分子動力学法による SiO_2 基板上の MgO 結晶成長シミュレーション

Growth Simulation of MgO Crystal on SiO_2 Substrate by Molecular Dynamics Method

°川岸 俊介 [1], 桑原 卓哉 [1], 許 競翔 [1], 西松 毅 [1], 樋口 祐次 [1], 尾澤 伸樹 [2], 久保百司 [1]

(1. 東北大金研, 2. 東北大院工)

°Shunsuke Kawagishi[1], Takuya Kuwahara[1], Jingxiang Xu[1], Takeshi Nishimatsu[1], Yuji Higuchi[1], Nobuki Ozawa[2], Momoji Kubo[1] (1. Institute for Materials Research, Tohoku Univ. , 2. Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.)

Email: shunsuke.kawagishi@imr.tohoku.ac.jp

プラズマディスプレイパネルなどの電極保護膜として使われている MgO は 2 次電子放出利得が大きく、消費電力の低下に大きな役割を果たしており、現在電極保護膜としての需要が非常に高い。MgO 薄膜の二次電子放出が、結晶方向・表面形状・表面組成に依存することが分かっており、表面・界面の原子レベルでの設計が求められているが、実験では原子レベルでの結晶成長過程を観察することは困難である。そこで、本研究では、MgO の結晶成長過程を原子レベルで解明するため、SiO_2 基板上における MgO の結晶成長シミュレーションを分子動力学法を用いて行った。

本研究では分子動力学計算プログラム NEW-RYUDO を用いた。Fig.1 に計算モデルを示す。基板は SiO_2(111)面を使用し、基板温度を 1000 K に保持しながら、基板上に 1.6 ps 毎に MgO 分子を速度 1.5 km/s で連続的に照射した。Fig.2 に MgO 結晶成長シミュレーションの結果を示す。Fig.2 より、0.4 ns では、MgO(111)と(001)面の結晶が成長し始める様子を確認した(Fig.2(a))。6.4 ns では、0.4 ns で形成された MgO 結晶が成長していることが確認され、成長した MgO 薄膜上に(a)とは別の(111)面の結晶が成長していることが分かった(Fig.2(b))。同時に MgO 薄膜に形成された結晶粒界の様子が確認され、成長した一つ一つの結晶粒の様子を原子レベルで観察することができた。結果及び考察の詳細は当日発表する。

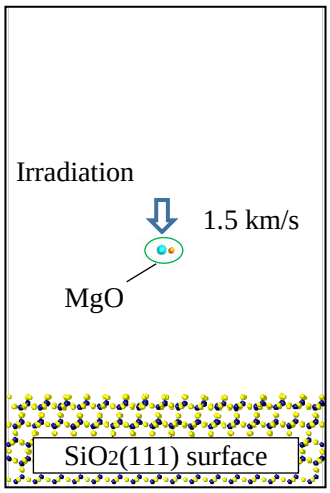

Fig.1 Calculation model.

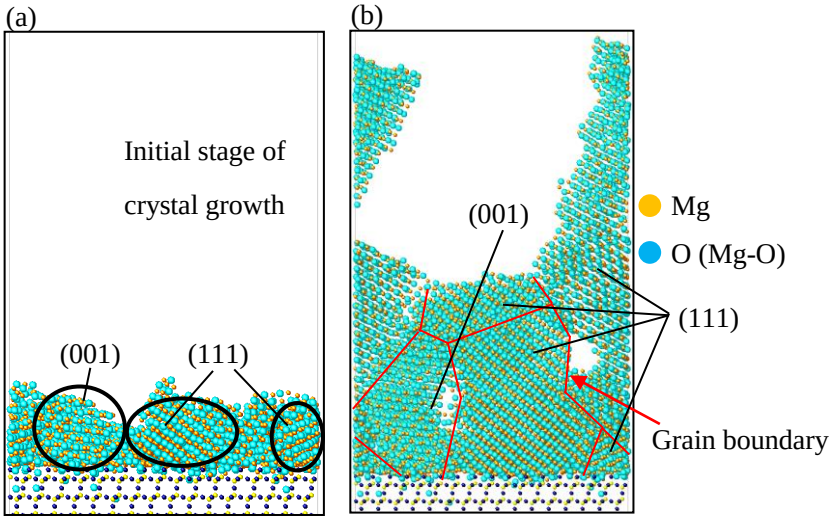

Fig.2 Cross-sectional snapshots of crystal growth process at (a) 0.4 ns and (b) 6.4 ns.

© 2015年 応用物理学会