

NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2018

講演概要集

~~~~~

講演者：梶山博司（徳島文理大学）、宇田毅（アスムス）

講演題目：ZnO ナノ結晶の紫外線誘起フォトクロミズム転移

講演概要：

VHF プラズマ CVD 法を用いて、UV 照射によりフォトクロミズム(PC)転移する ZnO ナノ粒子膜を合成した。Zn-K 吸収端の EXAFS 解析によれば、PC 膜では結合距離が伸びていて、Zn 原子のデバイワラー因子は異常に大きな値であった。PHASE/0 を用いて、C-O 結合と C-Zn 結合による状態密度をシミュレーションした。その結果、バンドギャップ内に有限な状態密度が形成されることが明らかになった。

~~~~~

講演者：櫻木俊輔（東大物性研）

講演題目：量子とじこめ効果により発現する Pd(100)超薄膜の強磁性

講演概要：

バルクでは常磁性を示す Pd について、(100)配向した超薄膜では量子井戸状態に起因して強磁性が発現することを示した。講演では、Pd における量子井戸誘起強磁性の起源と外場による磁性スイッチングの可能性に関して、実験および第一原理計算の両観点より議論した結果を発表する。

~~~~~

~~~~~  
講演者：小田将人（和歌山大学）

講演題目：電子格子相互作用を介した欠陥反応機構

講演概要：

GaN 中の欠陥反応は電子系から格子系へのエネルギー転換によって起こり、デバイスの性能劣化に重大な影響を与える。しかし、その発生機構は明らかになっていない。本研究では、第一原理計算を用いて Ga 空孔欠陥を含む GaN モデルの電子状態及び振動状態解析を行った。電子-格子相互作用が大きい孤立モードの存在を明らかにし、Ga 空孔周りで欠陥反応が実際に起こりうることを示した。

~~~~~  
講演者：宮田正靖（東芝メモリ）

講演題目：金属-絶縁体界面コンタクトの第一原理計算

講演概要：

CMOS の high-k/メタルゲート(HKMG)スタック開発で研究されてきた金属-絶縁体界面コンタクトは、3次元集積化した最新のフラッシュメモリでも多用され、今後も重要な技術である。フェルミレベルピニング等による HKMG の実効仕事関数(EWF)変調は原子レベルの界面物理現象に基づくため、その制御のためには第一原理に基づく機構理解が不可欠である。本講演では、筆者らが過去に行った第一原理に基づく HKMG の EWF 予測の取組みを紹介する。

~~~~~

~~~~~  
講演者：小倉正平（東大生研）

講演題目：PdAu 合金表面における水素の吸収・放出制御

講演概要：

Pd 単結晶表面に PdAu 合金層を作製して昇温脱離法と共鳴核反応法を用いて表面近傍での水素の振る舞いを調べ、水素の吸収速度が純粋な Pd に比べて 40 倍以上加速されることを発見した。第一原理計算の結果と合わせてその結果を紹介する。また一酸化炭素の吸着によって水素の吸収・放出サイトがブロックされ PdAu 合金の水素の放出温度が上昇する現象についても紹介する。

~~~~~  
講演者：榎間大輝*, 高本聡*, 村上陽一*, 波田野明日可*, 泉聡志*, 牛流章弘^, 廣畑賢治^

*東大工、^東芝

講演題目：4H-SiC のフォノン変形ポテンシャルの決定とパワーデバイスの応力評価への適用

講演概要：

有限要素法とラマン分光法を組み合わせることにより 4H-SiC パワーデバイスの残留応力分布を求める手法の開発を行った。ラマン分光法で測定されるラマンシフトと半導体材料中の応力テンソルは、材料定数であるフォノン変形ポテンシャルを介して結びつけることができる。本講演では、PHASE/0 を用いて 4H-SiC におけるフォノン変形ポテンシャルを算出した結果を中心に、開発した応力解析手法を pin ダイオードに適用した結果について報告する。

本研究は、総合科学技術・イノベーション会議の SIP「次世代パワーエレクトロニクス/SiC 次世代パワーエレクトロニクスの統合的研究開発」（管理人：NEDO）によって実施されました。

~~~~~

~~~~~  
講演者：肥田聡太（鳥取大学）、木下健太郎（東京理科大学）

講演題目：HfO₂ 結晶粒表面における酸素欠陥の凝集・拡散機構

講演概要：

ReRAM の抵抗変化は金属酸化物の酸素欠陥(Vo)が凝集・拡散することで生じると考えられてきた。しかし、計算で見積もられる Vo の移動に必要なエネルギーは実験値と隔たりがあった。今回、HfO₂ 結晶粒表面を想定し、Vo の移動を理論的に観察した。その結果、可逆的な Vo の拡散と凝集はバルク中では生じず、結晶表面近傍のみで生じることを確認した。前述の隔たりは計算がバルクで行われてきたことに起因する。

~~~~~  
講演者：田上勝規（アスムス）ほか

講演題目：PHASE/O の埋もれた機能の紹介

講演概要：

PHASE/O には非常に多くの計算・解析機能があるが、実例の紹介が少ないことからその有用性にもかかわらずあまり利用されていない機能も多い。本発表ではあまり使われていないものの、有用と思われる機能について簡単な実例を添えながら紹介する。

~~~~~