

酸化物-金属界面結合予測ソフト : InterChemBond

Interface Bonding Prediction System: InterChemBond

○吉武 道子¹ (1. 物材機構)

○Michiko Yoshitake¹ (1.National Institute for Materials Science)

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

金属酸化物の結晶構造を見ると、多くの金属酸化物は、酸素が六方細密充填されている面（酸素原子のみから成る、O面とする）と構成金属元素のみから成る面（A面とする）

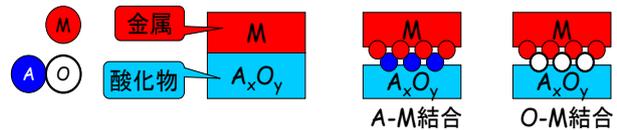


図 1. 酸化物と金属の界面の結合の種類の模式図

から構成されているとみなすことができる。このような酸化物と金属の界面では、金属に接する面が、酸化物のO面かA面のどちらと接するのが熱力学的に安定かが決まっているはずである(図1参照)。また、どちらの原子面と接するかによって、金属の酸化物に対する濡れ性・密着性や電子デバイスにおけるショットキーバリア高さが大きな影響を受ける。我々は、このような界面の結合の種類について、酸化物をアルミナとした場合の実験を行い、金属の種類によって界面結合を作り分けられることを示した[1]。

実験により得た界面結合の結果と熱力学を取り入れた第一原理計算の結果[2]を基に、様々な金属に適用可能な界面結合の予測法を開発した[3]。この予測方法による予測結果を、実験から界面結合が推測できる、Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Nb, Ag について比較したところ、非常によい一致が得られた[3]。

今回、誰でも簡単に予測結果が得られるように、ウェブ上で動作するプログラムとして公開したので報告する。物質・材料研究機構のデータベース MatNavi, <http://mits.nims.go.jp/> のアプリケーションシステムの中の「界面結合予測システム」<http://interchembond.nims.go.jp/> をクリックすると、システムの説明画面に続いて界面を構成する金属と酸化物を周期表からクリックして選ぶ画面が現れる。金属と酸化物を選んだら calculate をクリックすることで界面結合の予測結果が図で示される(図2)。

図 2. 界面結合予測システムの予測結果表示例図

[1] M. Yoshitake, et. al.: Surf. Sci. 604 (2010) 2150.

[2] W. Zhang, J.R. Smith, A.G. Evans, Acta Mater. 50 (2002) 3803.

[3] M. Yoshitake, S. Yagyu, T. Chikyow: J. Vac. Sci. Technol. A 32 (2014) 021102.