

## 金属ナノ粒子焼結挙動：分子動力学的研究

### Sintering behavior of Metal Nanoparticles: Molecular Dynamics Study

九大院工<sup>1</sup> ○松原 典恵<sup>1</sup>, 宗藤 伸治<sup>1</sup>, 古君 修<sup>1</sup>

Kyushu Univ.<sup>1</sup>, ○Norie Matsubara<sup>1</sup>, Shinji Munetoh<sup>1</sup>, Osamu Furukimi<sup>1</sup>

E-mail: [te208112@gmail.com](mailto:te208112@gmail.com)

#### 1. 緒言

SiC パワー半導体モジュールで使用される高温実装用接合候補材料の中で、ナノ粒子を用いた接合材料は、低温接合性と高耐熱性を両立させることが可能な材料である。ナノ粒子の接合挙動は、TEM を用いた in-situ 観察や、原子レベル計算を用いたシミュレーション解析<sup>1)</sup>により解明されつつあるが、ナノ粒子の焼結工程を積極的に制御するために必要な条件の探索は十分に行われていない。そこで本報では、原子レベルでの解析が可能な分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、加熱温度が金属ナノ粒子の焼結挙動に与える影響を調査したので報告する。

#### 2. 計算方法

融点以下の温度で加熱した場合の Fe ナノ粒子の焼結挙動を調べるために、原子間相互作用力に FS ポテンシャルを用いた MD シミュレーションを実施した。まず、Z 軸方向に対して(001)面をもつ bcc 構造の原子集団から、直径 40 Å の二つの球を切り出し、両球の中心間距離が 44 Å となるよう配置し、静的構造緩和を行った。総原子数は 5654 個であり、約 6 Å の隙間が 2 つの球間にある。次に、セル全体が 2000K もしくは 1500K になるように Langevin 方程式を用いて制御した。なお、X, Y, Z 軸に周期的境界条件を用いた。

#### 3. 結果および考察

2000K で保持した場合、加熱後すぐに表面の数層が bcc 構造からアモルファス状の構造に変化した。それ以外の原子は bcc 構造を保っていた。そ

の後、2 つの球間にアモルファス状のネッキングが形成された。このネッキングは時間が経つにつれて固相成長し、bcc 構造に再配列した (Fig.1)。一方、1500K で保持した場合、球全体の面方位が回転しつつ両球間距離が縮み、bcc 構造を保ったままネッキングが発生した。Fig.2 に示すように、2ns 後には(001)面をもつ焼結した 2 粒子が得られた。詳細は当日に報告する。

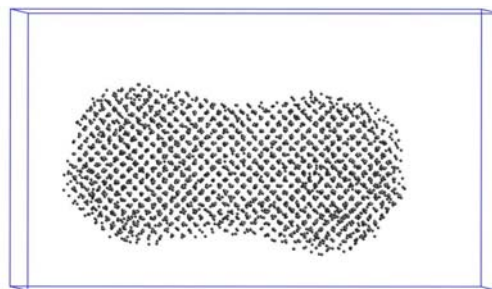


Fig.1 Snapshot of atomic configurations at 2000K obtained by MD simulations.

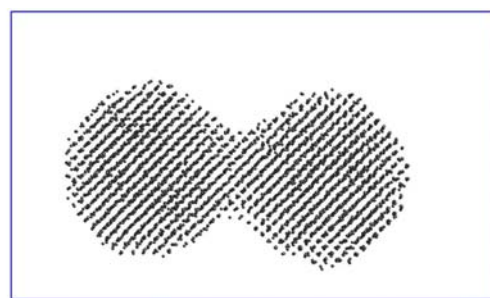


Fig.2 Snapshot of atomic configurations at 1500K obtained by MD simulations.

#### 4. 参考文献

- 1) PAN Heng, *et al.*: Trans ASME J Heat Transf. 130 (2008) 092404.