

JST新技術説明会プログラム
関西学院大学



第一原理計算による半導体・ 金属材料モデリング

理工学部情報科学科 西谷滋人

tel: 079-565-7594

e-mail: nishitani@kwansei.ac.jp

経歴



-1988	京都大学工学部金属加工学科・博士課程修了 (新宮秀夫)	準安定平衡状態図, 急凝固, スパッター
1988-1995	京都大学工学部材料学科・助手 (山口正治)	金属間化合物, 単結晶成長, レーザ照射, 薄膜作成
1991-1993	Imperial college, Oxford university(David G. Pettifor)	電子論, BOP
1995-2004	京都大学工学部材料学科(足立裕彦)	電子論, 分子動力学, 第一原理計算
2004-現在	関西学院大学工学部情報科学科・教授	第一原理計算, モデリング物理学
2009	東北大学金属材料研究所・客員教授	Si, SiGe, 格子欠陥, 凝固プロセス

期間, 所属などは厳密ではありません.



凝固プロセス

検索

[検索オプション](#)
[表示設定](#)
 ウェブ全体から検索 日本語のページを検索

[ウェブ](#) [検索ツールを表示](#)

凝固プロセス の検索結果 約 58,800 件中 1 - 10 件目 (0.30 秒)

 この結果には [凝固プロセス](#) のサーチウィキ メモが含まれています。 [メモを共有](#)
[\[PDF\] 工業的に使われている凝固プロセス](#)

 ファイルタイプ: PDF/Adobe Acrobat - [HTMLバージョン](#)

 工業的に使われている凝固プロセス. 京都大学・工・材料工学 西谷道人. ., 平成 15 年 11 月 27 日. 目次. 1 鋳造. 1. 1.1 鋳塊のマクロ組織
 2. 1.2 マクロ, ミクロ偏析. ...

ist.ksc.kwansei.ac.jp/~nishitani/Lectures/Kyoto/.../etc.pdf - [類似ページ](#)
[産総研：サステナブルマテリアル研究部門 凝固プロセス研究グループ紹介](#)

当研究グループでは、輸送機器軽量化に関わる要素技術の開発を行うことを目標にして、凝固プロセスを中心とした輸送機器軽量化に資する技術開発を行っています。具体的には、下記に示すような3つのテーマを柱とした研究開発を行っています。...

unit.aist.go.jp/mrisus/ci/group/solproc/solproc.html - [キャッシュ](#) - [類似ページ](#)
[産総研：サステナブルマテリアル研究部門 凝固プロセス研究グループ紹介](#)

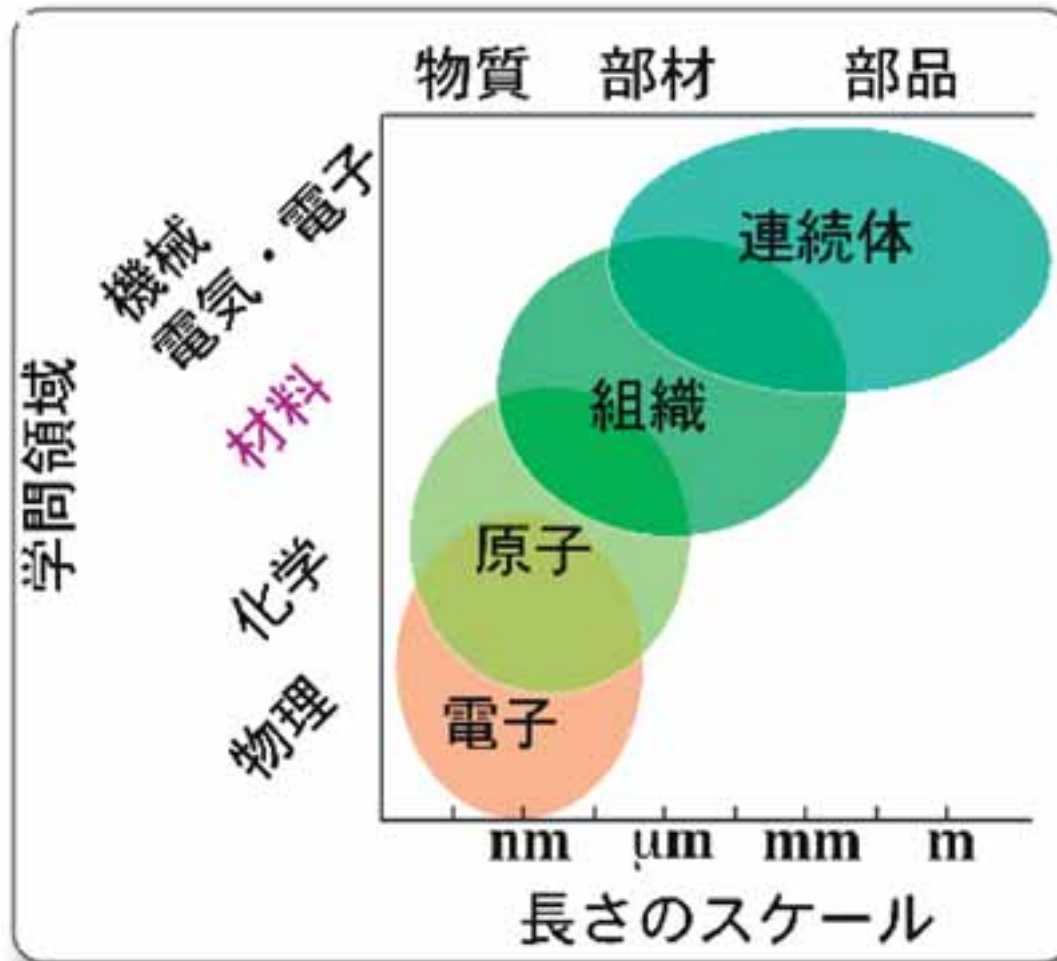
電磁振動による新しい金属材料創製プロセス 導体に直流磁場と交流電流を同時に加えることにより、発生したローレンツ力が交流電流と同じ周波数で振動します。この現象を凝固中の金属材料に適用することにより、凝固時に生成する結晶を微細化し、凝固後の...

