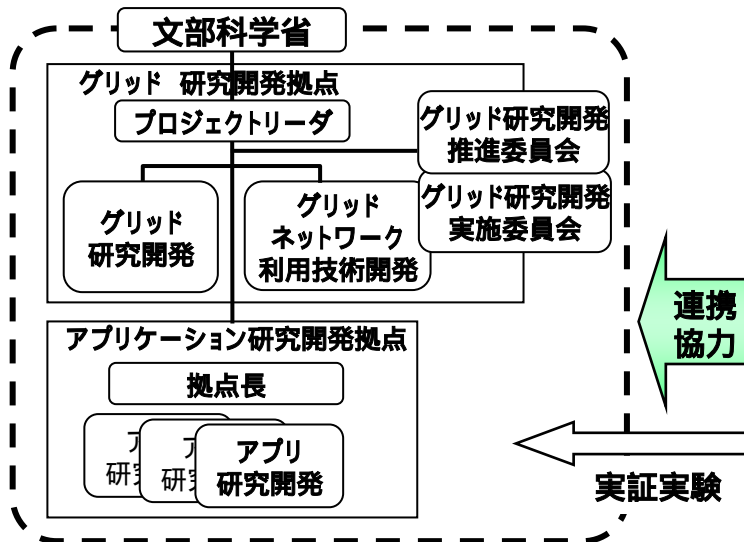


# 研究グリッド産業応用協議会

趣意：NAREGIで開発される技術を、幅広く産業分野において戦略的な技術資産となし、早期に産業に有効活用するため、産業界の窓口としてNAREGIの運営への意見の具申やプロジェクト成果の産業普及促進を行う。

