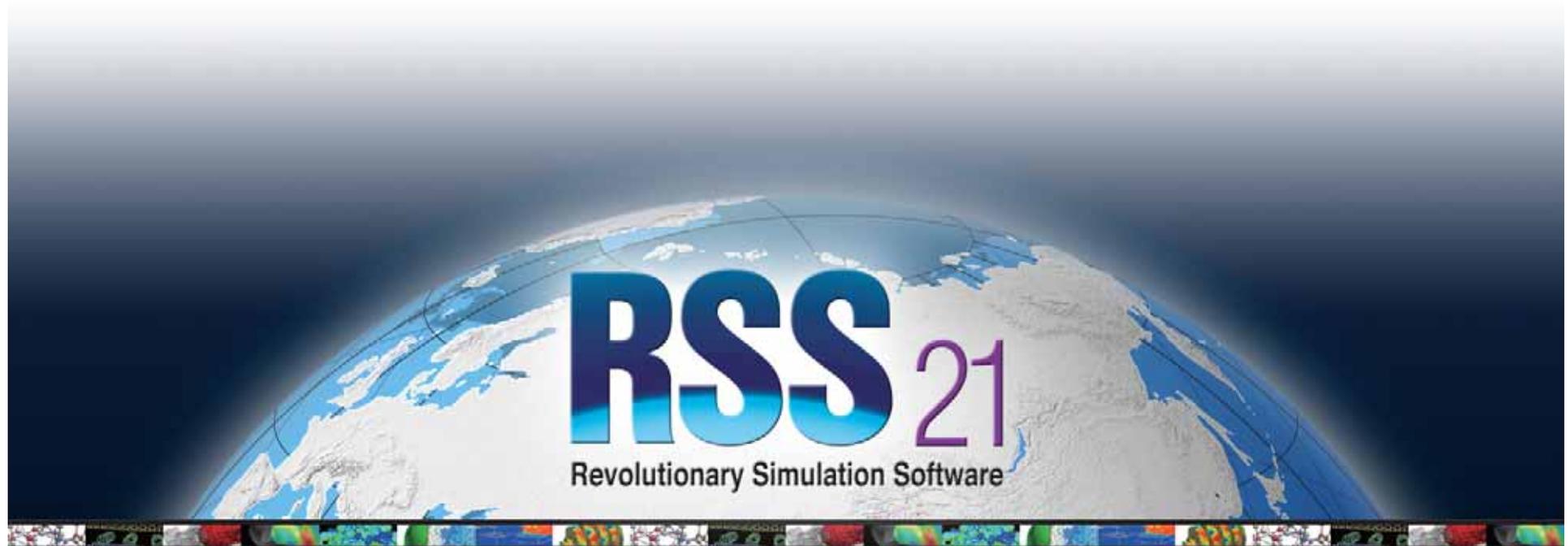


# マルチスケール解析手法の開発

伊藤 信(アドバンスソフト株式会社)

協力: 高木祥光(産学連携研究員)



# 何に関するマルチスケールか？

- 原子スケールの**時間的**マルチスケール計算法  
= 運動学的モンテカルロ法  
(kinetic Monte Carlo method, **KMC法**)

A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, J. Comp. Phys. 17 (1975) 10.

