

人工知能融合超高速化量子分子動力学法の開発と化合物半導体プロセスへの応用

Development of Ultra Accelerated Quantum Chemical Molecular Dynamics Method and Its Application to Compound Semiconductor Process

○石澤 由紀江¹、稲葉 賢二¹、小原 幸子¹、佐藤 絵美¹、佐藤 愛美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)

○Yukie Ishizawa¹, Kenji Inaba¹, Yukiko Obara¹, Emi Sato¹, Manami Sato¹, Masayuki Miyano¹,
Patrick Bonnaud¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹,
Akira Miyamoto¹ (1.Tohoku Univ.)

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

半導体は材料面から大きく分けて 1 つの元素のみを材料にしている「単元素半導体」と 2 種類以上の元素を材料にしている「化合物半導体」の 2 種類に分けられる。

化合物半導体は単元素半導体として最も多く使用されている Si に比べ高価で、基板の結晶欠陥が多く割れやすいので結晶にする際に大型化が難しく、実用向きではないなどの弱点があった。しかし、化合物半導体では複数の異なる元素を組み合わせることで、Si 半導体では実現できなかった特性を得る事が出来、元素の組成を変えることで特性を調整する事が出来る。

近年、一般的な Si 半導体と比較して高耐圧・高耐熱・高周波パワーデバイスといった優れた特徴を持つ GaN 系材料のワイドバンドギャップの特性を持つ化合物半導体の需要が高まっている。この GaN は LED の材料としても使われており、不純物として In をどのくらいの割合混ぜるかにによって黄色から紫色・紫外まで幅広い波長の発光を得ることができる。

必要な波長を得る為の In の添加量や添加位置を検討する為には、電子レベルからの計算である量子分子動力学法が非常に有効である。従来は量子分子動力学法に用いる各原子のパラメーターを手動で決定していたが、新たに人工知能を用いて精度良く実験データを再現できるパラメーターを自動決定する事に成功した。本研究ではこの新しい手法を組み込んだ量子分子動力学法を用いて、化合物半導体に適用した例を報告する。

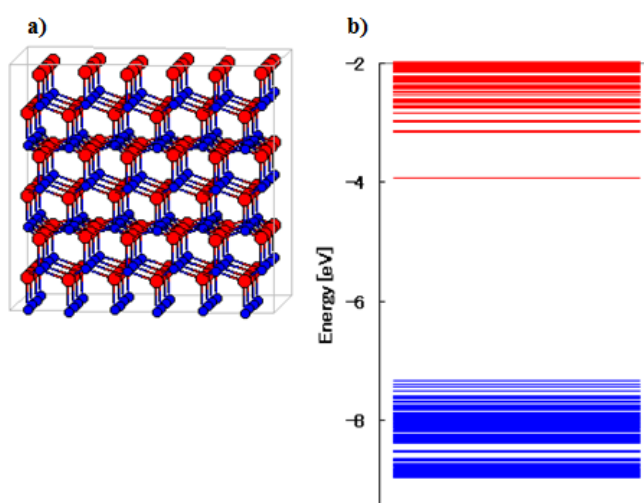


Figure 1 a) GaN structure (red : Ga , blue : N) , b) the calculated band structure of GaN.