

応用物理学研究室(2402, 2311室)

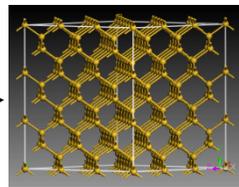
■応用物理学:物理学と工学を結ぶ, すなわち物理学をいかに実社会へ適用するかを念頭においた学問です. 半導体, 光・量子エレクトロニクス, 新素材など, 時代のニーズに対応した幅広いテーマが研究対象となっています.

当研究室: **第一原理計算法などの分子シミュレーション**を用い, (1)次世代半導体基板の開発(科研費研究), (2)IV族混晶系太陽電池の開発(JST受託研究), (3)ガスバリアーフィルムシミュレータの開発(特別電源受託研究)に関する基礎研究を行っている.

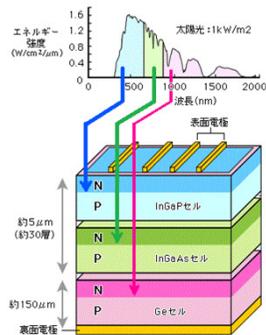
原子配置モデル作成



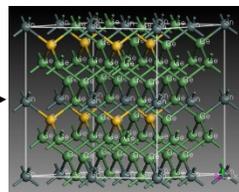
Si単結晶とウェーハ



Si結晶モデル



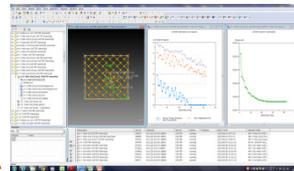
多層膜太陽電池



Ge₆Sn₁Si₁モデル

第一原理計算

ソフトウェア
●CASTEP
●Wien2k
所有計算機



2402室
Box Clusters
CPU: 合計72コア
メモリ: 360 GB



2303室
並列計算機
CPU: 合計48コア
メモリ: 390 GB

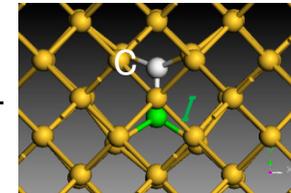


2311室
アローンPC群 27台
CPU: 4コア~12コア
メモリ: 4~64GB

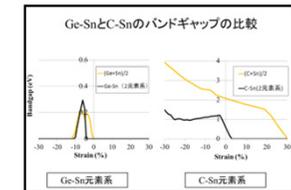
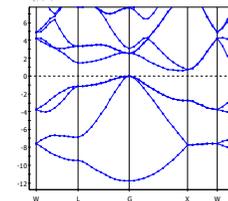
計算結果と考察