unit.aist.go.jp/mrisus/ci/.../solproc-highlight1.html - [キャッシュ](#) - [類似ページ](#)
[高温プロセス部会 セミナー\(講習会\)「凝固プロセスからみた計算状態図...」](#)

計算機による状態図の予測は状態図理論の進化と共に飛躍的に向上しており、計算状態図を援用した数々の凝固プロセスやその凝固組織の予測が報告されるようになりました。しかし状態図プログラムを利用する上でパラメータ入力容易に行われるため、得られ...

www.ill.or.jp/Booklet/BookletDetail/Kyocerin/002108.html - [キャッシュ](#) - [類似ページ](#)

マルチスケールモデリング



プロセス制御に利用できる理論計算 従来技術問題点・新技術の特徴

- ・ 既に実用化されている
有限要素法, 分子動力学
 - ・ 経験パラメータが必要,
 - ・ 精度不足
 - ・ 信頼性が低い.
- ・ 第一原理計算による物理モデリング
 - ・ 経験パラメータが不要
 - ・ 精度が高く
 - ・ 定量的予測に基づく原理の解明.

想定される用途

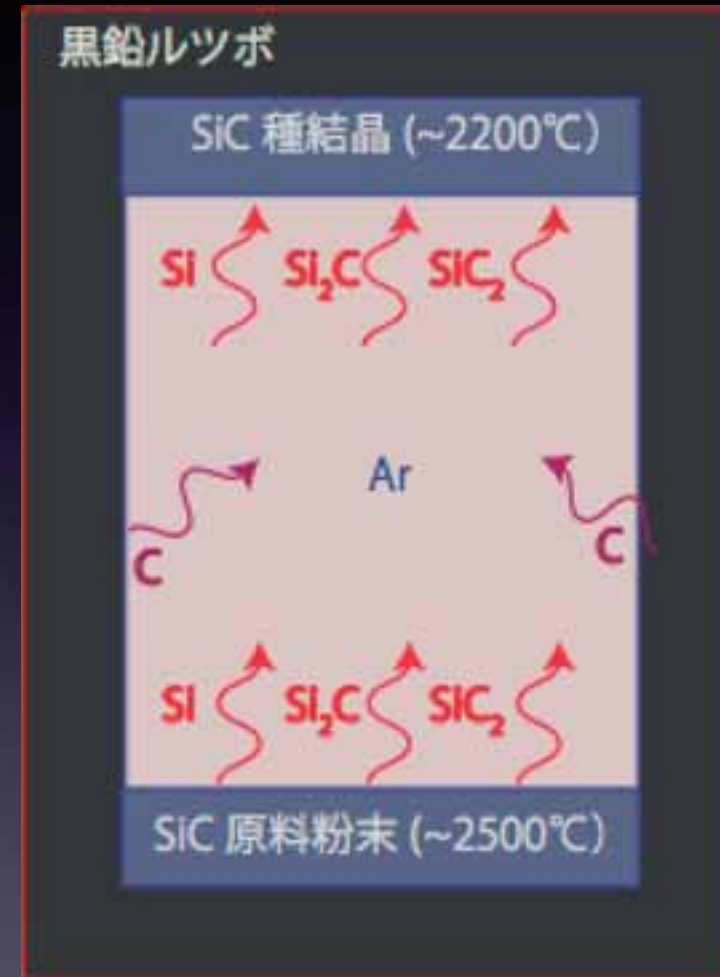
- ・ 連続したブラックボックス
 - ・ プロセス・新奇材料開発は経験則と仮説の積み木.
- ・ 第一原理計算は
 - ・ サイズが小さい
 - ・ 適切なモデリングで克服可能
- ・ ブラックボックスの中身？！
 - ・ 経験則の原理の解明.
 - ・ 仮説の検証.

outline

- 準安定平衡状態図によるSiC成長
 - 準安定溶媒エピタキシー(金子法)
- 第一原理計算による相安定性
 - 熱膨張,熱振動
- 微小析出物生成の活性化エネルギー
 - Fe系(Cu)合金,固相析出
- 化合物半導体表面の雰囲気依存性
 - ホローコア,表面平滑化