予め原子構造を決めて、原子を格子位置に限定すれば、**時間的に数桁違う現象を同時に扱う**ことができる。

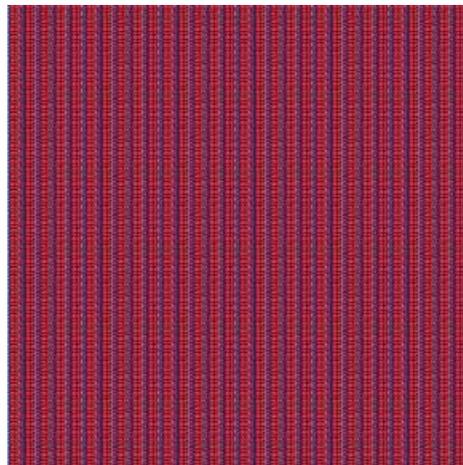
例) 半導体のエピタキシャル成長過程

表面原子(adatom)の熱拡散 =  $10^{-5}$ 秒のオーダー

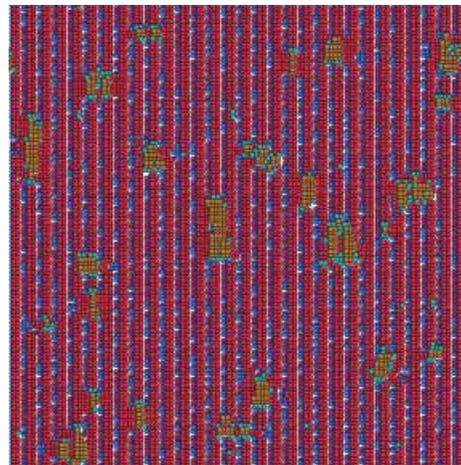
分子の吸着と蒸発の過程 =  $10^{-3}$ 秒 ~  $10^{-1}$ 秒

(ただし、水素分子以外)

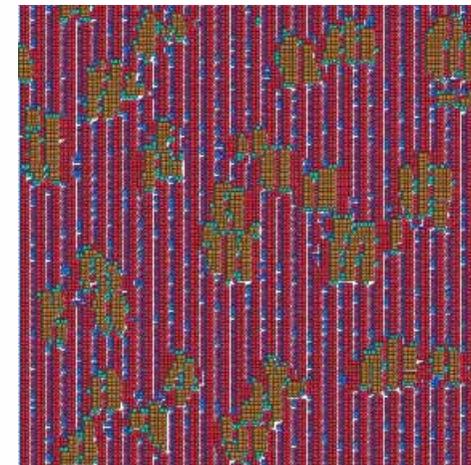
# KMC法によるシミュレーションの例



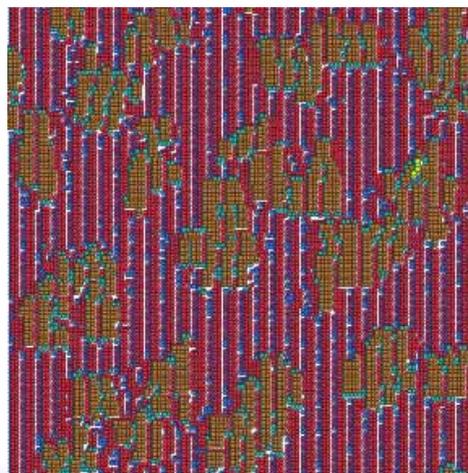
初期状態



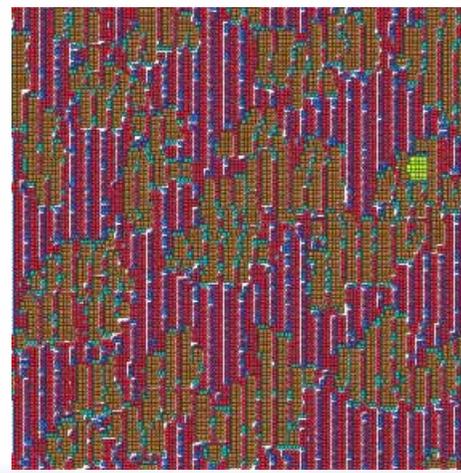
15秒後



30秒後



45秒後



60秒後

青: Ga 原子  
 赤: 基板のAs原子  
 他: 一層上の原子層のAs原子

M.Itoh,  
 Prog.Surf.Sci. 66, 53 (2001).

## ヘテロエピタキシャル過程の再現は可能か？

- ホモエピタキシャル成長シミュレーションでは、Ga原子が過飽和状態にあるという実験事実を再現
- InAs/GaAs(001) では、In と Ga が混合 (< 1.66ML)
- Ge/Si(001) では Si と Ge が混合 (< 3ML)
- 元素混合は、量子ドット発生の前段階に共通する性質

P.B.Joyce et al., PRB 58, R15981 (1998).

