

半導体デバイス向け固相接合界面に関する 原子スケールシミュレーション

大阪大学 接合科学研究所 巽 裕章

目的：半導体デバイスの接合における固相接合界面の原子スケールでの接合メカニズムの解明。

内容：① Cu-Cu接合における分子動力学計算、② Cu-Si₃N₄接合における第一原理計算。

結果：① 接合界面を形成する結晶方位関係が接合性に影響することを解明。

② 剥離エネルギーの観点から有望な接合界面構造を明確化。

利用した計算機

①SQUID GPUノード群	②SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間 52 時間	ノード時間 3884 時間
ソフトウェア LAMMPS	ソフトウェア OpenMX
並列化 2ノード 並列	並列化 4ノード 並列

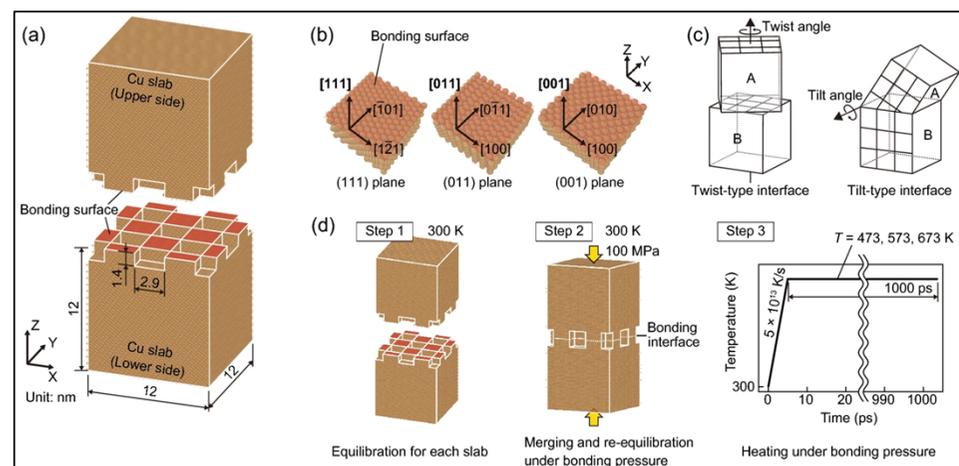


図 Cu-Cu接合界面の分子動力学計算
Sci. Rep. **13**, 23030 (2023)