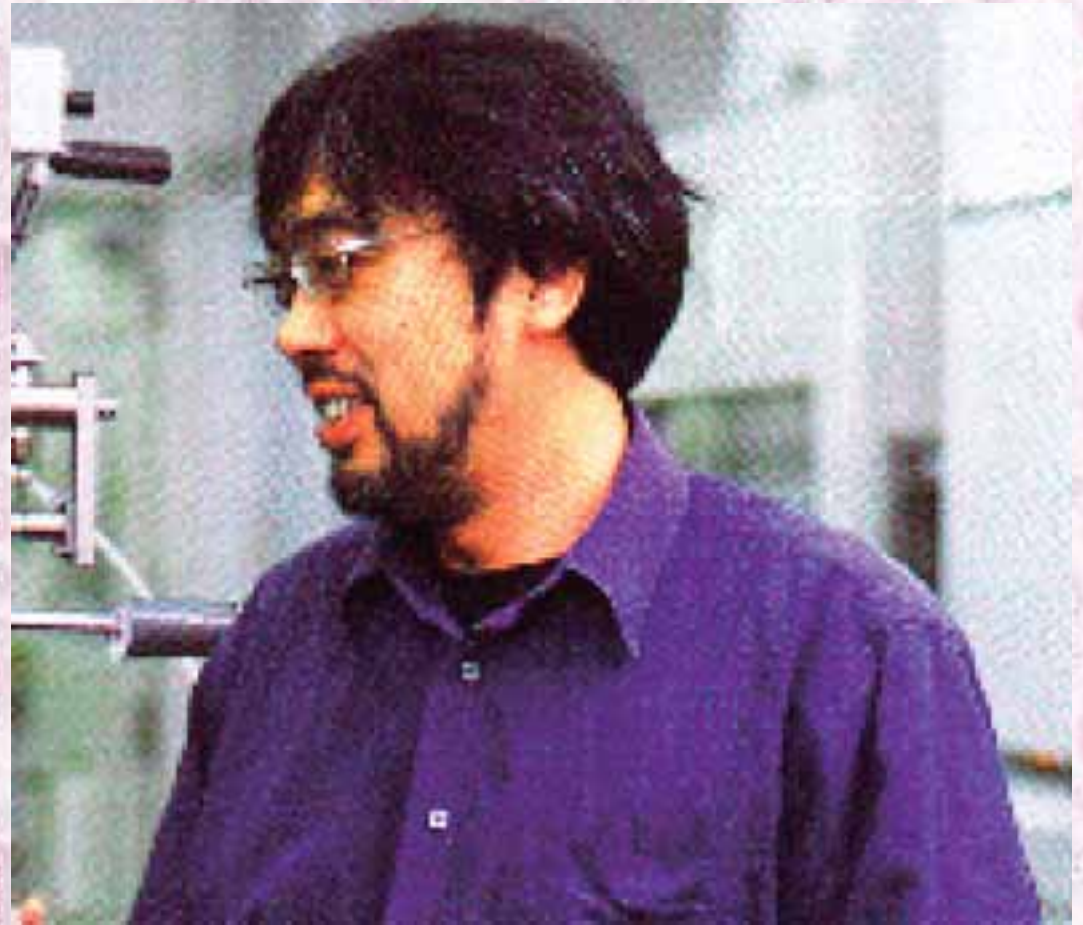
価値

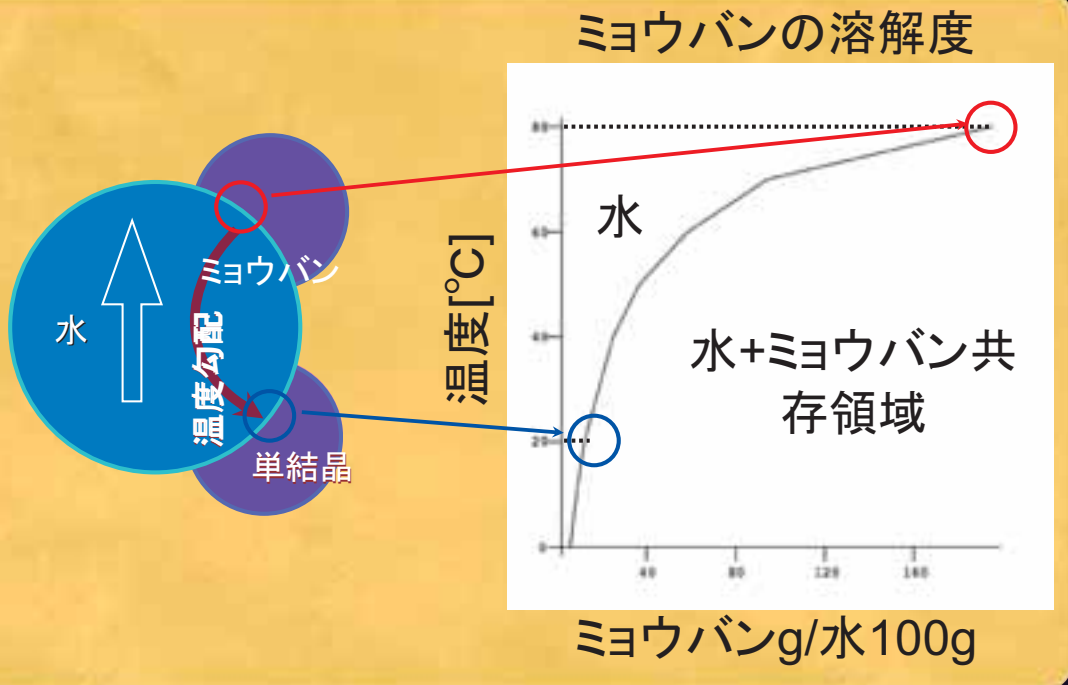
- 4インチ径低欠陥ウェーハ
- 約100万円/枚
- 電機メーカー，自動車メーカーが数100枚単位で購入.
- 原因：従来の製造法(昇華法)が複雑.