# 量子ドットの特徴

Ge/Si(001) と InAs/GaAs(001) に共通する特徴

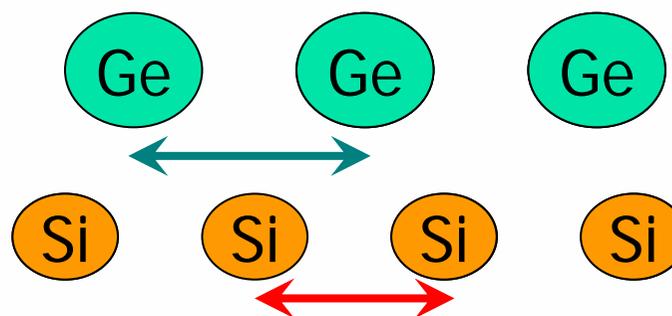
- Stranski-Krastanov 型成長過程  
原子層3層程度の2次元成長  
3次元成長
- 元素混合(量子ドット形成前に発生)  
(Ge + Si) / Si(001)  
(In + Ga)As / GaAs(001)
- 鉛直方向に沿った組成変化  
(上に行くほどSiやGaの比率が低下)

**静的計算では再現不可能！**

I. Kegel et al. PRL 85, 1694 (2000).

# Ge/Si(001) 量子ドット

Ge/Si(001) 量子ドットのAFM像



格子不整合(4%)による歪みの緩和  
 量子ドットの発生原因

→ メゾスケール

J.Tersoff et al. PRL 76, 1675(1996).

## 空間的なマルチスケールへの拡張

- 原子が格子位置からずれた時にも、相互作用エネルギーが計算可能な**原子間ポテンシャル**が必要
- 連続体モデルとの接続  
メゾスケールへの拡張
- 計算手法の有効性の検証  
量子ドット形成過程のシミュレーション

# Tersoff 型ポテンシャル

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad V_{ij} = f_C(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})]; \quad (1a)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij} \exp(-\lambda_{ij} r_{ij}), \quad f_A(r_{ij}) = -B_{ij} \exp(-\mu_{ij} r_{ij}); \quad (1b)$$

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos[\pi(r_{ij} - R_{ij}) / (S_{ij} - R_{ij})], & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}; \quad (1c)$$

$$b_{ij} = \chi_{ij} (1 + \beta_i^{n_i} \zeta_{ij}^{n_i})^{-1/2n_i}, \quad \zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}), \quad g(\theta_{ijk}) = 1 + c_i^2/d_i^2 - c_i^2/[d_i^2 + (h_i - \cos\theta_{ijk})^2]; \quad (1d)$$

$$\lambda_{ij} = (\lambda_i + \lambda_j)/2, \quad \mu_{ij} = (\mu_i + \mu_j)/2, \quad A_{ij} = (A_i A_j)^{1/2}, \quad B_{ij} = (B_i B_j)^{1/2}, \quad R_{ij} = (R_i R_j)^{1/2}, \quad S_{ij} = (S_i S_j)^{1/2}. \quad (1e)$$

