20a-C9-8

多結晶 Si の弾性的性質～古典分子動力学シミュレーション～

Classical Molecular Dynamics Simulations on Elastic Properties of Polycrystalline Si

富士通研究所 [1]，信越化学工業 [2]　○高橋 憲彦 [1]，金田 千穂子 [1]，中西 鉄雄 [2]

Fujitsu Laboratories Ltd. [1], Shin-Etsu Chemical Co.,Ltd. [2]

°Norihiko Takahashi[1], Chioko Kaneta[1], Tetsuo Nakanishi[2]

E-mail: n.taka@jp.fujitsu.com

多結晶 Si は、Li イオン電池の Si 系負極材への適用が検討されているほか、太陽電池や薄膜トランジスタなどにも用いられており、その構造や弾性的性質などを理解することは材料設計上重要である。今回我々は、多結晶 Si の弾性的性質における粒界の効果について特に着目し、古典分子動力学法を用いて調べた。

シミュレーションは SCIGRESS MD-ME[1] を用いて行ない、原子間ポテンシャルは Tersoff 型 [2] を採用した。多結晶 Si のモデルとして、立方体状の微結晶の集まりから構成される構造を作成し、この初期構造から、分子動力学シミュレーションにより安定構造を決定した。これにより、特に微結晶粒界の原子配置が安定化する。

得られた安定構造の他、比較のために結晶 Si とアモルファス Si に対しても体積弾性率を求め、これらを実験値と比較した。結果を表 1 に示す。我々の計算から得られた結晶 Si の体積弾性率は実験値を非常によく再現している。多結晶 Si の弾性的性質は微粒子のサイズ、粒界の構造などにも依存すると考えられ、今後、その依存性についても計算が必要であるが、今回用いた多結晶 Si のモデルでは、体積弾性率は結晶の値の約 1/2 程度の大きさである。このモデルについて微結晶粒界付近の原子配置を解析した結果、ここには、通常の 4 配位の Si 以外に、3 および 5 配位の Si が集中して存在していることが分かった。また、系の体積を等方的に 2%膨張させて、構造緩和を行なった際の各原子の変位量を解析した結果、図 1 に示したように、微結晶内部の原子と比較して粒界付近の原子の変位量が大きく、小さい体積弾性率の原因になっていることが分かった。このことは、例えば、Li イオン電池の Si 系負極材において、Li 原子の Si 微結晶への侵入により結晶部分が膨張した場合に、粒界部分がその膨張を吸収し、負極材全体の体積変化を吸収できることを示唆している。

表1　体積弾性率　(単位：GPa)

	本計算	実験値
結晶	97	99 [3]
多結晶	52	
アモルファス	87	60 [4]

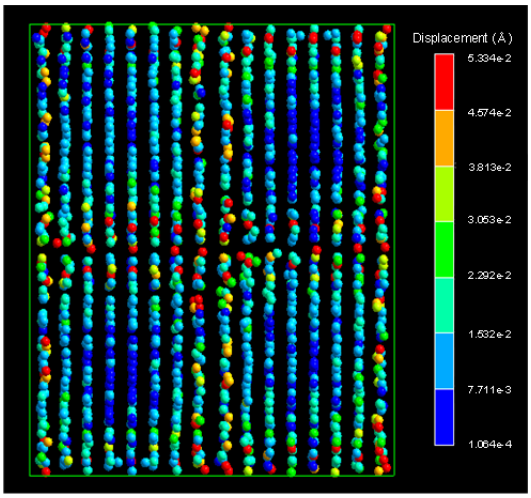

図 1　体積を等方的に 2%膨張させて構造緩和を行なった時の各原子の変位

[1] MATERIALS EXPLORER (Fujitsu, 2008) ; SCIGRESS MD-ME (Fujitsu, 2010), http://jp.fujitsu.com/solutions/hpc/app/scigress/.

[2] J. Tersoff, Phys. Rev. B **39**, 5566 (1989).

[3] G. Simmons et al., Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A Handbook (MIT, Cambridge, MA, 1971).

[4] F. Jansen, in Properties of amorphous silicon, INSPEC, London, pp. 471 (1988).

© 2013 年　応用物理学会