Si結晶中のC-I複合体

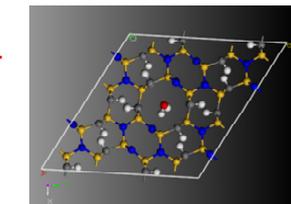
CMOSイメージセンサーの白キズ欠陥と推定



SiのエネルギーバンドとIV族混晶系のバンドギャップの検討

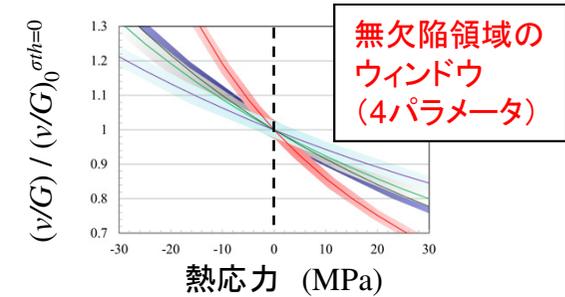
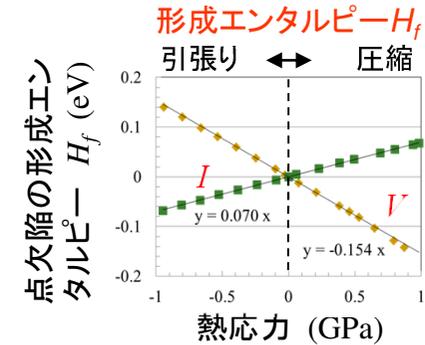
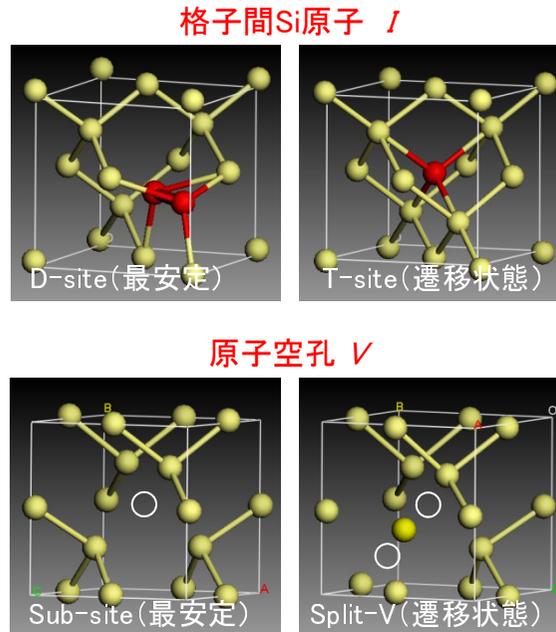
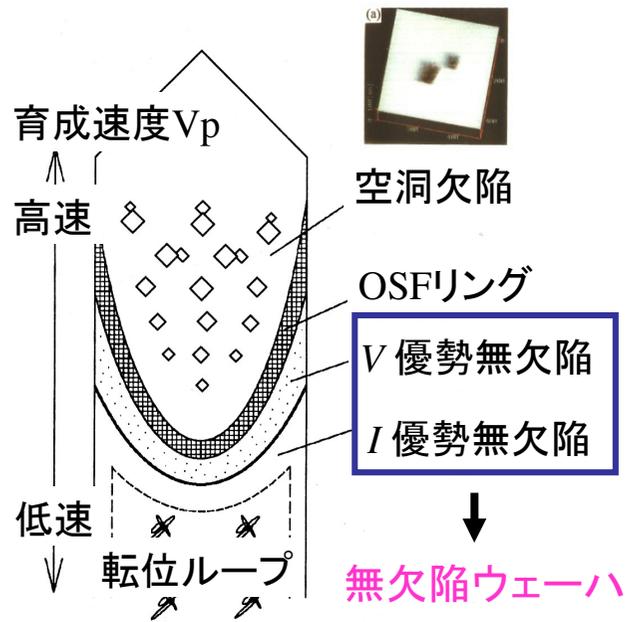


Si₃N₂C₂H₂ガスバリアーフィルムの構造とH₂O分子の安定位置

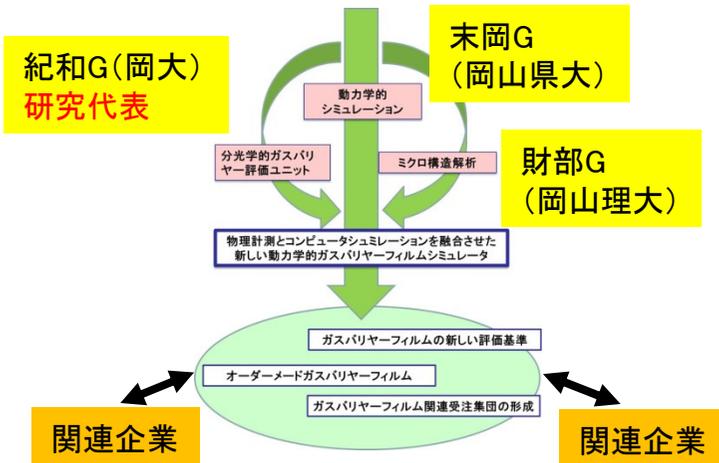


計算機性能の向上と理論の精密化により, 分子シミュレーション法は材料開発において極めて有益な研究手法になる.

■ 450 mm直径Si結晶成長における熱応力が点欠陥挙動に与える影響 (科研費基盤研究C 平成25~27年度)



■ 動力的ガスバリアーフィルムシミュレータの開発 (特別電源委託研究 平成23年度~)



第一原理分子動力学シミュレーション

H₂O分子 Animations

1. H₂O in Si₃N₂C₂ (115 atom)
2. H₂O in Si₃N₂C₂H₂ (147 atom)

$T = 1000^\circ\text{C}$ (加速試験)
 トータル時間 = 3 ps = 3e-12 sec
 1 fs (=1e-15 sec) 刻み

Side view (周期境界条件)