斥力、引力

カットオフ関数

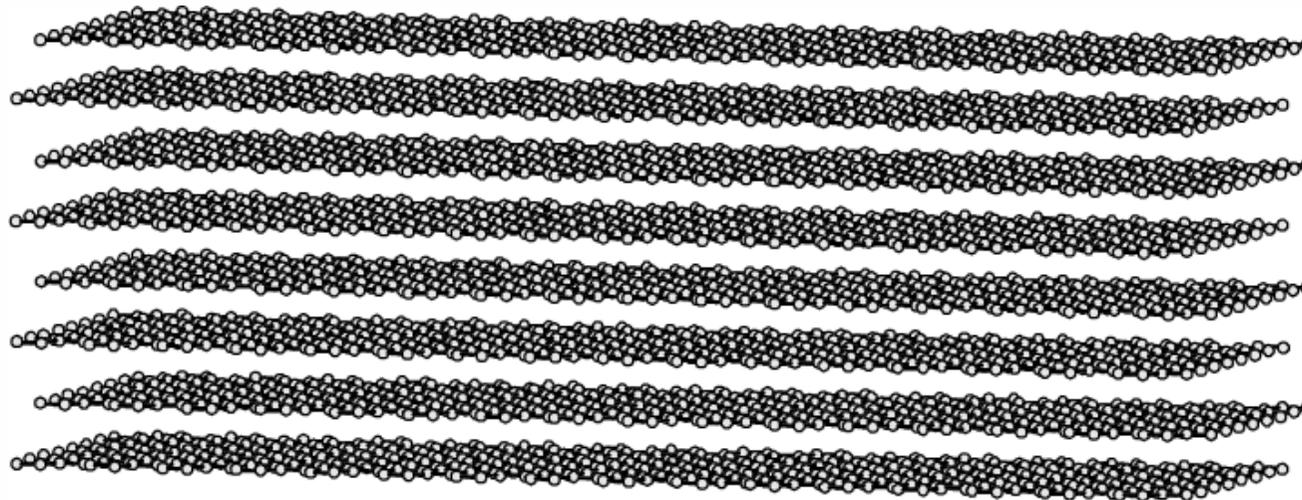
三体効果

J.Tersoff, Phys.Rev.B, vol.39, 5566 (1989).

# Tersoff 型ポテンシャルを使った計算機実験

## Graphite-nanotube 構造相転移の可能性をさぐる計算機シミュレーション

graphite から温度分布を制御することによってnanotubeを合成する方法を計算機シミュレーションから探る



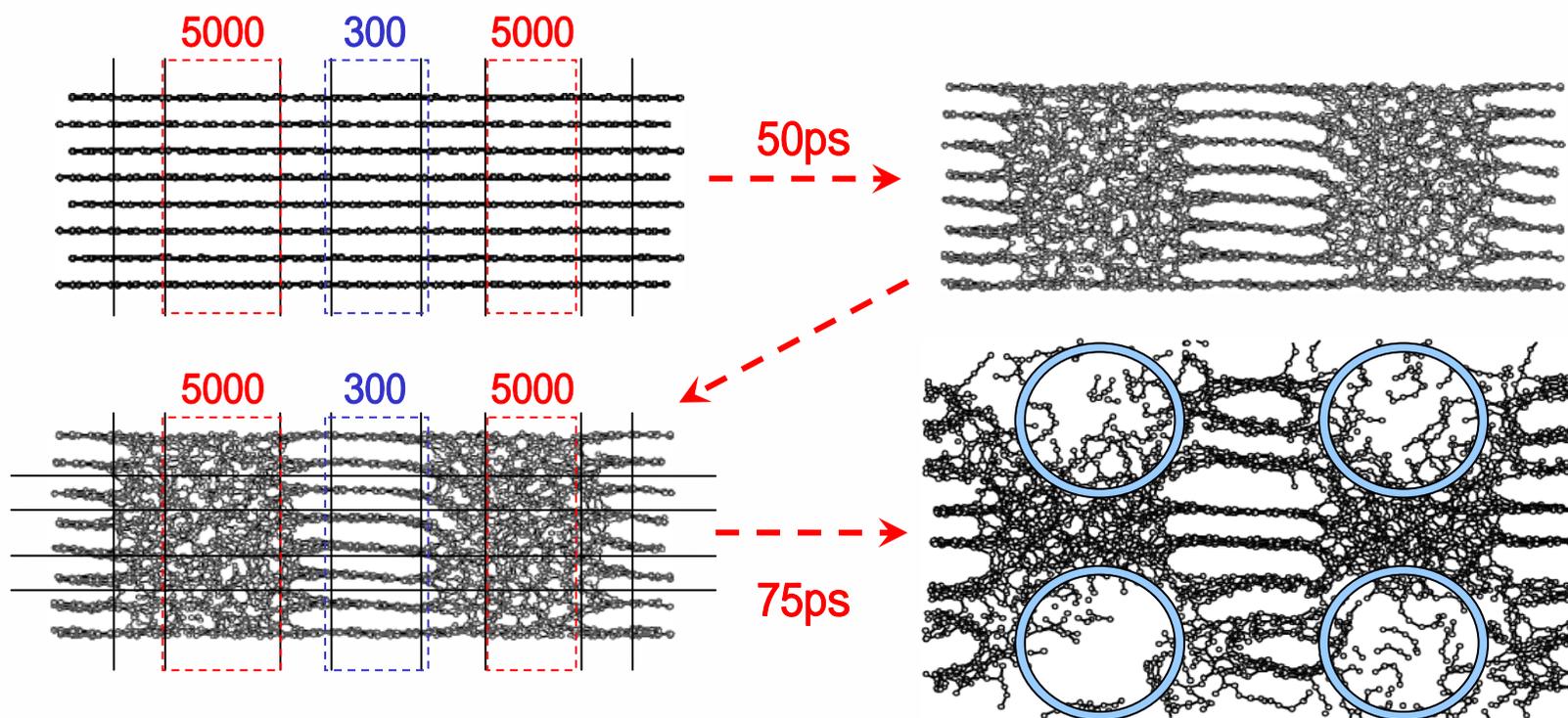
炭素原子 4096個  
面内方向には周期的境界条件  
面に垂直な方向にはグラフェンが8層積層したスラブ模型