Kaneko 法

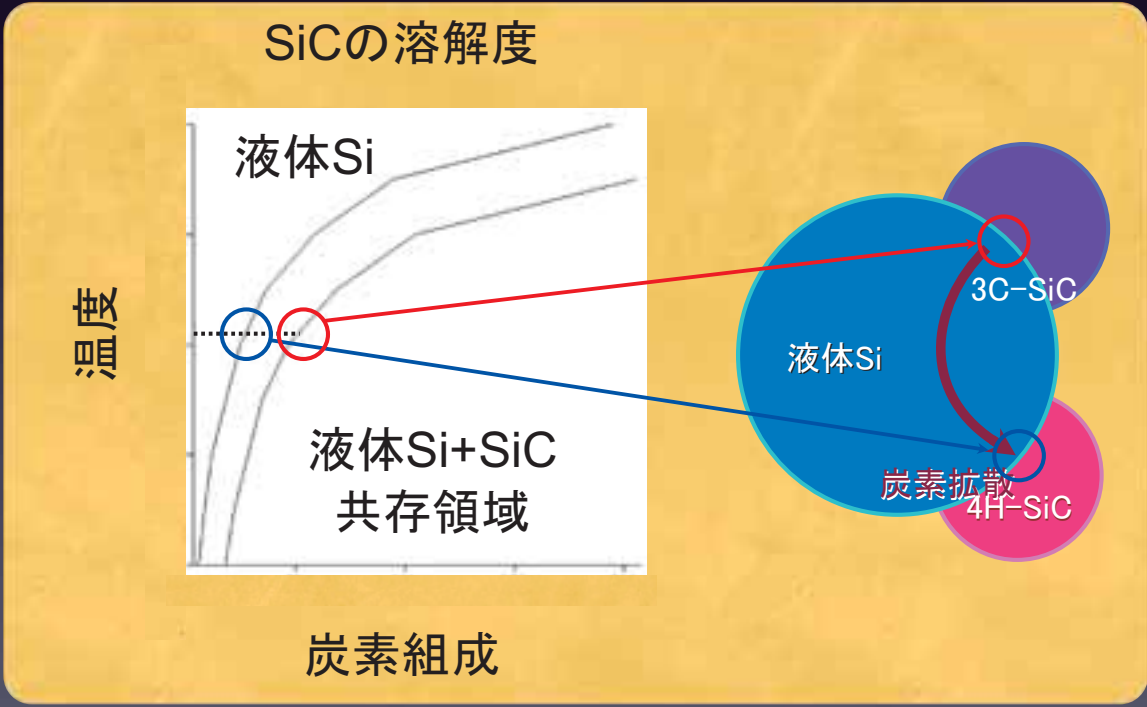
- SiCの製造法
- 気相からの昇華法
 - 従来法
 - 高コスト
- 液相から凝固
 - 新製法
 - 低コスト
 - 関学・三田発





成長駆動力
= 溶解度差

準安定平衡状態図



outline

- 準安定平衡状態図によるSiC成長
 - 準安定溶媒エピタキシー(金子法)
- 第一原理計算による相安定性
 - 熱膨張, 熱振動
- 微小析出物生成の活性化エネルギー
 - Fe系(Cu)合金, 固相析出
- 化合物半導体表面の雰囲気依存性
 - ホローコア, 表面平滑化

擬調和振動子近似

- phonon-DOSモデル

$$F(a, T) = E(a) + k_B T \int_0^\infty n(\omega) \ln\left(2 \sinh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)\right) d\omega$$

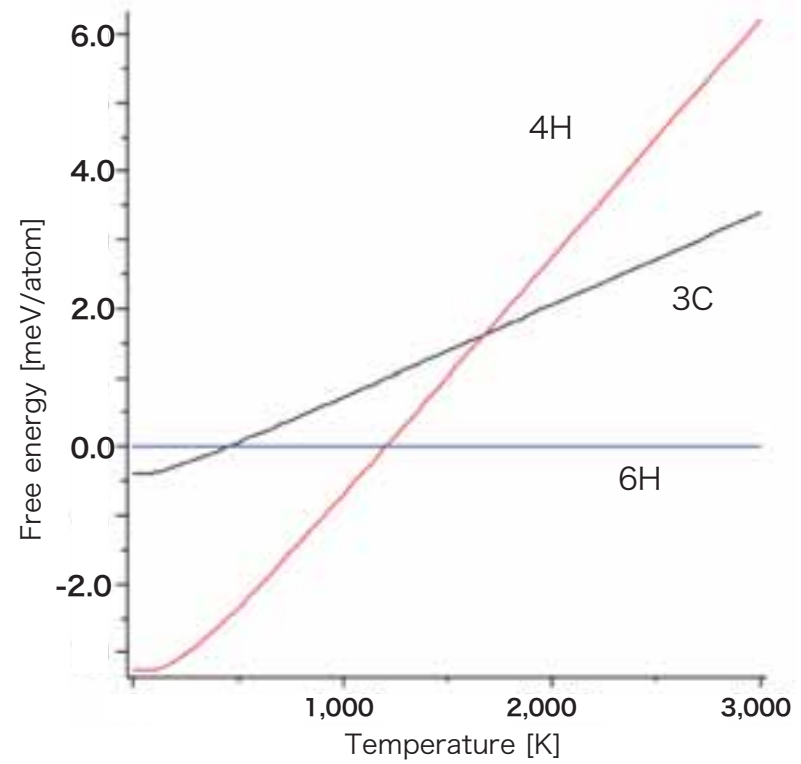
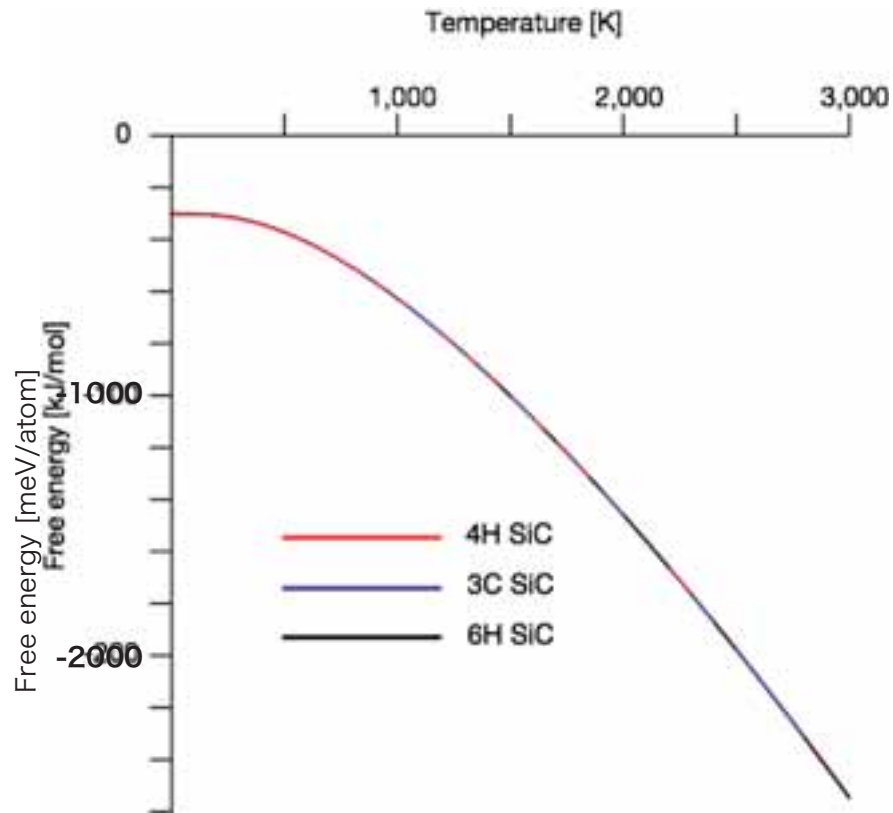
基底状態のエネルギー

