

## 《目次》

ナノマテリアル研究会報告・・・1～2 p

ITO 代替ナノ電子材料・・・5～6 p

SEMICON West 2006・・・3 p

蠟梅 Now・・・7 p

自動車用 Li 二次電池の部材開発・・・4 p

## ナノマテリアル研究会報告

NPO ナノマテリアル研究会は(1)電子材料(新規半導体材料、MEMS、自己組織材料など)(2)記録メディア(光ディスク、集積メモリなど)(3)平面パネルディスプレイ、(4)ナノ評価技術について、材料の視点から調査活動を行なっている。本報告では、新規半導体材料(SiC、GaN、ダイヤモンド)に関する最近の動向の概説及び合金シミュレーション(大阪大学大学院理学研究科物理学専攻・赤井久純教授が開発された「MACHIKANEYAMA」:<http://sham.phys.sci.osaka-u.ac.jp/~kk/> 参照)を用いた予備的な計算結果について述べる。(以下、8月4日開催のNPOテクノセミナーでの報告要旨)

### 1. 新規半導体材料(SiC、GaN、ダイヤモンド)に関する最近の動向

既に広範に利用されている Si および GaAs 半導体に対し、これらの半導体では達成できない特性(発振周波数や出力)を有する可能性がある材料として、ワイドバンドギャップ半導体である SiC、GaN、ダイヤモンドの研究開発が進展している。パワーデバイスといえば、変電所の電圧変換器、電車やハイブリッド車のインバータなどが思い浮かぶが、小型のパワーデバイスは家電製品やパソコンなど広範に使用されている。新規半導体材料でパワーデバイスが実用化されれば、機器の小型化、大掛かりな冷却が不要な通信機器、電子機器の省エネ化などが図れることが期待されている。

SiC については高耐圧ダイオードが製品化されており、またパワーデバイスの試作実証がなされている。しかしながら、デバイス製造に必要な単結晶 SiC 基板が高価であり、また SiC 結晶に特有のマイクロパイプが完全には除去されていない。さらにデバイスにおけるゲート電極下のチャンネルにおけるキャリア移動度が小さい、という問題もあり、これらの課題解決に向けた技術開発がなされている。

GaN は青色発光素子で一躍有名になった。GaN は Al との組み合わせ(AlGaN)でバンドギャップ制御が可能であり、複雑なヘテロ接合構造により電子の移動度が極めて大きいトランジスタを作製できる。従って、100 GHz を優に超える通信用のトランジスタの開発競争が展開されている。

これに対しダイヤモンドは、研究機関が少ないこともあって、トランジスタの開発は遅れていたが、最近になって(1)高品質単結晶ダイヤモンドの合成、(2)単結晶に匹敵する結晶性をもったヘテロエピタキシャル膜の合成について技術開発が進み、また表面導電層を用いて最高周波数 40 GHz、pip 構造により 4 GHz のトランジスタが実証された。ダイヤモンドが高い絶縁破壊電界、物質中最高の熱伝導率をもつことを考慮すれば、数年内に SiC、GaN トランジスタの特性に追いつくと思われる。

いずれの場合も、低コストで高品質・大面積の単結晶ないしは擬似単結晶膜の合成技術を確立することが実用化には不可欠であり、今後の展開の鍵を握ると考えられる。

## 2. 合金の電子状態シミュレーション

合金材料の開発は、材料の多様な組織構造・成分の偏析などのために、技術開発に明確な指導原理がなく、経験や試行錯誤、または網羅的な実験に頼らざるを得ないのが実情である。2元系合金はまだしも、3元系・4元系合金となると、豊富な経験さえ機能しない。したがって、実際の原子的な構造とは異なる、理想的な系であっても、理論的に合金特性を予測できれば、目的とする最適な合金組成を短期間で得られる可能性がある。

合金のシミュレーションが可能なソフトウェアは多くないが、上記 MACHIKANEYAMA は、使いやすいフリーウェアの一つである。これを用いて AB 合金や ABC 合金の予備的なシミュレーションを行ない、フェルミ準位・状態密度を求めた。実験的には anomalous な結果が得られているものの、計算では A 金属から B 金属へ、電子状態がスムーズに移行していることから、実験で見られる anomaly は、構造的な要因によると結論された。MACHIKANEYAMA はソースコードが開示されているので(FORTRAN77) 当面は実験との対比に活用しつつも、今後、プログラムの改良や、アモルファス材料への適用・表面界面の計算などへの機能拡張を行えば、合金に対して有用なツールとなることが期待される。

神鋼リサーチ(株)小橋宏司