要であると提唱する点が本論文の特徴の一つである。

本論文は以下のような構成となっている。

第 1 章では、緒論として、デバイス材料の信頼性について議論するとともに上記の 3 分類を提唱している。また、デバイス材料の原子シミュレーションの現状と課題について述べ、本研究の目的について纏めている。

第 2 章では、デバイス材料の信頼性評価のために必要となる、トランスフェラビリティ（環境非依存性）に優れた原子間ポテンシャルモデルについて述べるとともに、本研究で開発した独自のポテンシャル構築アルゴリズムについて説明している。

第 3 章では、静力学的構造信頼性に対するアプローチとして、SiC を例としてとりあげ、理想強度を高精度で再現するポテンシャルの作成を行った。SiC は 3C 立方晶や 4H 六方晶等の構造多形を示すとともに、強い異方性を有する複雑な機械的特性が特徴であるが、電子密度分布の単極子・双極子・四重極子項を表現可能な ADP モデルを用いることで、3C および 4H 構造について引張り・

せん断理想強度のみならず多軸応力下での臨界応力まで高精度で再現するポテンシャルが作成できることを実証した。またそれを用いた分子動力学 (MD) 解析により、SiC が欠陥の影響によりすべり、へき開、相変態という多様な変形形態を示すことを明らかにした。

第 4 章では、動力的構造信頼性に対するアプローチとして、イットリア安定化ジルコニア (YSZ) およびスズ (Sn) の拡散問題を取り上げた。YSZ には酸素周りの電気分極を表現する Dipole モデル、Sn には ADP モデルを採用することで、原子拡散を適切に再現するポテンシャルが得られることを示すとともに、YSZ の立方晶・正方晶における酸素イオン拡散特性や、Sn における銅添加による拡散抑制効果を予測した。

第 5 章では、機能的信頼性に対するアプローチとして、ネオジム磁石 ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$) 結晶の原子モデリングを行った。ADPモデルを採用し、適切なフィッティングを行うことで、きわめて複雑なネオジム磁石結晶構造を原子モデルで再現することに初めて成功した。これを用いた原子モデリング解析により、ネオジム磁石の界面近傍に生じる構造の乱れと磁気異方性の低下の関連性を求め、界面の種類によって磁気的特性の低下が大きく異なることを示した。

第 6 章では本研究で得られた結果を総括するとともに、今後の展望について議論した。今後計算機能力の性能が向上し大規模第一原理計算がより一般化しても、実験観測による現象解明を補完する手法としての原子モデリングの重要性は失われないと予想され、本論文で示したような高度な原子モデリング手法をさらに発展させる必要があると考える。

以上要するに、本研究はデバイス材料を対象として、適切なポテンシャル関数の選定および構築法を提案するとともに、それによって原子モデリングの適用範囲を大幅に拡大できることを実証したものであり、本研究の学術的意義は大きい。また、本研究で取り扱われた材料は工業的にも重要なものであり、応用面への貢献度も高い研究成果である。

よって本論文は博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる。