

2. 研究開発課題名 総合的な材料プロセス解析システムの開発と半導体製造への適用

2.1 代表研究者 株式会社日立製作所 日立研究所 主任研究員 小林 金也

2.2 概要

半導体の主要製造プロセスであるエッチング、CVD、はんだプロセスでは、素過程(表面反応、膜質)からマクロ特性(膜形状)に渡って未知の現象が多く、ミクロからマクロまでを総合的に理解した開発が要求されている。このため、本課題では素過程・材料物性、膜内動的挙動、膜形状を総合的に対応できる解析システムを開発し、これを半導体製造、新機能性材料の解析に適用した。

2.3 研究開発実施内容

総合的な材料解析システムに必要な要素技術である [1] クラスタ解析における環境ポテンシャル計算プログラムを開発し、[2] SiOCH系の動力学用ポテンシャルパラメータを設定した。さらに [3] 粒子モデル膜構造計算プログラム、[4] 表面張力支配の液滴形状の計算プログラムを開発した (図1)。

さらに本解析システムにより 1) W エッチングと Ru 酸化機構、2) 層間絶縁膜 : SiO_{1.5} (CH₃) の膜質改質、3) フラーレン系の電子状態/超伝導特性を解析した。以降その内容を報告する。

2.3.1 クラスタ解析における環境ポテンシャル計算プログラムの開発

金属表面反応特性の高速・高精度計算を目的に題起計算プログラムを開発した。本プログラムでは、周囲の効果を近似的に取り込むため、1) 分子軌道関数を局在させ、電子密度を解析部と環境部に分解して環境部の電子密度を固定し 2) 環境部の分子軌道が解析部に侵入させないために射影演算子を利用する事を特徴としている。本手法の検証のため Al, 銅, 金表面上への酸素吸着反応を解析した。

Al 表面の酸素吸着では、環境部を考慮すると、4 配位吸着が bridge 吸着に比べ結合エネルギーが大きく実験に対応した。環境部を考慮しないと逆になった(表1)。これから比較的小数の原子クラスタ計算でも現実に対応した解析が可能となる見通しである。

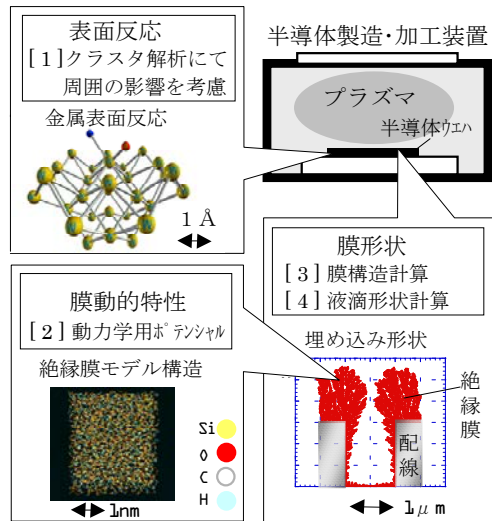
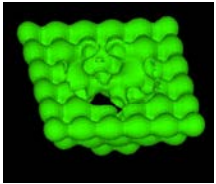


図1 総合的な材料プロセス解析システム概念図

表1 A1 表面の酸素吸着への適用

吸着形態		4 配位吸着	ブリッジ吸着
環境部の電子密度			
結合エネルギー	環境部考慮	8.1eV (2.04Å)*	6.4eV (1.75Å)
	環境部非考慮	7.8eV (2.06Å)	8.3eV (1.81Å)

*表面から酸素までの距離

2.3.2 SiOCH系の動力学用ポテンシャルパラメータを設定

LSI の層間絶縁膜は SiO_2 から無機/有機元素を含むハイブリッド系又は有機系の膜に移行しつつある。これらの絶縁膜の緒性質を調べるためには、原子間結合の生成及び切断を考慮している力場が必要となるが、現在このような化学反応を扱える力場に関する報告は見当たらない。このため SiO_2 力場をベースに、密度汎関数法に基づく原子クラスタ計算結果を用いて、C, H を考慮でき、脱水縮合反応を解析可能な力場を開発した。