Tersoff型ポテンシャルの改良 : J.H.Los and A. Fasolino, PRB 68, 024107 (2003).

# Tersoff 型ポテンシャルを使った計算機実験

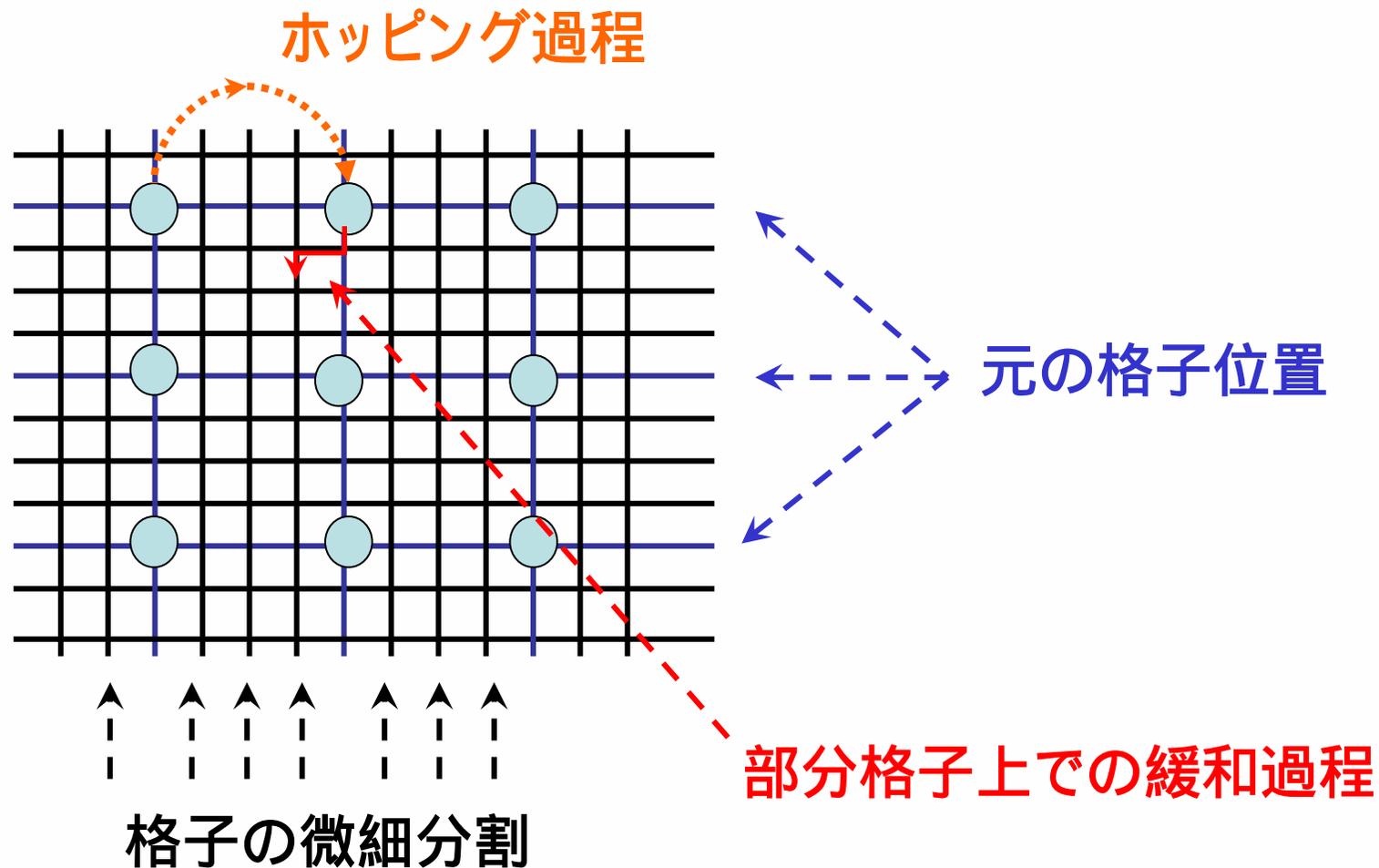
温度分布 [Kelvin]

