

接合界面における原子の動的挙動の解明

大阪大学 接合科学研究所 巽 裕章

目的

Si_3N_4 セラミック / TiN間における優れた接合性の要因を解明する

内容

Si_3N_4 セラミックとTiN間の接合に伴うエネルギー変化（剥離仕事）ならびに電荷密度差を第一原理計算によって計算する。

結果

Si_3N_4 セラミックとTiN界面の優れた接合性は、Ti原子が介在することによる大きな剥離仕事として説明できた。また、Ti-N原子間のイオン結合と共有結合が複合的に寄与した化学結合状態が貢献していることがわかった。

利用した計算機 ベクトルノード群

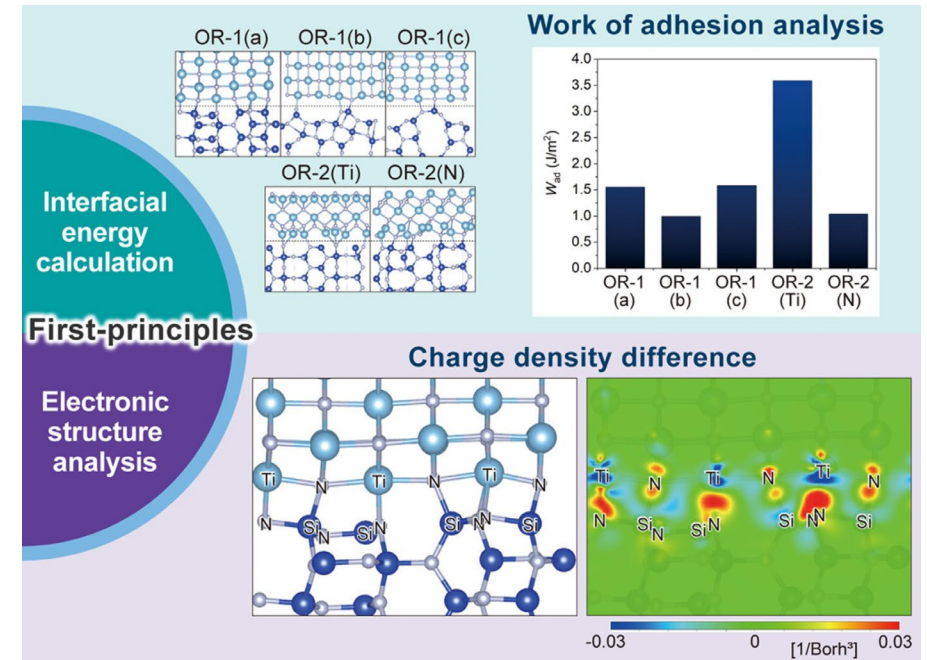


図 $\text{Si}_3\text{N}_4/\text{TiN}$ 界面モデルの剥離仕事と電荷密度差の解析結果