2.3.3 粒子モデル膜構造計算プログラムの開発

スパッタ及びCVDによる表面上の溝への酸化膜、金属膜の成膜プロセスでは膜内密度分布、コラム構造が、膜信頼性に大きく影響する。このため、これら物理量を評価可能な下記特徴の計算プログラムを開発した。(1)入射粒子の集合体を有限半径の模擬粒子と仮定。(2)モンテカルロ計算に基づき、粒子の速度分布を確率的に発生。本手法から高密度プラズマ装置による溝埋め込み膜の形状は、基板に印可するバイアス電力が0では拡散無しの膜構造に近い事が判明した。

2.3.4 液滴形状の計算プログラムの開発

はんだの様に、固体境界上の熔融金属挙動を取り扱うプロセスでは、接合部での良・不良の分岐現象予測技術が強く望まれている。このような分岐現象の取り扱いには熔融金属の形状解析において、固→液、液→固の遷移状態の形状を的確に解析可能なモデルが必要である。ところが、従来手法では、複雑な境界条件の系では、連立非線形微分方程式を解く必要があり、解析困難であった。今回、微分方程式を解く事無く、空間格子の座標点から、高精度に圧力を評価できる新規の圧力評価関数を導出した。新規提案の関数式は、多階の微分が解析式で表現出来るため、従来困難であった一般の固体面での1)接触点での圧力、2)遷移状態、の解析が可能となった。本手法を傾斜板上の液滴挙動に加え、液体ブリッジ、任意形状の蛇口に適用した。

2.3.5 W エッチングと Ru 酸化のメカニズム解析

LSI 高速化を目的とする W 電極のエッチング機構解明を目的にW(100)表面をモデル化した原子クラスタとC1、0との反応を密度汎関数法より解析した。これから、0の存在でWW間の結合構造を壊してエッチングが容易になる事、及び表面に生成する前駆体が WC_2O_2 構造である事が判明し、エッチングによる気化生成物が WC_2O_2 分子であると特定できた。Ru の CVD プロセスでは Ru 表面と酸素の反応が重要な役割を担う。このため、Ru(0001)表面模擬クラスターに O_2 を吸着させたところ、1) O_2 分子は遷移状態無しで、表面に解離吸着、2) O_2 吸着後の表面部位にも O_2 分子が解離し、多重吸着する事が判明した。

2.3.6 誘電率層間絶縁膜 $\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ 膜の改質機構解析

$\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ 膜は O_2 プラズマアッシングを実施すると、膜質が変化して、耐湿性の低下、誘電率の上昇が観測される。しかしながら、 O_2 -RIE (reactive ion etching) プロセスでは、ある条件下では、前述の膜質変化がおきず、改質層ができる。本改質現象解明のため、分子動力学により $\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ 構造(図2)にOイオンを打ち込んだときの膜構造変化を調べた。その結果 O_2 プラズマアッシングではラジカルのみが膜表面に降ってきて、OH基に置換されポーラスな膜となる。一方 O_2 -RIE では、Oラジカルと共にOイオンが280eV程度の速度で入射する事がプラズマ解析で

判明した。動力学計算から、この高速イオンの衝突熱が膜内を伝播し(図 3)、膜内の Si-OH 基が脱水縮合することにより高密度化して、改質層を生成する事が判明した。

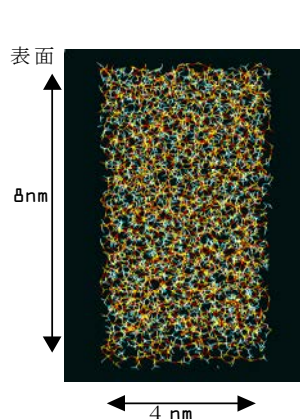


図 2 SiOCH膜の動力学計算用の単位ユニット (4 × 4 × 8 nm)