(by 高木祥光)



カーボン・ナノチューブは出来るか？

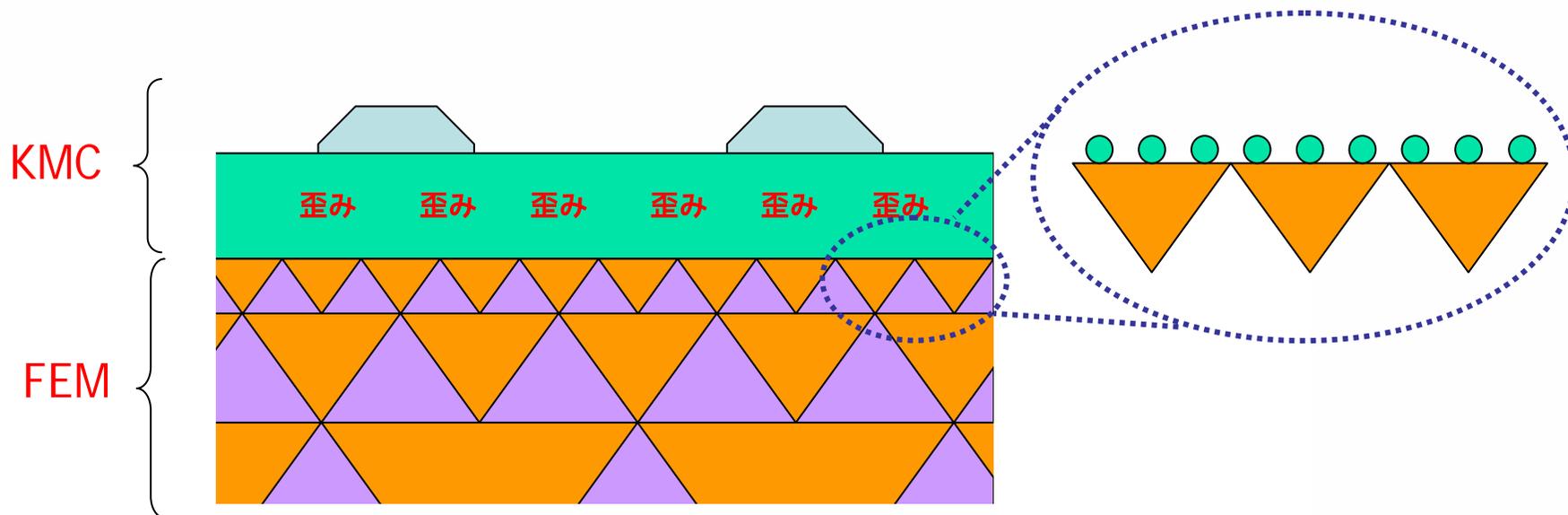
# KMC法の拡張： 格子の微細分割



単純立方格子上での微細分割： T.Kawamura and T.Natori, Surf. Sci. vol.438, 148 (1999).

