

2019年度 独創的研究助成費 実績報告書

2020年2月17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	CMOSイメージセンサ用ゲッタリング技術に資する材料計算手法の開発					
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	研究の総括	
	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	機械学習	
		野田 祐輔	名古屋大学大学院工学研究科・特任助教	材料科学	機械学習	
		永倉 大樹	情報系工学研究科・D1	電子工学	第一原理計算と実験	
西口 博樹		情報系工学研究科・D1	電子工学	第一原理計算と実験		
研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>本研究の最終目的は、高品位なCMOS (Complementary Metal Oxide Semiconductor) イメージセンサの製造に資する不純物ゲッタリング技術を開発することである。第一原理計算の結果を機械学習させることにより、第一原理計算では困難な“不純物金属の拡散挙動”を扱うことを可能とする材料計算手法を開発する。この手法により半導体Si結晶中の金属原子の人工ニューラルネットワーク (ANN) ポテンシャル関数を作成し、さらにそれを用いて大規模な動力学計算を行うことにより、ゲッタリングのメカニズムの解明を目指す。</p>					

※ 次ページに続く

2. 研究成果の概要

名古屋大学と共同で開発した ANN ポテンシャルの構造を図1にまとめる。これにより、大規模な計算モデル中の原子配置の最適化やエネルギーを求めることが可能となる。なお、初年度はSi原子のみから構成される1元系を扱い、次年度から金属を含む2元系以上を扱うことにした。

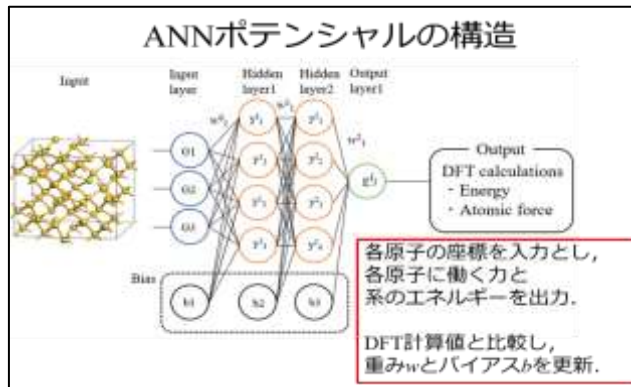


図1 開発した ANN ポテンシャルの構造

研究実績の概要

図2に計算例として、Si原子空孔クラスターの3形態の探索結果を示す。従来の計算法（第一原理計算や古典的分子動力学法）では、このような構造を短時間で探索することはできなかったが、本手法では2~3分で1つの構造を見つかることができた。

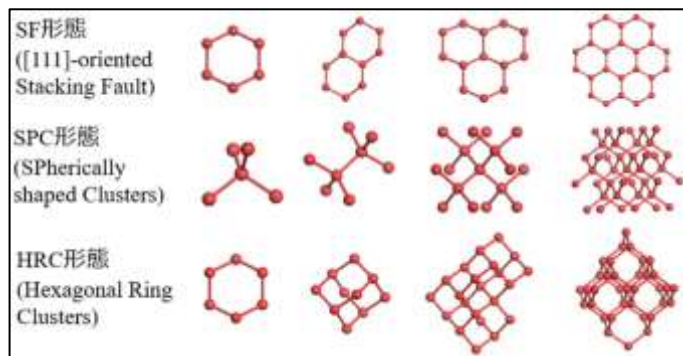


図2 探索できた Si 原子空孔クラスター構造

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、ゲッターリングに関する国際会議 GADEST2019 において招待講演（2019年9月、ドイツ）を行った。なお、本研究を発展させたテーマで科研費基盤研究Aに応募した。

4. 今後の計画

金属を含む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. Y. Mukaiyama, K. Sueoka, S. Maeda, Masaya Iizuka, and V. Mamedov, "Numerical analysis of effect of thermal stress depending on pulling rate on behavior of intrinsic point defects in large-diameter Si crystal grown by Czochralski method", Journal of Crystal Growth 531 (2020) 125334.
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. N. Nonoda and K. Sueoka, "Density Functional Theory Study on Stability of Fe, Cu, and Ni Atoms Near (001) Surface of Si Wafer", ECS Journal of Solid State Science and Technology, 8 (2019) P573.
4. K. Sueoka and H. Fukuda, "Theoretical study on Frenkel pair formation and recombination in single crystal Si", Journal of Crystal Growth 520 (2019) 1.