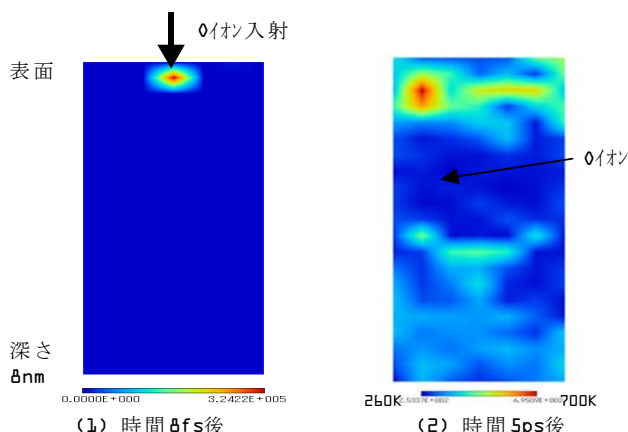


図 3 酸素イオン入射後の温度分布の動力学計算結果

2.3.7 新機能性材料の物性解析

C60は、アルカリ金属との化合物で 33 K、電界効果トランジスタを用いて 117 K という、高い転移温度 T_c をもつ超伝導物質である事が明らかになりつつある。この超伝導の発現機構の解明を目的に理論的研究を進めた。その結果、C60における超伝導は動的ヤーン-テラー効果により引き起こされている事で説明できた。この動的ヤーン-テラー効果はC60の超伝導を理解する上で、実空間的な描像として有効である。さらに、C60の超伝導を波数空間でみた時には動的ヤーン-テラー効果と等価な描像としてスーレ-近藤機構によってこれを理解できる事が判明した。C60化合物についての密度汎関数法による構造・電子状態計算結果に基づき、転移温度 T_c が理論的に高いと予測される新たな超伝導物質を提案した。

La@C82 と Eu@C60 の構造と電子状態を密度汎関数法に基づき解析した。その結果、C82 ケージの違いによる LaC82 分子の異性体の区別には、核四極子相互作用の評価が有用であることを明らかにした。次に、Eu@C60 の構造と電子状態の計算結果から、Eu の二つの 6s 電子が C60 ケージに移動し、かつ、そのスピンの Eu の 4f 電子と逆向きとなる事が判明した。これは、C60 ケージ上の伝導電子と Eu の 4f 電子の間に反強磁性的な結合があることを意味する。

2.4 題目別実施内容

(1) 研究開発題目：クラスタ解析用の環境ポテンシャル計算プログラムの開発、及び SiOCH 系の動力学用ポテンシャルパラメータの設定、及び液滴形状解析プログラムの開発、及び粒子モデル膜内構造計算プログラムの開発 (総括担当者名：李燦)

(a) クラスタ解析用の環境ポテンシャル計算プログラムの開発 (担当者名：佐野彰洋)

- ・密度汎関数法に基づく Embedded Cluster モデルにおける環境ポテンシャル計算プログラムを開発した。これにより、特に金属表面反応解析においては、周囲の効果を取り込む事により、比較的少数原子のクラスタ計算でも現実に対応した計算を可能とした。

(b) SiOCH系用動力学用ポテンシャルパラメータの設定 (担当者名：小池麻子)

- ・SiO₂力場をベースに、密度汎関数法に基づく原子クラスタ計算結果を用いて C, H を考

慮でき、膜内の脱水縮合反応を解析可能となる分子動力学用ポテンシャルパラメータを設定した。

(c) 粒子モデル膜内構造計算プログラムの開発 (担当者名: 大嶽敦)

- ・ 入射粒子の集合体を有限半径の模擬粒子と仮定する粒子モデル膜形状解析プログラムを開発し、表面上に形成された溝への酸化膜、金属膜などのCVD及びスパッタによる成膜では膜内密度分布、コラム構造を評価可能とした。

(d) 液滴形状解析プログラムの開発 (担当者名: Park Minseok)

- ・ 空間格子の座標点から、高精度に圧力を評価できる新規の圧力評価関数を導出した。これにより、従来困難であった一般の固体面での接触点での圧力、遷移状態の解析が可能となった。これにより傾斜板上のはんだの様な液滴の挙動に加え、液体ブリッジなどの複雑3次元系での液滴挙動解析を実現した。

(2) 半導体製造などへの適用 (総括担当者名: 中尾憲司)

本解析システムを半導体製造プロセスと新機能性材料の解析に適用した。

(a) W エッチングと Ru 酸化のメカニズム解析 (担当者名: 田子一農)