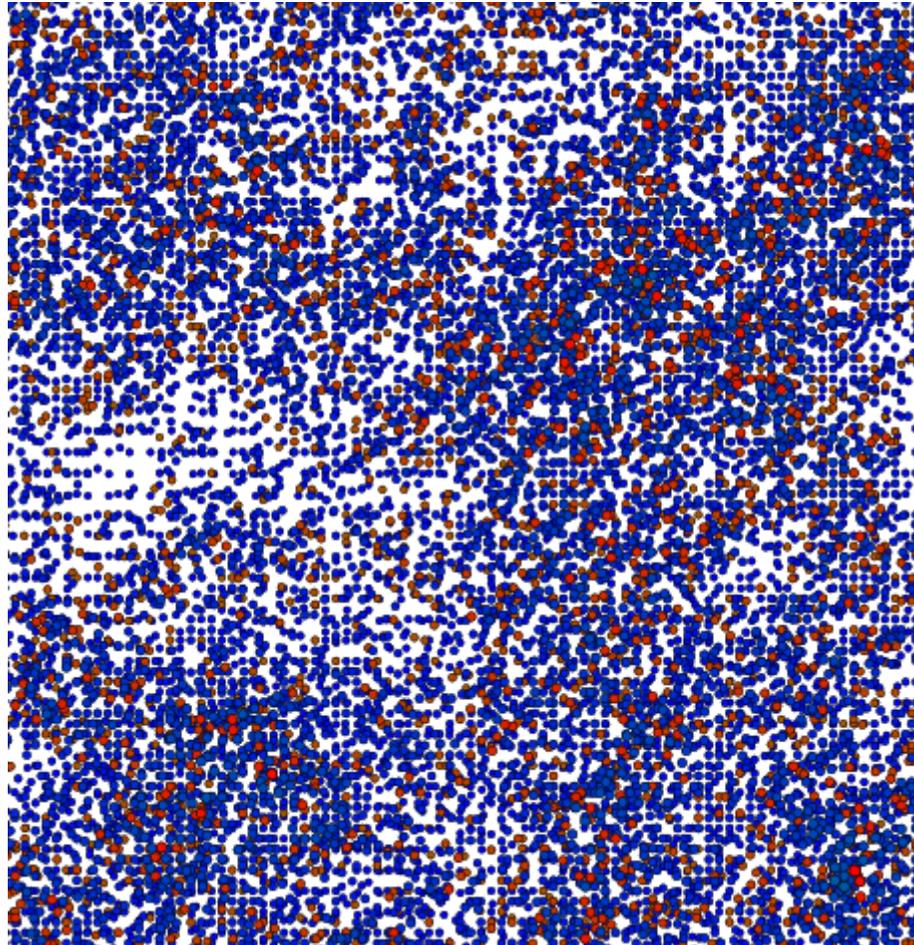
# KMC法の3次元成長過程への拡張

- 格子不整合に起因する歪みの遠方への伝達機構



MonCafe (Monte Carlo + FEM)

## MonCafeによるシミュレーション(途中経過)



青: Si  
赤: Ge

表面全体にうねりが生じたのは、表面構造を取り入れたため。  
丘の部分にGe原子が集中。

# 金属系への応用

- 有効媒質近似ポテンシャル  
(Modified Embedded Atom Method, MEAM)

$$E = \sum_i \left[ F(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{j(\neq i)} V_{ij}(R_{ij}) \right]$$

i番目とj番目の原子間距離

$$F(\bar{\rho}_i) = A E_0 \left( \bar{\rho}_i / Z_0 \right) \left( \ln(\bar{\rho}_i / Z_0) - \frac{1}{C} \right)$$

埋め込み関数

背景電子密度

配位数

凝縮エネルギー(の逆符号)

M.I.Baskes et al., Phys.Rev.B 40, 6085(1989).  
X.Yuan et al., J.Phys.:Condens. Matter 15(2003)8917.

## まとめ

---

### 手法:

- KMC法による時間的なマルチスケール解析の実現
- 結晶格子の微細分割による、空間的なマルチスケール解析への拡張

### 実証計算:

- Tersoff型ポテンシャルを使った Ge/Si(001)の計算
- MEAMポテンシャルを使った金属系への拡張