

2020年度 独創的研究助成費 実績報告書

2021年2月15日

報告者	学科名	情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治
研究課題	人工ニューラルネットワークポテンシャルを用いたSi結晶中の点欠陥クラスターに関する大規模計算					
研究組織	氏名	所属・職		専門分野	役割分担	
	代表	末岡 浩治	情報工学部情報通信工学科・教授	応用物理学	研究総括	
	分担者	横井 達矢	名古屋大学大学院工学研究科・助教	材料科学	研究討論と機械学習	
		野田 祐輔	金沢学院大学経営情報学部・講師	材料科学	研究討論と機械学習	
		永倉 大樹	情報系工学研究科・D2	システム工学	第一原理計算と機械学習	
		後口 拓登	情報系工学研究科・M1	システム工学	第一原理計算と機械学習	
		大櫃 万聖	情報系工学研究科・M1	システム工学	第一原理計算と機械学習	
研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>電子デバイスに用いられる半導体シリコン (Si) ウェーハは、大口径化と高品位化が進んでいる。Si結晶成長において、点欠陥の一種である原子空孔 (V) が凝集したVクラスターは、今後のデバイス高性能化において問題になる。従って、Vクラスターの成長過程を明らかにすることは、Si結晶の高品位化とデバイスの高性能化のために有用である。</p> <p>このような点欠陥クラスターは実験で検出できないため、その形成機構の解明と制御技術の開発には、原子レベルの計算機シミュレーションが有望である。本研究では、最も計算精度が高い密度汎関数法 (DFT) に準ずる精度を有し、大規模計算が可能な古典的分子動力学法 (古典的MD) に準ずる計算コストを有する人工ニューラルネットワーク (ANN) ポテンシャルを開発し、Si結晶中の点欠陥クラスターの形成過程をテーマに取り組む。</p> <p>2. 研究成果の概要</p> <p>昨年度、名古屋大学と共同開発したANNポテンシャルについて、計算精度を検証した。図1に、系のエネルギーと原子に働く力についてANNポテンシャルとDFT計算を比較した結果を示す。両者の一致は極めて良いことを確認した。</p>					

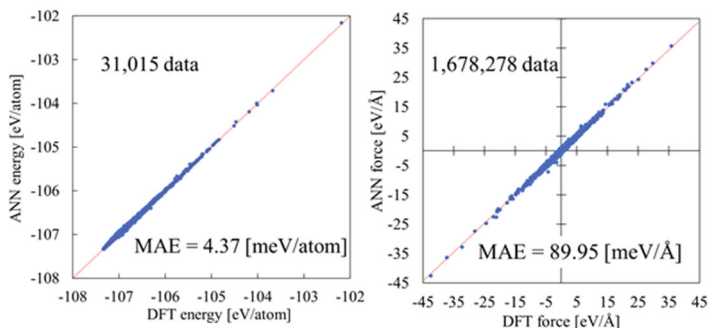


図1 ANNポテンシャルとDFT計算の精度比較

図2に3形態のVクラスターについて、ANNポテンシャルにより形成エネルギーを計算した結果を示す。横軸はVクラスターを構成するVの個数であり、41個以上でDFT計算が不可能な範囲に入っている。これより、Vクラスターの成長とともにSPC形態とHRC形態が安定となることがわかる。なお、DFT計算と比較して計算時間は1/720に減少した。

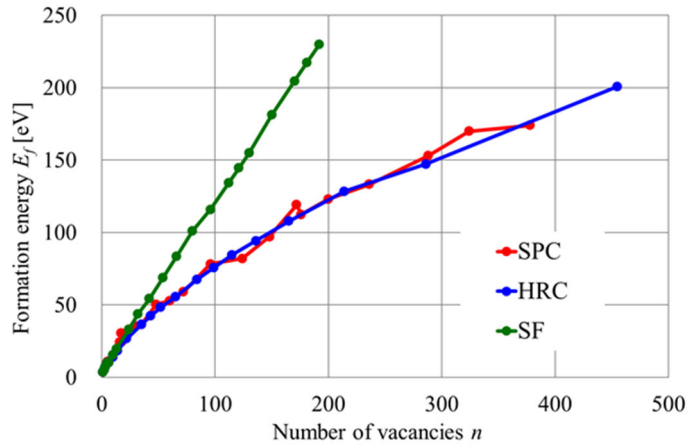


図2 3形態のVクラスターの形成エネルギー

研究実績
の概要

3. 研究成果および外部資金の取得状況

本研究に関連する成果を下記の学術誌に投稿し、採択された。また、国際会議GADEST2021において、2件の論文が採択された（2021年9月、オーストリア）。なお、本研究を発展させたテーマで学術変革領域研究（A）に応募予定である。

4. 今後の計画

金属や軽元素を含む2元系のANNポテンシャル開発が次年度の課題であり、最終的にはゲッターリング技術の開発へ活用する。

成果資料目録

1. E. Kamiyama and K. Sueoka, "Prediction of 0 aggregation in straight line at high temperature in Si crystals: Thermal donors attaching to an oxide precipitate surface", ECS Journal of Solid State Science and Technology 9 (2020) 054003.
2. Y. Mukaiyama, K. Sueoka, S. Maeda, Masaya Iizuka, and V. Mamedov, "Unsteady numerical simulations considering effects of thermal stress and heavy doping on the behavior of intrinsic point defects in large-diameter Si crystal growing by Czochralski method", Journal of Crystal Growth 532 (2020) 125433.
3. T. Kusunoki, K. Sueoka, W. Sugimura, and M. Hourai, "Theoretical study of hydrogen impact on concentration of intrinsic point defects during Czochralski Si crystal growth", Journal of Crystal Growth 555 (2021) 125971.