## NAREGIプロジェクト体制

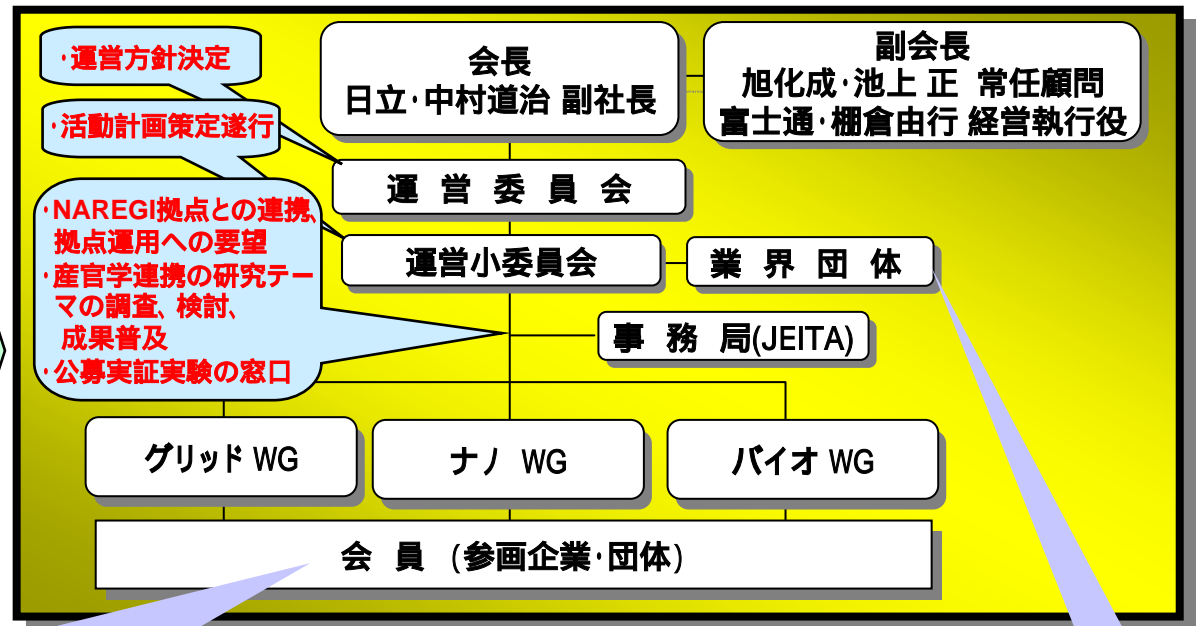


40社(2005年1月現在) - 五十音順 -

旭化成(株)、旭硝子(株)、味の素(株)、アドバンスソフト(株)、アプライドバイオシステムズジャパン(株)、(株)アルバック、インテック・ウェブ・アンド・ゲノム・インフォマティクス、(株)イー・アイ・イー研究社、(株)シーズ・ラボ、(株)シーティーアイ、(株)島津製作所、昭和電工(株)、住友化学工業(株)、住友製薬(株)、セイコーエプソン(株)、大正製薬(株)、ダイセル化学工業(株)、(株)デンソー、東亜合成(株)、(株)東芝、(株)日本触媒、日本ゼオン(株)、日本電気(株)、(株)ノバスジーン、(社)バイオ産業情報化コンソーシアム、(株)林原生物化学研究所、日立金属(株)、(株)日立製作所、日立ソフトウェアエンジニアリング(株)、富士写真フイルム(株)、富士通(株)、(株)富士通研究所、古河電気工業(株)、(株)マンダム、三井化学(株)、三井情報開発(株)、三菱化学(株)、(株)三菱化学生命科学研究所、(株)三菱総合研究所、三菱電機(株)

(社)日本経済団体連合会、(社)電子情報技術産業協会(JEITA)、(財)新機能素子研究開発協会(FED)、(財)バイオインダストリー協会(JBA)、(財)化学技術戦略推進機構(JCII)、日本製薬工業会(JPMA)

## 研究グリッド産業応用協議会 運営組織



# 窒素分子-シリカ表面吸着系のMP2計算

近年合成されたメソポーラス材料のガス吸着特性を予測・設計するための大規模計算を行う。第一原理計算でメソ細孔(孔径2-50 nm)内気体分子の吸着ポテンシャルを求め、吸着等温線をシミュレートする。高性能な触媒およびセンサ開発への応用が期待される。

## 1. メソポーラス材料評価の現状

- 1) 代表的材料はメソポーラスシリカ( $\text{SiO}_2$ )
- 2) 細孔に窒素ガスを吸着させて表面積などの材料物性を評価
- 3)  $\mu\text{m}$ オーダーの孔径で成り立つ古典的理論をガス吸着実験の解析に適用

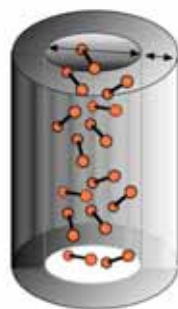
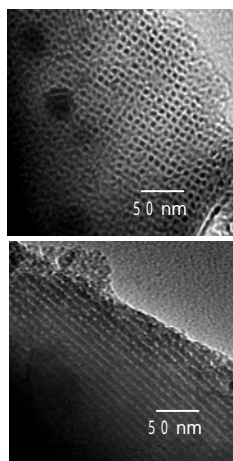


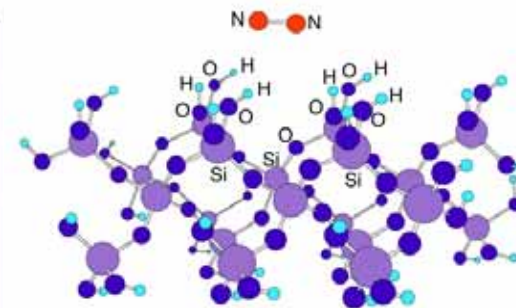
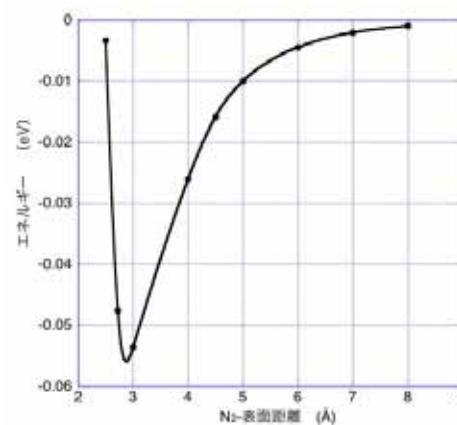
図1 メソポーラスシリカのSEM写真とメソ細孔内ガス分子吸着系の模式図