- ・ W(100)表面クラスタと Cl_2 との反応を密度汎関数法に基づく分子軌道計算法により解析した。これから、 Cl が WW 間結合を壊してエッチングが容易となる事、表面に生成する前駆体が WCl_2O_2 構造である事が判明し、気化生成物が WCl_2O_2 分子であると特定できた。さらに Ru(0001)表面模擬クラスターと O_2 との吸着反応から、 O_2 分子は遷移状態無しで、Ru 表面上に解離吸着。 O_2 吸着後の表面部位にも O_2 分子が解離して多重吸着することが判明した。

(b) 低誘電率膜 $\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ の膜質改質機構解析 (担当者名: 小池麻子)

- ・ 分子動力学解析により $\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ 構造に高速の O イオンを打ち込んだときの膜構造変化を調べたところ、この高速イオンの衝突熱が膜内を伝播し、膜内の OH 基が脱水縮合することにより高密度化して、膜表面に緻密な改質層が生成する事を明らかにした。

(c) 新機能性材料の解析 (担当者名: 鈴木修吾)。

- ・ アルカリドープ C60 における超伝導機構を解析し、これが動的ヤーン-テラー効果により引き起こされていることで説明できた。
- ・ C60 化合物についての密度汎関数法による計算結果から、転移温度 T_c が理論的に高いと予測される新たな超伝導物質を提案した。
- ・ 密度汎関数法に基づき 1)La@C82、2)Eu@C60 の構造と電子状態を求めた。その結果、Eu@C60 では、Eu の二つの 6s 電子が C60 ケージに移動し、かつ、そのスピンの Eu の 4f 電子と逆向きとなる事を明らかにした。

2.5 全体の総括と今後の課題

半導体では、新規の製造加工プロセスの開発が不可欠であるが、従来の実験のみの試行錯誤的な開発では、膨大な期間・コストが必要となっている。これを削減するため、現在、計算科学への期待が急速に高まりつつある。特に、半導体製造において主要プロセスであるエッチング、CVD (化学気相堆積)、はんだプロセスでは、素過程(表面反応、膜質)からマクロ特性(膜形状)に渡って未知の現象が多く、ミクロからマクロまでを総合的に理解した開発が要求されている。この

ため、本課題では素過程・材料物性、膜内構造の動的挙動、膜形状に対応できる総合的な解析システムを開発した。本課題開始の前に開発した技術に加え、新たに密度汎関数法に基づく Embedded クラスタ解析における環境ポテンシャル計算プログラムを開発し、Si、O、C、H から成る系にて脱水縮合反応を取り扱える動力学用ポテンシャル(力場)を設定した。さらに CVD・スパッタ成膜形状解析用の粒子モデル膜構造計算プログラムと、はんだなどの表面張力支配の液滴形状を複雑 3 次元系にて解析できる新圧力関数と計算プログラムを開発した。

本解析システムを用いて、下記結果を得た。

- 1) 新電極材のWの塩素と酸素ラジカルによるエッチング機構を解明するとともにRu表面の酸素分子による酸化反応を解析した。
- 2) 低誘電率層間絶縁膜 $\text{SiO}_{1.5}(\text{CH}_3)$ の酸素イオン照射による膜質改質メカニズムを解明した。
- 3) ナノデバイスの候補である金属内包フラーレンの安定構造・電子状態を解析した。さらにアルカリドープ C60 の超伝導機構を解析するのに加え、密度汎関数法の計算結果に基づき転移温度の高い C60 化合物を提案した。

今後環境、バイオ、環境など今回解析した分野以外の対象においても原子からマクロの現象を理解することが重要であると予想され、本システムの適用により、開発期間を大きく短縮可能と予測できる。このため、今回報告した分野のみならず、他分野への展開を検討したい。

2.6 研究開発実施体制

代表研究者氏名 小林 金也

所属・役職 株式会社 日立製作所 日立研究所 主任研究員

研究実施体制

- (1) クラスタ解析用の環境ポテンシャル計算プログラムの開発、及び SiOCH 系の動力学用ポテンシャルパラメータの設定、及び液滴形状解析プログラムの開発、及び粒子モデル膜内構造計算プログラムの開発

