

関西学院大学 工学部 情報工学課程

西谷滋人(シミュレーション工学)

研究室



教授 西谷 滋人

1. はじめに

関西学院大学は1889年に神戸・原田の森で伝道者の育成と、キリスト教主義に基づく青少年教育を目指し創設された。現在は西宮上ヶ原、西宮聖和、神戸三田、3つのキャンパスに跨る14学部 of 総合大学となっている。理系学部の歴史は1961年の理学部開設から始まり、2002年に神戸三田キャンパスへの移転とともに、理工学部へと名称変更し、同時に情報学科が開設された。その後、2021年に理工学部が理学部・工学部・生命環境学部・建築学部の4学部へ拡充、再編されるとともに、工学部 情報工学課程へと発展している。工学部には他に、エネルギー工学を指向する物質工学、電気電子応用工学課程と、人工知能、機械システムの知能化を目指した知能・機械工学課程がある。情報工学課程は、知能・機械工学課程と複専攻制度を採用し、ITの基盤となる専門知識を修得し、AIやデータマイニングなど最先端のIT技術を身につける教育・研究を行っている。

2. 研究室の概要

情報工学課程において、**西谷研究室**は、数値計算、シミュレーション工学を看板に掲げている。具体的には、第一原理計算をメインツールにして金属、半導体の格子欠陥の研究を行っている。対象とする欠陥構造は、空孔、不純物、析出物、界面、表面、転位と多岐に渡る。第一原理計算では、このような広範な対象を一つの手法で扱うことが可能であり、同じ物理の上で理解することができる。いくつかのアプリケーションプログラムを独自開発し、保有する計算クラスターマシン(図1)あるいは共同利用のスーパーコンピュータを用いて巨大系の数値計算を実行している。

当研究室で取り組んできた研究の具体例として

- SiCの準安定溶媒(MSE : Metastable Solvent Epitaxy)法の原理
- アルミニウム粒界エネルギーの有限温度第一原理計算

について紹介する。

3. 研究テーマ

3.1 SiCの準安定溶媒法(MSE)

「真空」に関連する研究としてSiCの準安定溶媒法を紹介する。SiCは次世代のパワー半導体の素材の一つで、その製造方法が長年の問題であった。関学大・工学部同僚の金子らは高温



図1 計算クラスター、CPUはIntel Xeon Goldなどで全360 coresでの並列計算が可能

($\sim 2000^{\circ}\text{C}$)の液体Si中で単結晶SiCを作成する手法を開発していた。

しかし、その成長において、いったい何を駆動力としているのかが不明であった。西谷は、安定な4H-SiCが、準安定の3C-SiCとの平衡濃度の違いを駆動力として、成長していることを理論的に説明した¹⁾。これは、高圧での液相成長からのダイヤモンド合成法としてゼネラル・エレクトリック(GE)社が開発したNi-C系での挙動と同じ原理である。

研究室では、さらにこの現象を深掘りして、表面エネルギーを第一原理計算で求めた。表面エネルギーの第一原理計算は真空と固体を共存させたスラブモデルを用いて求める。SiCにおいては、SiとCのわずかな極性の違いが、その表面エネルギーに大きな差を与えていることが判明した。SiCの表面と共存する雰囲気の違いによって図2のようにエネルギーに差が現れる。この結果、模式図

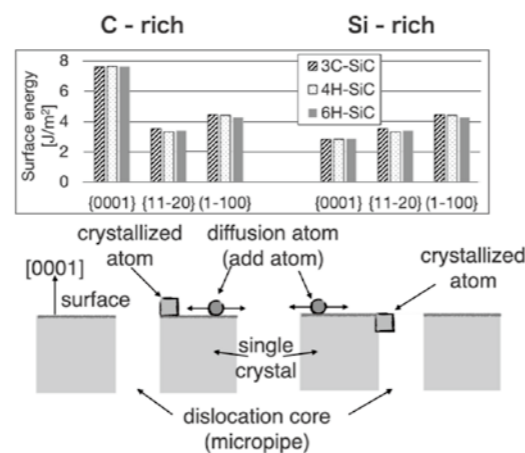


図2 SiC表面エネルギーと転位(マイクロパイプ)の閉塞機構

に書いた通りC-richな環境では、転位芯を構成する $\{11-20\}$ 、 $\{1-100\}$ 方向の表面エネルギーが下がり、転位が開口していく傾向が強い。逆にSi-richな環境では、転位が閉塞していく傾向が強いことが判明した。これが、準安定溶媒法のSi溶媒中でSiC表面が平滑化する要因の一つとなっている。