phonon-DOS

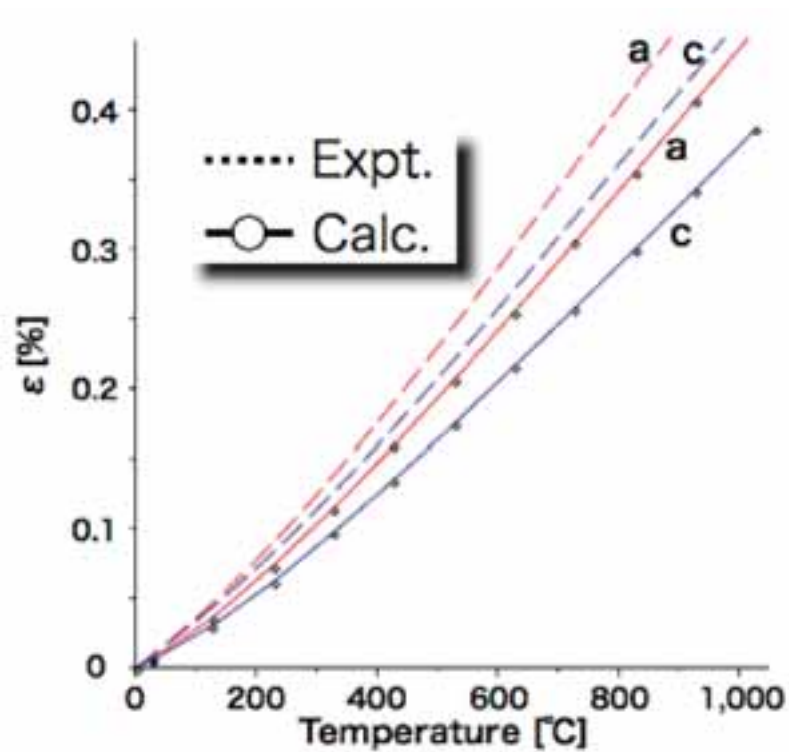
自由エネルギー関数

- 第一原理計算：VASP
- phonon計算：MedeA
Parlinski(direct method)

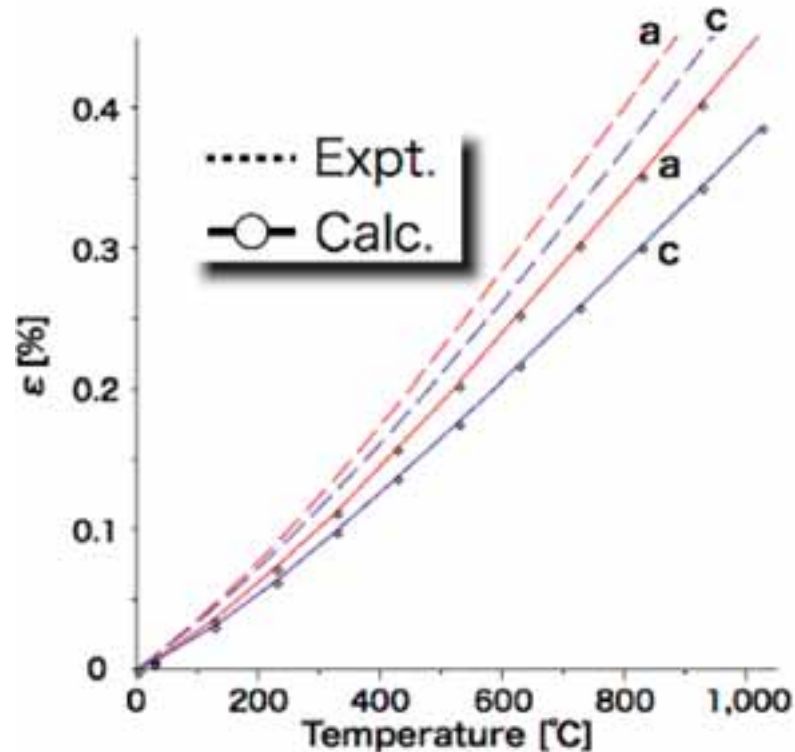
自由エネルギー



4H,6H-SiCの線形熱膨張の比較



4H



6H

outline

- 準安定平衡状態図によるSiC成長
 - 準安定溶媒エピタキシー(金子法)
- 第一原理計算による相安定性
 - 熱膨張, 熱振動
- 微小析出物生成の活性化エネルギー
 - Fe系(Cu)合金, 固相析出
- 化合物半導体表面の雰囲気依存性
 - ホローコア, 表面平滑化

