

原子スケール有限要素法による  
破壊力学

上級准教授 西館 陽平

## 原子スケール構造解析の新たな道

## 概要

## ○有限要素解析の原子構造力学での疑問点

有限要素法 (FEM) は既に様々な構造の破壊条件の解析に応用され、大きな成功を収めている。FEMは連続体に対して適用される巨視的なモデル手法である一方、ナノスケールの半導体や金属材料では、原子が離散的であるため、適用できない。原子の挙動を計算し応力などの構造力学パラメータを求める方法として、現在は分子動力学法 (MD) が主流であるが、系の解を求める計算には時間がかかり効率的ではない。

## ○原子構造のための有限要素解析

そこで本研究では、原子スケール有限要素法 (Atomic-FEM) と、Moving-Least-Squares や Kriging などの補間法を組み合わせ、原子スケールの有限要素解析を破壊力学に適用する。

現在までに GaAs などの半導体複層構造に対して原子スケールで歪分布を求めると、厚さが数十ナノメートル以下になると急激に連続体と異なる結果が出るがわかっている。

## 実用化の可能性

○原子スケール解析から歪を求めれば、エネルギー解放率などの破壊力学的パラメータを求めることが出来る。原子スケール特有の効果は材料によって違うことが予想されるため、開発するデバイスの材料と構造をモデリングして、致命的な条件を予測することが可能になる。

○例として100万原子からなる構造の数ミリ秒の挙動を調べるのに、MDでは時刻ごとの解を逐次計算するため、一般的なPCでは現実的でない程時間がかかるが、AFEMは一気に系の解を計算するため、1日で終わる。

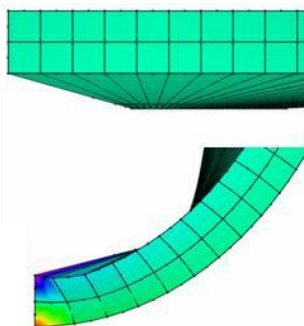
## UBICからのメッセージ

○破壊力学は破壊現象を定量的に取り扱う工学的手法の一つです。今までは原子レベルの破壊現象を解析する有効な構造解析手法に欠けていました。

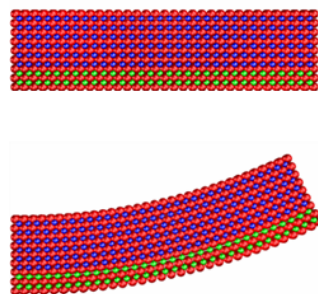
西館准教授は原子スケール有限要素法をベースとした方法でこれに挑戦しています。

## 研究概要図

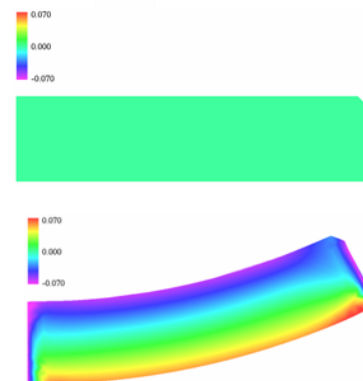
FEM (連続体) による応力分布解析ではブロックの集まりで全体を表し、合成した結果から全体の応力を求める。



Atomic-FEM (原子モデル) による応力分布解析では、原子同士の相互作用を計算し、全体の応力を求める。



原子レベルの変形



応力分布の解析結果

GaAs-InAs複層構造の長手方向歪分布解析例