## 2. 古典的理論の適用限界

- 1) 吸着ガス分子数個分の大きさと孔径がほぼ同じメソ細孔に古典的理論の適用可否不明

## 3. 第一原理計算による吸着特性解析

- 1) 大規模表面モデルによる高精度計算を可能にするためFragment MO (FMO)法の適用を検討中



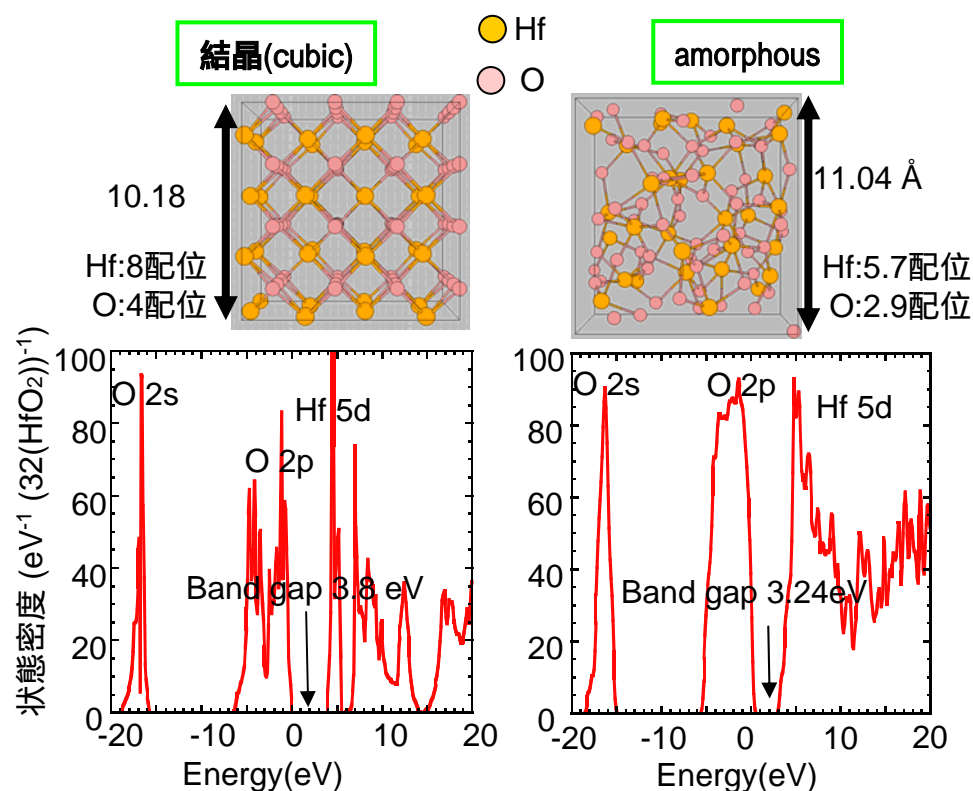
窒素分子 - シリカ表面モデル分子 ( $\text{N}_2 + \text{Si}_{20}\text{O}_{60}\text{H}_{40}$ )

図2 窒素分子 - シリカ表面モデル分子 ( $\text{N}_2 + \text{Si}_{20}\text{O}_{60}\text{H}_{40}$ ) の通常MP2計算による吸着ポテンシャル (Counterpoise補正適用)

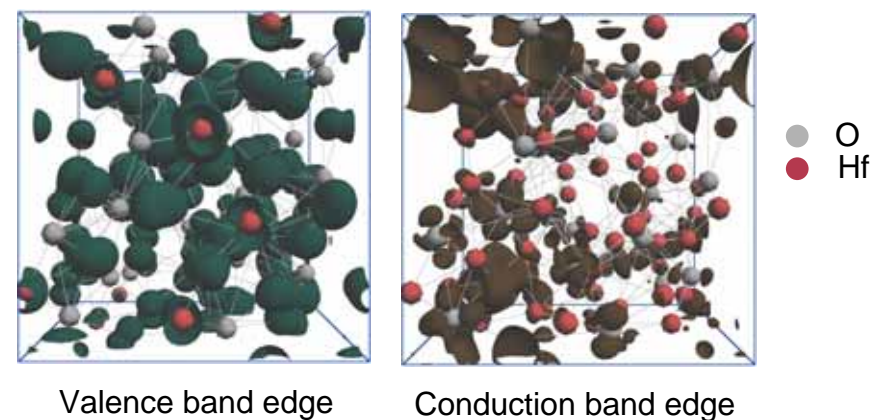
# グリッドを利用したシリコンナデバイス用高誘電率ゲート絶縁膜材料の劣化過程の研究

究極まで微細化されたSiデバイスにおいては、ゲート絶縁膜中の欠陥が性能や信頼性の鍵を握る。今後の欠陥研究のための基礎として、次世代の絶縁膜材料として注目される $\text{HfO}_2$ について、結晶およびアモルファス状態における原子配置、および電子状態の違いを明らかにする。

## 1. 原子配置と電子密度



## 2. 電荷密度分布(amorphous $\text{HfO}_2$ )



## 3. ジョブモニタリングと可視化による効率化の検討