A. 参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目
佐野彰洋	株式会社 日立製作所 日立研究所 情報第六研究部計算科学ユニット	研究員	クラスタ解析用の環境ポテンシャル計算プログラムの開発
大嶽敦	株式会社 日立製作所 日立研究所 情報第六研究部計算科学ユニット	研究員	粒子モデル膜構造計算プログラムの開発
小池麻子	株式会社 日立製作所 日立研究所 (H10/9-H13/3)	研究員	SiOCH 系動力学用ポテンシャルパラメータの設定
李燦	株式会社 日立製作所 日立研究所 電子材料研究部電子機器材料ユニット	主任研究員	液滴形状計算プログラムの開発
Park Minseok	株式会社 日立製作所 日立研究所 電子材料研究部電子機器材料ユニット	臨時	液滴形状計算プログラムの開発

B. 研究協力者

氏名	所属	役職	研究開発項目
Jongbae Hong	韓国ソウル大学自然科学系物理	教授	液滴形状計算プログラムの開発

C. 招聘研究協力者

氏名	所属	役職	招聘の目的	滞在先	滞在期間
Jongbae Hong	韓国ソウル大学 自然科学系物理	教授	液滴形状計算 プログラムの開発	茨城県 日立市	①平成 11 年 5 月 30 日～6 月 5 日 ②平成 12 年 2 月 22 日～2 月 25 日 ③平成 13 年 8 月 29 日～9 月 12 日

(2) 半導体製造などへの適用

A. 参加者

氏名	所属	役職	研究開発項目
田子一農	株式会社 日立製作所日立研究所 情報第六研究部計算科学ユニット	主任研究員	半導体製造への適用に関する研究
数見秀之	株式会社 日立製作所日立研究所 情報第六研究部計算科学ユニット	主任研究員	半導体製造への適用に関する研究
中尾憲司	筑波大学物質工学系	教授	新機能性材料解析への適用に関する研究
鈴木修吾	筑波大学 物質工学系	講師	新機能性材料解析への適用に関する研究

2.7 本事業により得られた研究成果

(1) 外部発表等

(a)原著論文

発表年	論文タイトル	掲載雑誌名 巻・号・ページ	著者名	整理番号
2000	Many-Body Effects on the Density of States in Alkali-Metal-Doped C60	J. Phys. Soc. Jpn Vol. 69, No. 4, pp. 1249-1250,	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 19
2000	Theoretical Study on the Superconductivity Induced by the Dynamic Jahn-Teller Effect in Alkali-Metal-Doped C60	J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 69, No. 8, pp. 2615-2622	鈴木修吾、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 20
2000	Density Functional Study on Geometry and Electronic Structure of Eu@C60	Chem. Phys. Lett., Vol. 327, pp. 291-298	鈴木修吾、 櫛田瑞穂 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 21
2000	Antiferromagnetic Coupling Between the Conduction electrons and the 4f Electrons in Eu@C60	Proc. 25 th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, pp. 43-44	鈴木修吾、 櫛田瑞穂 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 22
2000	Hartree-Fock Study on the Phase Diagrams of Alkali-Metal-Doped C60	Proc. 25 th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, pp. 47-48	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 23
2000	Dynamical-Mean-Field Study on the Photoemission Spectra of Alkali-Metal-Doped C60	Proc. 25 th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, pp. 49-50	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 24

