

スパコン プロフェッショナル

Series Supercomputer Professionals

No.05

企業における計算物質科学の適用事例

～ Si/SiO₂ 界面形成プロセスのシミュレーションを中心に～

計算手法の発達や計算機の性能向上の他、最近のマテリアルズ・インフォマティクスの潮流ともあいまって、計算物質科学的手法による物質・材料設計への期待が更に高まっている。一方、実用上は、材料設計だけでなく、所望の材料からなる薄膜、界面などの構造を制御性よく作製するための作製プロセスの設計も同様に重要である。

本講演では、Siの酸化によるSi/SiO₂界面形成プロセスに関する原子スケールのシミュレーションを中心に紹介する。この界面は、シリコンデバイス技術と深くかかわり、産業上最も重要で、最もよくコントロールされた界面であり、シリコンMOSFETの誕生以来、膨大な研究の蓄積がある。このため、種々の半導体 / 絶縁膜の界面を考える際の基礎としても重要である。しかし、Si/SiO₂界面やその形成プロセスなどに関して、原子レベルでは不明な部分がまだ多く残されており、将来の界面制御に向けて、今なお研究が続けられている。

講演ではまた、マテリアルズ・インフォマティクスの活用に向けた材料設計の試みについても触れる。更に、これらの事例を通して、計算物質科学の産業応用における課題について考える。



(株) 富士通研究所

Doctor of Science Chioko KANETA

特任研究員 **金田千穂子** 先生

日時：平成29年 1月11日 (水)

13:30 ~ 15:00

場所：金属材料研究所 2号館 1階 ラウンジ

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。



東北大学 (片平キャンパス)
金属材料研究所 見取り図