藤田ジレンマ

r が小さいところでは、
欠損分が全体分を凌駕する
という矛盾をはらんでいる。

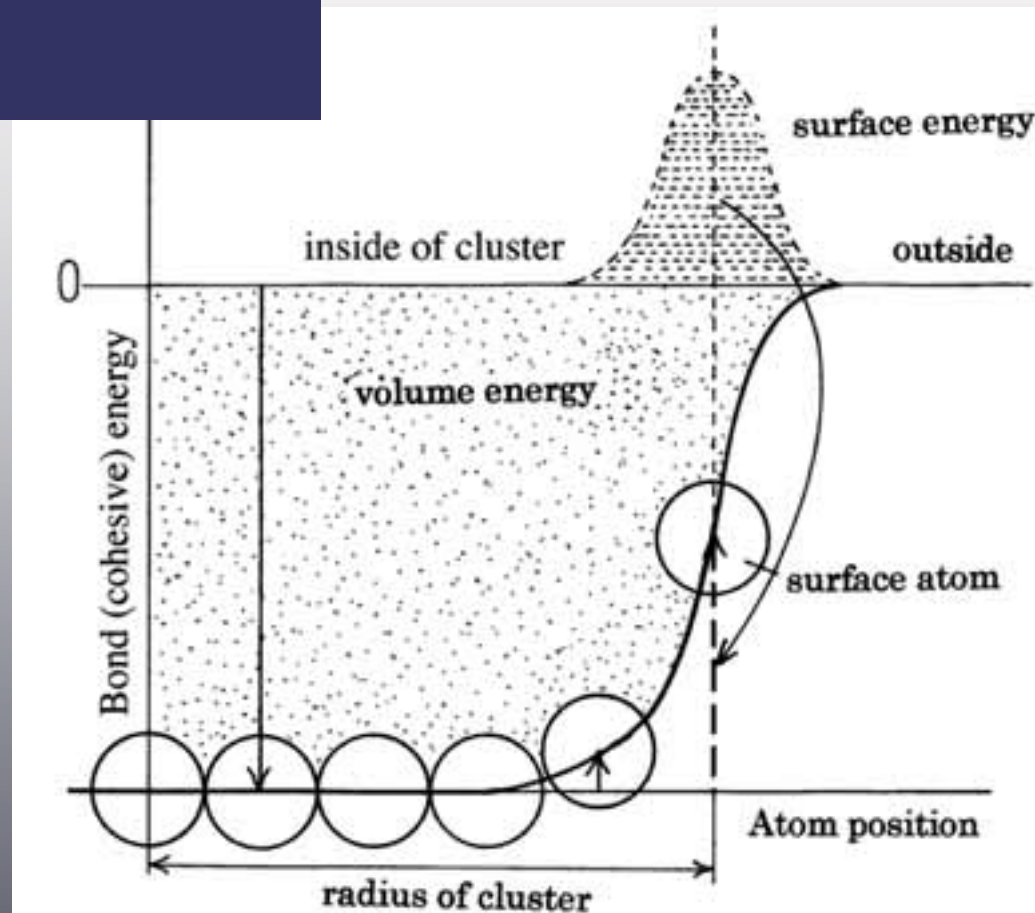
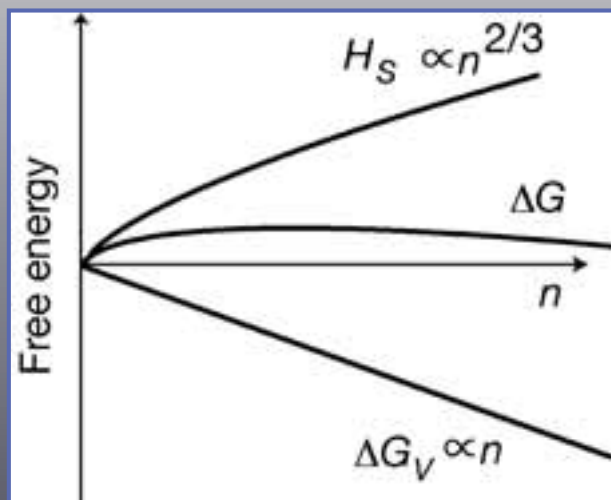
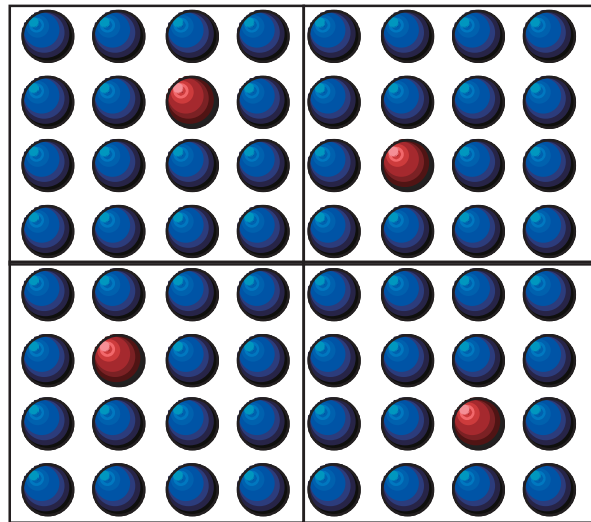
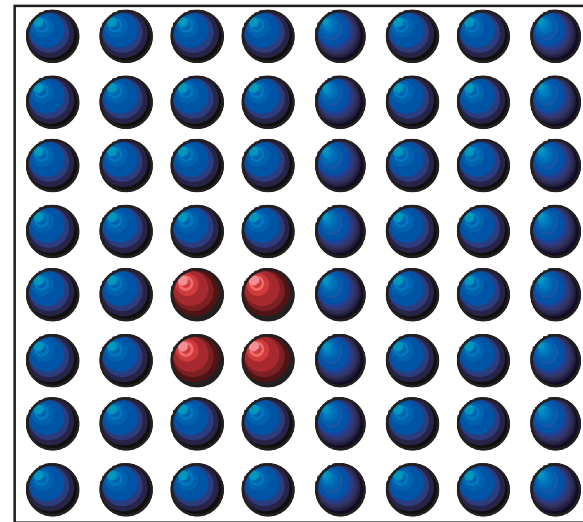