Top view

700K, 7.4 psec後のH₂O分子の拡散距離

Si₃N₂C₂H₂フィルム: 9.3 Å

Si₃N₂C₂フィルム: 0 Å

⇒水素の除去が重要

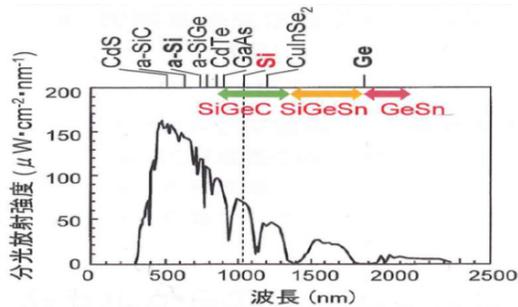
■太陽電池用IV族混晶系半導体の物性に関する基礎研究 (JST-ALCA委託研究 平成24~28年度)

末岡浩治¹ 神山栄治^{1,2} 中塚 理³ 泉妻宏治²

1:岡山県立大学情報工学部, 2:グローバルウェーブズ・ジャパン, 3:名古屋大学大学院工学研究科

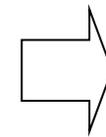
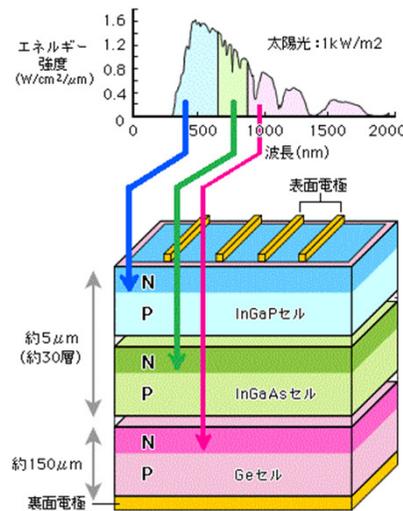
●シリコン系太陽電池と問題点

- ・多結晶Siが太陽電池の主要材料(変換効率17%程度)
- ・高効率化のためには、波長感度帯域の拡大が必要



III-V族は環境に悪影響を与え、かつSi材料との親和性にも問題がある。

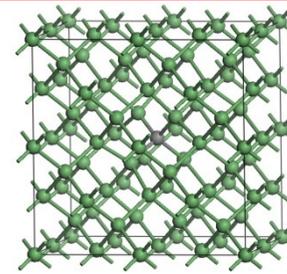
●バンドギャップが異なる薄膜の多接合型へ



●研究の切り口と目的

環境負荷が低いIV族(C, Si, Ge, Sn)の混晶系に注目。
バンドギャップ制御には、IV族組成に応じて実現する原子配置を計算予測する手法の開発が有益

大 ←バンドギャップ→ 小
C Si Ge Sn



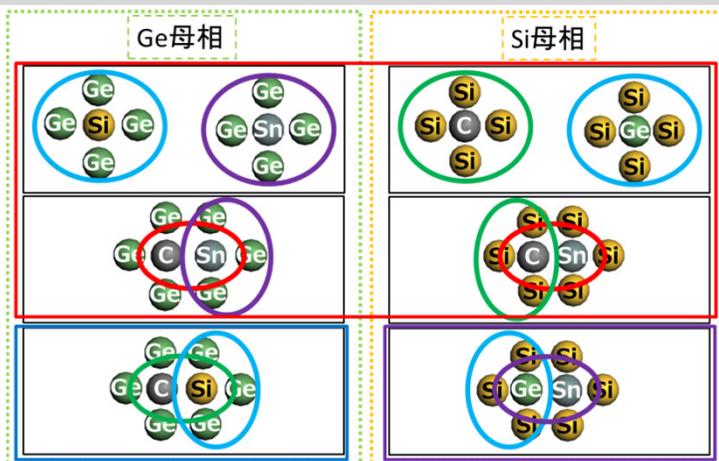
Ge 3 : Sn 1のモデル

JST-ALCA委託研究(H24開始)