2000	Electronic Structures of the C82 and La@C82 Crystals by the Relativistic LCAO Method	Proc. 25 th Int. Conf. Phys. Semicond., Osaka, pp.59-60	雨宮聡、岡田晋、鈴木修吾、中尾憲司	12/10A-2 発 25
2001	Phase Transitions and Critical Phenomena in the Liquid Bridge under Lateral Acceleration	Phys. Rev. E, Vol 64, pp 27302-1-27302-4	Minseok Park, Chahn Lee, and Jongbae Hong	12/10A-2 発 26
2001	Charge Fluctuation in A3C60 (A=K and Rb): Competition Between Electron-Electron and Electron-Phonon Interactions	J. Phys. Soc. Jpn., Vol. 70, no. 2, pp317-320	千田忠彦、鈴木修吾、中尾憲司	13/10A-2 発 04
2001	Spin-and Orbital-Polarized States in Alkali-Metal-Doped C60	Synthetic Metals, Proc. Int. Conf. On Science and Technology of Synthetic Metals, Gastein, Vol. 121, pp. 1133-1134	広沢仁、鈴木修吾、中尾憲司	13/10A-2 発 05
2001	Many-Body Effects in the Electronic Structure of Alkali-Metal-Doped C60	Synthetic Metals, Proc. Int. Conf. On Science and Technology of Synthetic Metals, Gastein, Vol. 121, pp. 1135-1136	千田忠彦、鈴木修吾、中尾憲司	13/10A-2 発 06
2001	Relativistic Calculation on Electronic Structure of La@C82 Molecule and Crystal	Synthetic Metals, Proc. Int. Conf. On Science and Technology of Synthetic Metals, Gastein, Vol. 121, pp. 1137-1138	雨宮聡、岡田晋、鈴木修吾、中尾憲司	13/10A-2 発 07
2001	The Role of Pair - Transfer Interaction in Alkali-Metal-Doped C60	Synthetic Metals, Proc. Int. Conf. On Science and Technology of Synthetic Metals, Gastein, Vol. 121, pp. 1139-1140	鈴木修吾、岡田晋、中尾憲司	13/10A-2 発 08
2001	Theoretical Study on Anomalous Behavior in Photoemission Spectra of Alkali-Metal-Doped C60	J. Phys. Soc. Jpn., submitted.	千田忠彦、鈴木修吾、中尾憲司	13/10A-2 発 09

(b) 口頭・ポスター発表

発表年月日 開催場所	発表タイトル	学会等の名称 (予稿集名、掲載ページ)	発表者	整理番号
平成 11 年 8 月 9 日 岐阜県岐阜市	Theoretical Study of the Electron Structure of La@C82 Crystal by Fully Relativistic LCAO Method	第 17 回フラーレン総合シンポジウム, 59p	雨宮聡、岡田晋、鈴木修吾、中尾憲司	11/10A-2 発 01
平成 11 年 8 月 9 日 岐阜県岐阜市	Valence and Superconductivity in Alkali-Metal-Doped C60	第 17 回フラーレン総合シンポジウム, 242p	鈴木修吾、岡田晋、中尾憲司	11/10A-2 発 02
平成 11 年 9 月 24 日 岩手県盛岡市	楯円及び四角蛇口の液滴はいつまで安定であるか	日本物理学会 1999 年秋の分科会, 26aL-7	Park Minsoek、李燦	11/10A-2 発 03