Illustration of precipitation

Initial state



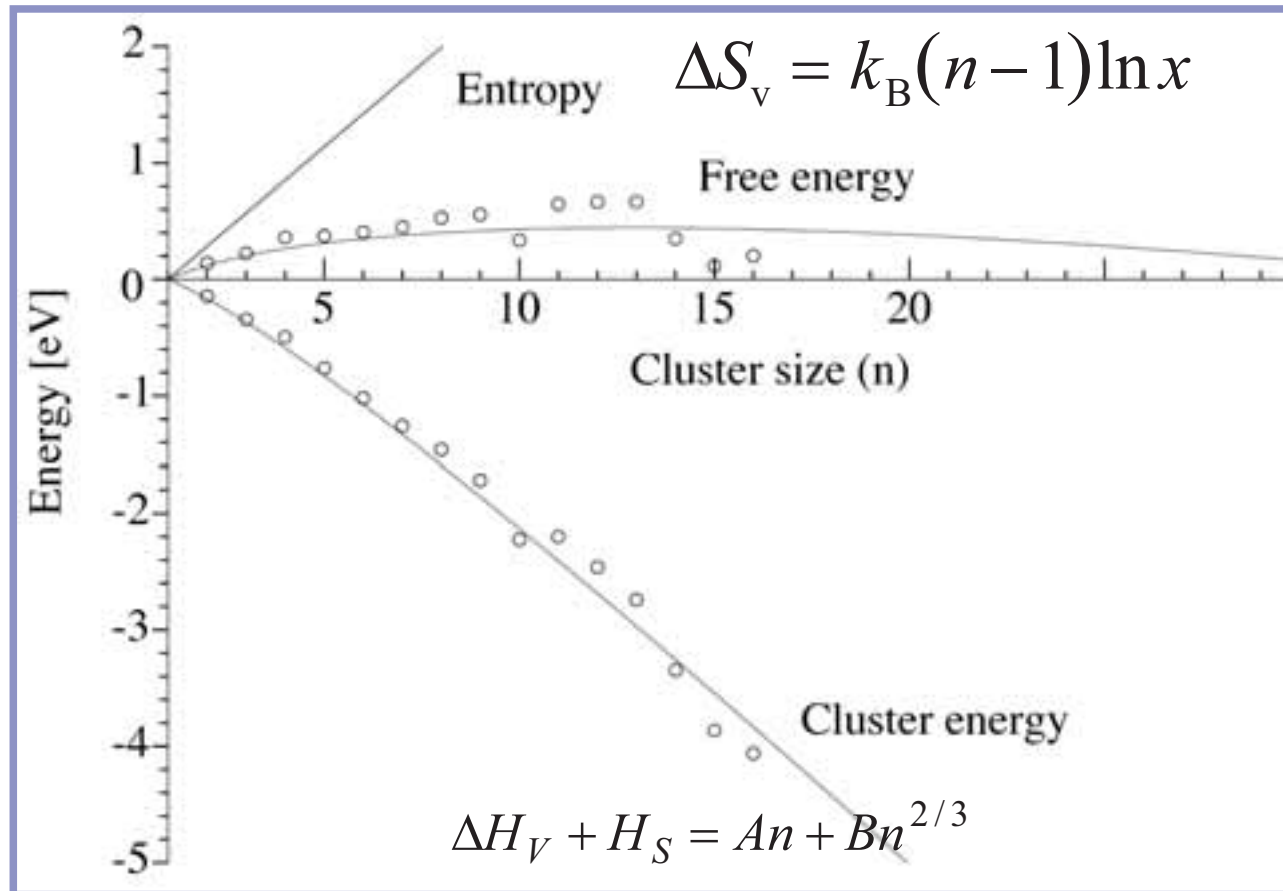
Final state



$$n_x \quad H = H(\text{dilution limit})$$
$$S = k_B \ln(x)$$

$$H = H(n - \text{cluster})$$
$$S = k_B \ln(x)$$

Cluster free energy



- Entropy term is estimated at 1.4at%Cu, 773K.

Comparison with the classical treatment

	$A[\text{eV}]$	n^*	$r^*[\text{\AA}]$	$G^*[\text{eV}]$	$\sigma [\text{J/m}^2]$
without relax	-0.40	13	5.1	0.67	0.25
with relax	-0.44	7	3.8	0.33	0.28
classical*		13	6.6	0.56	0.4**

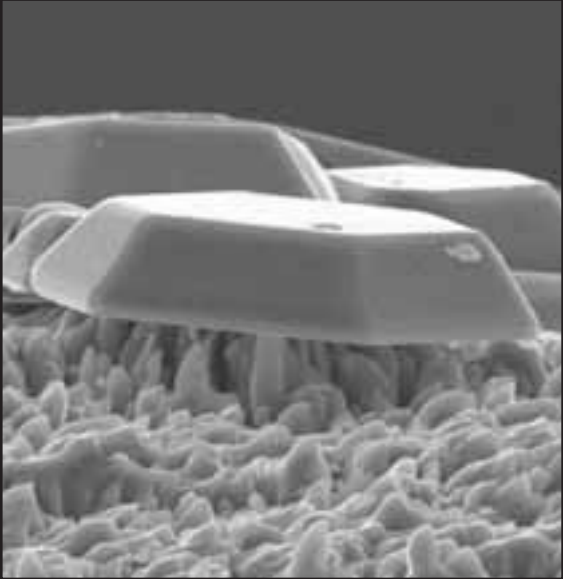

*classical treatment:

by S.R.Goodman et al., Metal. Trans., 4 (1973) 2371.