3.2 アルミニウム粒界エネルギーの有限温度第一原理計算

ごく最近当研究室で開発した有限温度の自由エネルギー計算法を粒界に適用した例を紹介する。

図3はAl<100> 対称傾角粒界エネルギーの傾角(tilt angle)依存性の計算結果と実験結果である。計算結果としては、経験的ポテンシャルであるEAMや第一原理計算による基底状態(ground state: 0K)での値が報告されていた。しかし、平衡温度(500K)で求められた実験結果とは絶対値および、小傾角での立ち上がり傾向に明確な差が認められた。この差は、小傾角エネルギーの理論予測となるRead-Shockleyモデルでは重要で、1960年代から転位論が実験結果を再現できる有力な証拠とされていた。

我々は、この差異を埋めるためにインシュタインモデルとモンテカルロ法を併用する新たな有限温度自由エネルギー計算法を開発し、この系に適用した。図3中では、それぞれEinstein (513K)と+Frenkelの値となるが、その結果は、実験結果を誤差範囲で再現するものであった²⁾。

粒界や添加元素は、多くの系でその物性を支配する重要な格子欠陥である。今回得られた計算結果は、それら実験室で観測される有限温度の挙動を自由エネルギーから再現できることを明確に示している。計算手法の単純さと得られる精度から、今後さらに広い対象物質に使われることが期待される。

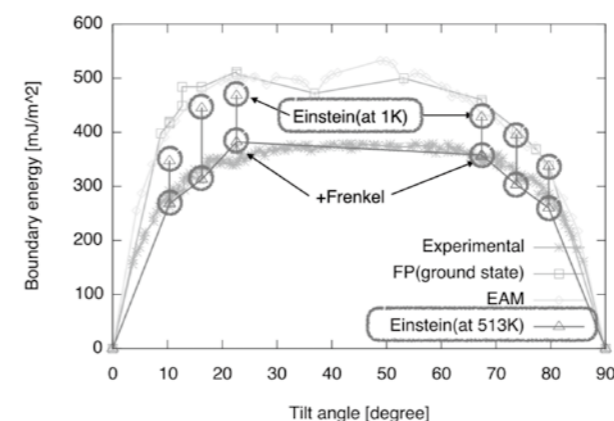


図3 Al<100> 対称傾角粒界エネルギーの計算結果と実験結果

3.3 研究ツール

研究室は情報工学課程に所属しているため、配属される学生は物性物理の素養が弱い。そこで、研究室で必要となるこれらの物理学や数学の原理、手法を効率よく学習定着させるためのツールの開発を学生とともにやっている。ものになったいくつかのアプリをあげると以下の通りである：

- my_help :: ターミナル上のmanを真似て、自分へのメモを作成するツール、Todoや名前を覚えるために使用。
- shunkuntype :: CUIで作成したタッチタイプ練習ソフト、GUI版を開発中。
- qiita_org :: エディタEmacsのorg-modeで作成した記事を知識共有サイトQiitaにアップロードするツール。
- put_rake :: 研究で、繰り返し行う作業を自動化するコマンドを共有するためのツール。

これらは、異なった時間と場所にいる師匠と徒弟が知識を効率よく伝承するようなツールを目指してきたが、図らずもコロナ禍中あるいは以降のリモートワークが不可欠な状況を強力でサポートしてくれている。Ruby GemsやGitHubでオープンソースとして提供しているので利用していただけると嬉しい。

4. おわりに

筆者は実験の現場から遠ざかって長いのですが、学生時代は、スパッタリングや高周波溶解などで真空技術に大変お世話になりました。計算の分野に進んで、真空と固液界面を同じモデルで扱っていると、その当時は何もないと思っていた固体の真空表面で原子がダンスする不思議な光景が見えてくる気がします。

5. 謝辞

今回の寄稿の機会をいただきました日立造船株式会社前顧問の三島尚志様にお礼申し上げます。

文献

- 1) "Metastable Solvent Epitaxy of SiC, the Other Diamond Synthetics", S. R. Nishitani, K. Togase, Y. Yamamoto, H. Fujiwara, and T. Kaneko, "Silicon Carbide", edited by Moumita Mukherjee, (InTech, 2011) ISBN 978-953-307-348-4, pp.53-68.
- 2) "Finite-temperature first-principles calculations of Al<100> symmetric tilt grain-boundary energy", S. R. Nishitani, Phil. Mag., 101 (2021), 622-642, DOI <https://doi.org/10.1080/14786435.2020.1855371>.