平成 11 年 9 月 24 日 岩手県盛岡市	傾斜板の液滴はなぜ滑らないのか？	日本物理学会 1999 年秋の 分科会, 26aL-6	李燦 Park Minsoek	11/10A-2 発 04
平成 12 年 1 月 13 日 愛知県岡崎市	Dynamical mean-field study on the electronic structure of alkali-doped C60	第 18 回フラーレン総合シ ンポジウム, 133p	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	11/10A-2 発 05
平成 12 年 1 月 13 日 愛知県岡 崎市	Density Functional Study on the Electronic Structure of Solid Eu@C60	第 18 回フラーレン総合シ ンポジウム, 96p	鈴木修吾、 櫛田瑞徳 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	11/10A-2 発 06
平成 12 年 1 月 13 日 愛知県岡 崎市	Theoretical Study of the Electron Structure of La@C82 Crystal by Fully Relativistic LCAO Method	第 18 回フラーレン総合シ ンポジウム, 97p	雨宮聡、 岡田晋、 鈴木修吾、 中尾憲司	11/10A-2 発 07
平成 12 年 3 月 20 日 米国ミシ シッピ	Investigation of Oxygen on Metal Surface by Embedded Cluster Model	米国物理学会 2000 March Meeting, 799-800p	佐野彰洋、 小林金也	11/10A-2 発 08
平成 12 年 3 月 20 日 米国ミシ シッピ	The Study of Property Changes of Methyl Silicon Oxide Films in Ashing Process	米国物理学会 2000 March Meeting, 847p	小池麻子、 田子一農、 前川厚志	11/10A-2 発 09
平成 12 年 3 月 22 日 大阪府 吹田市	密度汎関数法による 固体 Eu@C60 の電子状態計算	日本物理学会 2000 年春の 分科会, 25 aS-7	鈴木修吾、 櫛田瑞徳 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	11/10A-2 発 10
平成 12 年 3 月 22 日 大阪府 吹田市	動的平均場近似によるアル カリドーピング C60 の電子 状態	日本物理学会 2000 年春の 分科会, 24 pF-7	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	11/10A-2 発 11
平成 12 年 4 月 28 日 韓国 Seoul	Effect of Lateral acceleration on Liquid bridge	韓国物理学会 2000 March Meeting, Ea-10	Park Minsoek 李燦	12/10A-2 発 01
平成 12 年 4 月 28 日 韓国 Seoul	New Representation of Surface Pressure	韓国物理学会 2000 March Meeting, Ea-11	李燦、 Park Minsoek	12/10A-2 発 02
平成 12 年 7 月 15 日 オーストリア グーテン	Spin-and orbital-polarized states in alkali-metal-doped C60	International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, FriD113	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 03
平成 12 年 7 月 15 日 オーストリア グーテン	Many body effects in the electronic structure of alkali-metal-doped C60	International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, FriD114	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 04
平成 12 年 7 月 15 日 オーストリア グーテン	Relativistic calculation on electronic structure of La@C82 molecule	International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, FriD115	雨宮聡、 岡田晋、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 05
平成 12 年 7 月 15 日 オーストリア グーテン	The role of pair - transfer interaction in alkali-metal-doped C60	International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals, FriD116	鈴木修吾、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 06
平成 12 年 9 月 22 日 新潟大学	加速度下の液体ブリッジ の 2 重安定性の研究	日本物理学会 2000 年秋の 分科会, 25aTE-13	Park Minsoek 李燦	12/10A-2 発 07

平成 12 年 8 月 4 日 大阪市	Antiferromagnetic coupling between the conduction electrons and the 4f electrons in Eu@C60	25th International Conference on the Physics of Semiconductor, aa283UQ1	鈴木修吾、 櫛田瑞徳 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 08
平成 12 年 8 月 4 日 大阪市	Hartree-Fock Study on the phase diagrams of alkali-metal-doped C60	25th International Conference on the Physics of Semiconductor, aa2810K1	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 09
平成 12 年 8 月 4 日 大阪市	Dynamical-mean-field study on the photoemission spectra of alkali-metal-doped C60	25th International Conference on the Physics of Semiconductor, aa279LI1	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 10
平成 13 年 1 月 15 日 神奈川県 鎌倉市	Electronic Structures of La@C82 Crystals by Relativistic LCAO Method	International Symposium on Nanonetwork Materials :Fullerens, Nanotube and Related System, 118p	雨宮聡、 岡田晋、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 11
平成 13 年 1 月 15 日 神奈川県 鎌倉市	Phase Diagrams of Alkali-Metal-Doped C60: Spin and Orbital-Polarized States	International Symposium on Nanonetwork Materials :Fullerens, Nanotube and Related System, 21p	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 12
平成 13 年 1 月 15 日 神奈川県 鎌倉市	Theoretical Study on the Photoemission Spectra of A3C60 (A=K and Rb)	International Symposium on Nanonetwork Materials :Fullerens, Nanotube and Related System, 20p	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 13
平成 13 年 1 月 15 日 神奈川県 鎌倉市	Dynamic Jahn-Teller Mechanism of Superconductivity in Alkali-Metal-Doped C60	International Symposium on Nanonetwork Materials :Fullerens, Nanotube and Related System, 19p	鈴木修吾、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 14
平成 13 年 1 月 15 日 神奈川県 鎌倉市	Electron Structure of Eu@C60	International Symposium on Nanonetwork Materials :Fullerens, Nanotube and Related System, 90p	鈴木修吾、 櫛田瑞徳 雨宮聡、 岡田晋、 中尾憲司	12/10A-2 発 15
平成 13 年 3 月 13 日 米国シアトル	Investigation of chemisorption of molecules on Ru(0001) surface by Density Functional Molecular Orbital Method	American Physical Society 2001 March meeting, 449-450p	大嶽敦、 佐野彰洋、 小林金也、 生田目俊秀	12/10A-2 発 16
平成 13 年 3 月 27 日 東京八王子市	A3C60 の有限温度における光電子スペクトルの理論的研究	日本物理学会 2001 年春の分科会, 30 p XD-4	千田忠彦、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 17
平成 13 年 3 月 27 日 東京八王子市	アルカリ金属ドーピング C60 の相図の理論的研究	日本物理学会 2001 年春の分科会, 30 p XD-3	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	12/10A-2 発 18
平成 13 年 9 月 18 日 徳島大	A4C60 における励起子の理論的研究	日本物理学会 2001 年秋の分科会, 18 WF-2	広沢仁、 鈴木修吾、 中尾憲司	13/1A-2 発 01
平成 13 年 9 月 17 日 徳島大	荒い表面上で成長する液滴の分布が示す統計的挙動	日本物理学会 2001 年秋の分科会, 19pRC-9	Park Minsoek 李燦	13/1A-2 発 02