**Using 2/3 of the value(0.6) estimated from heat of solution.

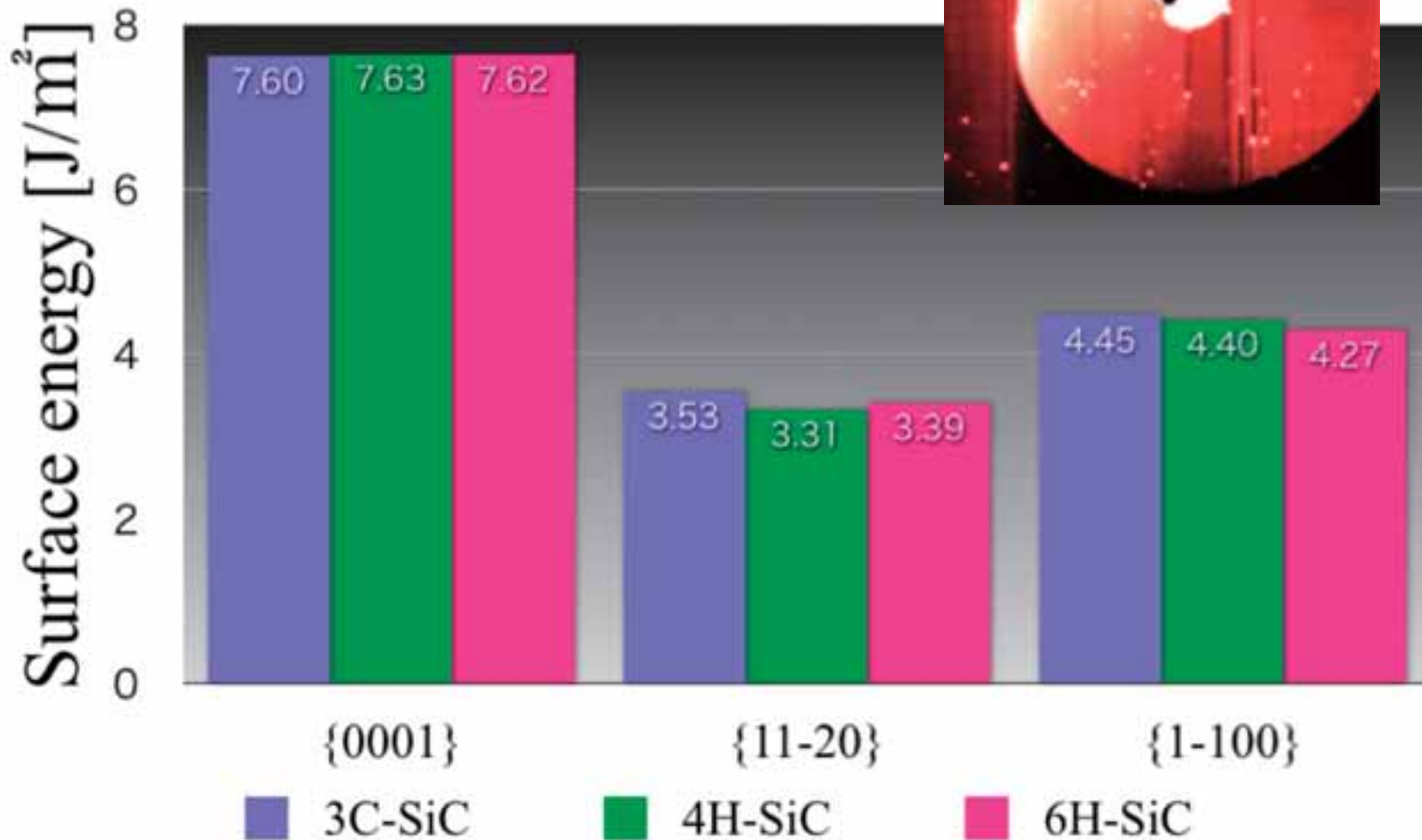
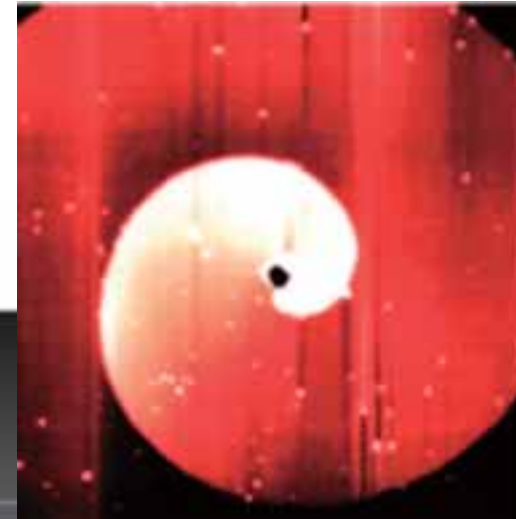
outline

- 準安定平衡状態図によるSiC成長
 - 準安定溶媒エピタキシー(金子法)
- 第一原理計算による相安定性
 - 熱膨張, 熱振動
- 微小析出物生成の活性化エネルギー
 - Fe系(Cu)合金, 固相析出
- 化合物半導体表面の雰囲気依存性
 - ホローコア, 表面平滑化

method	MSE	Vapor
surface morphology		
	smooth, flat	Hollow core,

C-rich

micropipes
Frank?





企業への期待

- ・ 加工プロセスの未説明現象,
- ・ 特に熱力学と格子欠陥に関連する現象
- ・ を持つ企業との共同研究を切に希望します.

お問い合わせ先

関西学院大学

TEL 079-565-7594

FAX 079-565-7594

e-mail nishitani@kwansei.ac.jp