# 半導体プロセスのための人工知能融合吸着シミュレータの開発

## The development of artificial intelligence fusion adsorption simulator for semiconductor process

°佐藤 絵美[1]、佐藤 愛美[1]、小原 幸子[1]、稲葉 賢二[1]、石澤 由紀江[1]、宮野 正之[1]、ボノー パトリック[1]、三浦 隆治[1]、鈴木 愛[1]、宮本 直人[1]、畠山 望[1]、宮本 明[1] (1. 東北大学)

°Emi Sato[1], Manami Sato[1], Yukiko Obara[1], Kenji Inaba[1], Yukie Ishizawa[1], Masayuki Miyano[1], Patrick Bonnaud [1], Ryuji Miura[1], Ai Suzuki[1], Naoto Miyamoto, [1] Nozomu Hatakeyama[1], Akira Miyamoto[1] (1.Toholu Univ.)

E-mail: sato@aki.niche.tohoku.ac.jp

Si は半導体材料の代表として位置付けられ、その物理的・化学的特性が様々な面から研究されており、表面の構造解析、電子状態解析も原子レベルで進んでいる。その中でも、多用な温度特性や吸着分子との相互作用など、課題は多い。

モンテカルロ法は確率論と古典力学を用いて、状態が変化しなくなるまで分子の発生や移動などの施行を連続して行うことで、系の平衡状態を計算するための手法である。

分子に初期位置を与えたあと乱数を発生させ、①分子の発生、②分子の移動、③分子の回転、④分子の消滅の中から、次に行う試行を決定する。この試行を行ったことによるエネルギー変化を調べ、温度条件などによって決定される採択確率を用いてこの試行を採択するかどうかを決定し、選択した試行が不採択とされた場合には原子の位置を試行を行う前の位置に戻す。

この一連の操作を平衡状態になるまで数万回～数百万回行うことで、分子の吸着サイトやエネルギーなどをシミュレーションすることができる。この手法を用いて、様々な温度や濃度、多成分の吸着についても計算することができる。

計算時には Lennard-Jones ポテンシャル(CVFF)や電荷などのパラメータを用いる。化学吸着を考慮したパラメータも入力できるが、従来その値は独自に開発した超高速量子分子動力学シミュレーションを用い、経験的に試行錯誤を重ねながら手動でパラメータを決定していた。それを更に人工知能を用いてフィッティング作業を自動化し，より理論的に目標値を十分に満たす計算結果を得、その値をモンテカルロ吸着シミュレーションに用いるシミュレーションの開発を行っている。

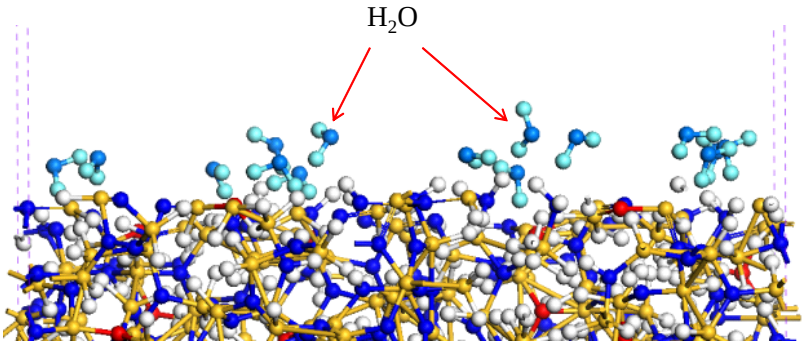


fig1. $H_2O$ adsorption on the $Si_3N_4$ surface

© 2016年 応用物理学会