平成 13 年 9 月 17 日 徳島大	無重力化の非粘性液滴の 表面張力による振動と分 裂	日本物理学会 2001 年秋の 分科会, 17pRJ-1	李燦 Park Minsoek	13/1A-2 発 03
----------------------------	---------------------------------	---------------------------------	--------------------	--------------

(2) 成果プログラム等

(a) クラスタ解析用の環境ポテンシャル計算プログラム

名称 : Embedded Cluster 計算用副プログラム

機能概要 :

表面反応特性を高速・高精度に計算可能とする事を目的に Embedded Cluster 計算用の環境ポテンシャルプログラムを開発した。周囲の効果を近似的に取り込むため、分子軌道関数を局在させて電子密度をクラスタ部とそれ以外の環境部に分解し、かつ環境部の電子密度行列を固定し、環境部の分子軌道がクラスタ部に侵入させないために Fock 行列に射影演算子を含ませる事を特徴としている。

使用言語 : FORTRAN90

サイズ:80.2K B

備考 : 本副プログラムを、各ユーザーが所有する密度汎関数法に基づく LCAO 型の分子軌道計算プログラムに接続して、Embedded Cluster 計算を実施する。

(b) 液滴形状解析プログラム

名称 PBSSS (Pressure Balance for Stable Surface Shape)

機能概要 :

PBSSS では圧力の釣り合いを用い自由表面を有する液体の安定状態での形状を求めることにより液滴の複雑な形状、遷移過程を解析可能である。特に、1) 不安定な形状から安定形状へのリラクセーション。2) 体積が変化する quasi-static 成長・逆成長過程、3) 重力又は重力と同じ形式で表現できる力の quasi-static 変化。をシミュレーション出来る。

使用言語 : C

サイズ: 59 K B

(c) 膜質構造解析プログラム

機能概要 :

入射粒子の集合体を有限半径の模擬粒子と仮定し、モンテカルロ計算に基づき、模擬粒子の速度分布を確率的に発生させることにより表面上に形成された溝へのスパッタ、CVD 成膜の膜内密度分布、コラム構造を評価可能である。表面拡散、表面付着確率 < 1 を考慮可能である。

使用言語 : FORTRAN90

サイズ:41 K B

(d) SiOCH 系動力学用ポテンシャルパラメータ

機能概要 :

SiO₂ 力場をベースに、密度汎関数法に基づく原子クラスタ計算結果を用いて、C, H の解析可能となるように SiOCH 系の分子動力学用パラメータ設定した。これにより膜内の Si-OH 基の脱水縮合反応を解析可能とした。

(3). 特許出願記録

出願日	発明の名称	発明者	出願人（持ち分）	整理番号
平成12年10月1日	埋め込み配線構造を有する半導体装置の製法	小池麻子 田子一農	株式会社日立製作所(50) 事業団(50)	12/A-2特01
平成13年10月26日	超伝導材料	鈴木修吾 中尾憲司 佐野彰洋 小林金也	株式会社日立製作所(50) 事業団(50)	13/A-2特01