

永野 隆敏 (Takatoshi Nagano)

所属 (Domain) 物質科学工学領域 (Domain of Materials Science and Engineering)

●研究テーマ (Research theme)

①第一原理計算によるAl-Zn-Mg合金中の析出物水素偏析界面における強度評価

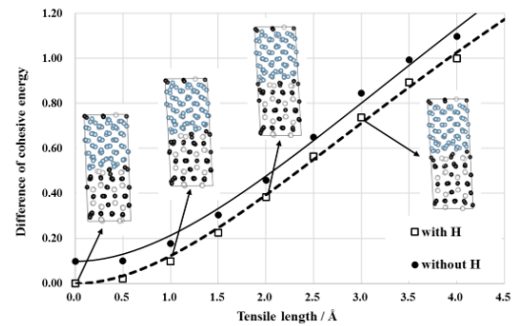
(Strength evaluation on the interface of precipitates with segregated hydrogen in Al-Mg-Zn alloys by ab initio calculation)

②銅配線中の不純物の偏析と粒界のピン止め効果

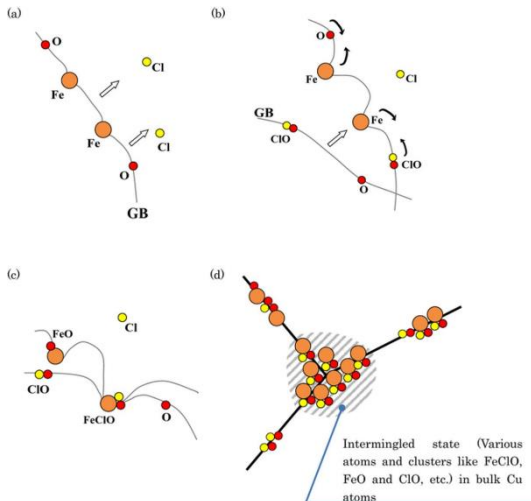
(Pinning effect of compounds on Cu grain growth in very narrow Cu wires)

①Al-Zn-Mg合金中析出相であるMgZn₂を対象にAl母相/MgZn₂析出相の界面モデルを作成し、水素の存在しやすさを第一原理計算によって、疑似的な最大引張強度を比較検討することによって粒界の強度を直接評価した。

Ab initio calculation of the tensile deformation of Al-Zn-Mg alloy models was performed to clarify the mechanism for hydrogen embrittlement in the Al-Zn-Mg alloy. The strength of the different interface models η_1, η_2, η_4 , was estimated by the derivative of the changes of the cohesive energies of the models.



Change of cohesive energy as a function of tensile elongation distance in the model of Al/MgZn₂ interface.



② LSI製造の中では、微細化に伴うCuの配線抵抗の増大が最も重要な問題である。100nm未満の幅を有するワイヤの電気抵抗率は、幅が減少するにつれて急激に増加する。その原因の1つとして粒界散乱が挙げられる。Cu配線内では結晶粒径の大きさと均一さで粒界の割合が決まる。粒界の割合は、結晶粒径が大きくて均一である方が少なくなる。結晶粒径の成長や均一さを妨げる原因としては、不純物の偏析によってピン止め効果が起こることが挙げられる。しかし、実験では不純物元素の特定はできるが、配線内でどの不純物元素がピン止め効果を及ぼすかはわかっていない。第一原理計算を用いて偏析の傾向を比較しピン止め効果をもつ元素の研究を行っている。

Cu wire resistivity increase due to miniaturization is the crucial common issue to be solved among LSI manufacturing companies. The electrical

resistivity of the wires with less than 100 nm width increases sharply with decreased width. One of the causes is grain boundary scattering. For Cu wiring, the grain boundary ratio is determined by the size and uniformity of the particle size. If the grain size is large and uniform, the proportion of grain boundaries decreases. One of the reasons for hindering the growth and uniformity of crystal grain size is that the pinning effect occurs due to segregation of impurities. However, although it is possible to specify the impurity element in the experiment, it is not known which impurity element has a pinning effect in the wiring.

キーワード (Keyword)

専門分野 (Specialized Field)

共同研究可能技術 (Possible Technology of Cooperative research)

関連論文・特許情報 website

(Related articles・patent information)

研究設備 (Research Facility)

研究室URL (Lab. URL)

E-mail

第一原理計算 (Ab initio calculation) 界面構造 (Interface structure)

計算材料学 (Computational Materials Science)

金属中不純物 (Impurities in metal)

<https://info.ibaraki.ac.jp/Profiles/6/0000507/profile.html>

小型スパッタ装置 (Sputtering apparatus)

takatoshi.nagano.rx78-02@vc.ibaraki.ac.jp