人工知能融合超高速量子分子動力学法の開発と半導体プロセスへの応用

Application to the Semiconductor Process by Development of Artificial Intelligence Integrated Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics

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

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

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

原子,分子レベルのミクロ解析を行うため様々な分野で分子動力学法を用いた研究が数多くなされている,その中でも化学反応を扱える量子分子動力学法は電子レベルからの検討であるため半導体プロセスについての研究では非常に有用である. 近年のハードウェアの進歩により第一原理分子動力学計算による検討も行えるようにはなってきているが,まだまだ計算負荷が高い.そこで当研究室ではこれまで Tight-Binding 近似に基づく量子化学計算を使った第一原理分子動力学計算よりも 1000 万倍もの高速化を果たした超高速量子分子法を開発し,半導体プロセスについての計算にも適用してきた.その際,第一原理計算の結果を様々なモデルについて再現できるパラメータを作成することにより, Tight-Binding 量子化学計算の精度を上げている.その際,これまで計算モデルごとにフィッティングをマンパワーによって繰り返すことで作成してきた,しかし計算の高速化に伴いより複雑な計算モデルについても検討が可能になってくると,パラメータ作成自体が負荷となってきた.そこで当研究室では人工知能を用いて自動的に第一原理計算や熱力学実験データを再現できるパラメータを自動で作成できる手法を開発している.今回はその手法について Si、SiO_2 の酸化反応などの量子分子動力学計算を例に報告する.

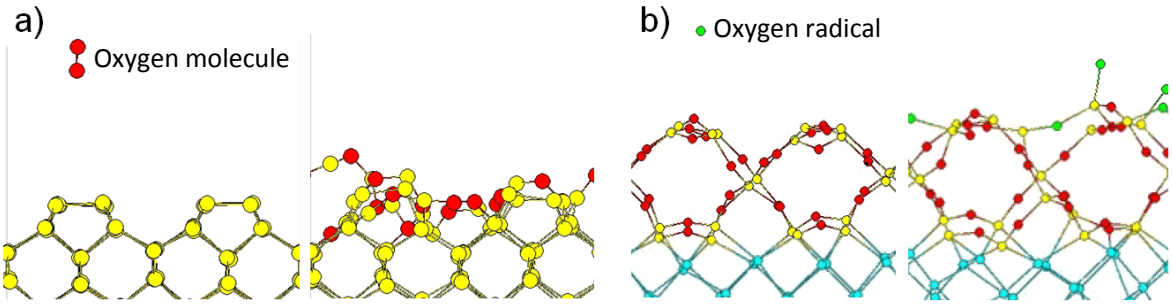

Fig.1 a) Quantum molecular dynamics calculation of the initial oxidation process of Si by oxygen b) Quantum molecular dynamics calculation of the oxidation process of initial oxide film by oxygen radical

© 2016年 応用物理学会