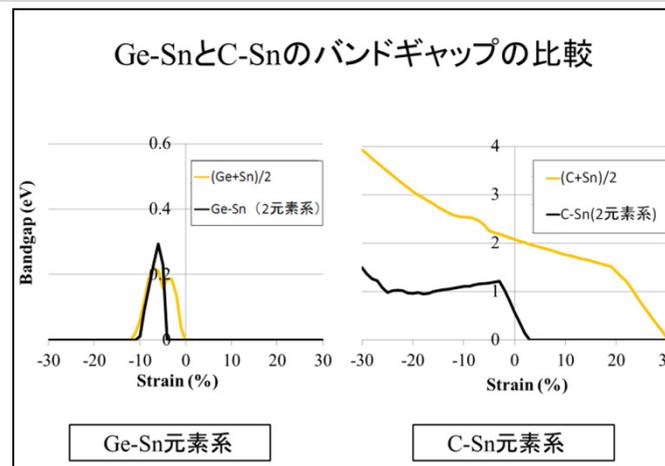
名古屋大学: 成膜実験
GWJ社: 膜質と物性評価

岡山県立大学
安定原子配置とバンド構造予測

■IV族混晶系の安定原子配置(第一原理計算)



■IV族混晶系のバンド構造(第一原理計算)



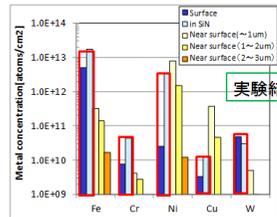
今年度の計画

- 任意の組成に対する原子配置モデリングプログラム作成
- 全電子計算によるバンド構造の精密予測

■半導体関連企業との共同研究

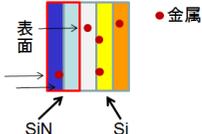
Si窒化膜中の金属原子挙動 (ソニー株式会社)

計算と実験の比較



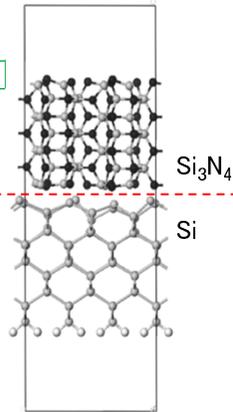
・Fe, Cr, Cuの大小関係を見てみると、実験結果と計算結果が同じ傾向にあることがわかる

Fe > Cr > Cu

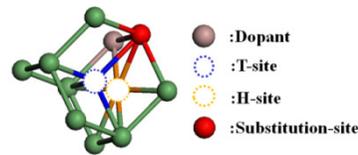


・実験結果はイオン注入とアニールをしたもの

Si₃N₄/Si 構造の提案



Ge単結晶中の金属原子挙動 (グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社)



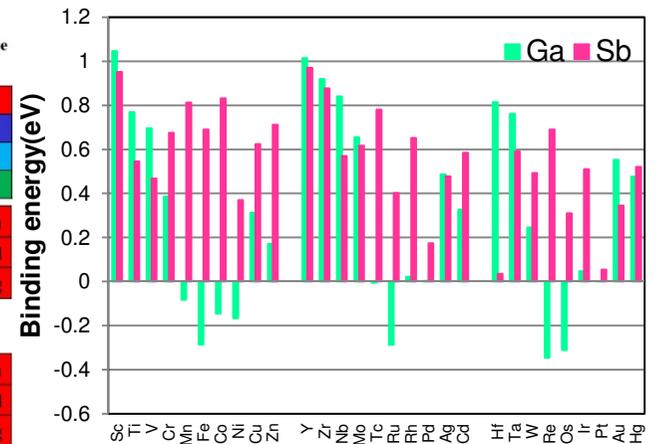
Dopant: Ga

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	

Dopant: Sb

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd
Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	

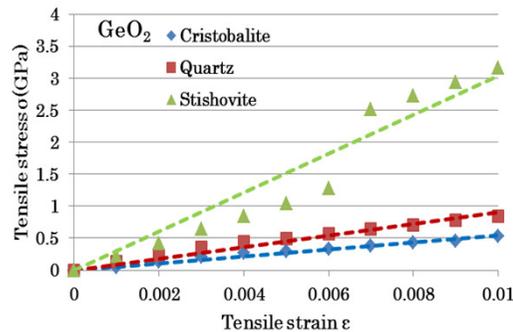
Ge中のドーパントと金属の結合エネルギー



■岡山県工業技術センターとの共同研究

SiO₂及びGeO₂結晶とアモルファスの機械的性質

[100]ヤング率の計算結果



	SiO ₂	GeO ₂
Cristobalite	86.6 GPa	54.3 GPa
Quartz	132.4 GPa	90.7 GPa
Stishovite	361.8 GPa	303.0 GPa

■Si, Ge中のボイド形成初期過程の分子動力学

原子空孔V4個が凝集したボイドのエネルギー

