

2021年度 独創的研究助成費 実績報告書

2022年2月14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	Si結晶中の格子間クラスター計算に関する人工ニューラルネットワークポテンシャルの作成					
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	野田 祐輔	情報工学部情報通信工学科・准教授	材料科学	研究討論と機械学習	
		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	
		永倉 大樹	情報系工学研究科・D3	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・M2	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・M2	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>格子間Si原子 (I) が凝集して形成する I クラスターの成長過程を明らかにすることは、半導体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 I クラスターの形成過程をテーマに取り組んだ。</p>					

※ 次ページに続く

研究実績
の概要

開発した ANN ポテンシャルの概念図を右上図に示す。モデルに含まれるすべての原子の座標を入力データとし、モデルのエネルギーと原子に働く力を出力データとする。さらに出力データが DFT の結果と一致するように、結線重みとバイアスを繰り返し調整する構成となっている。

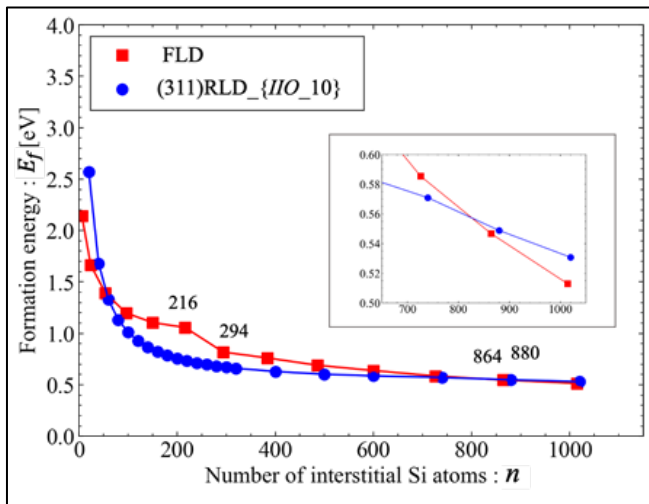
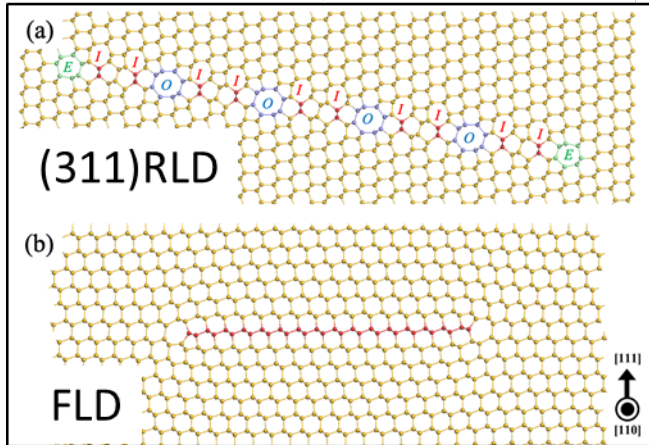
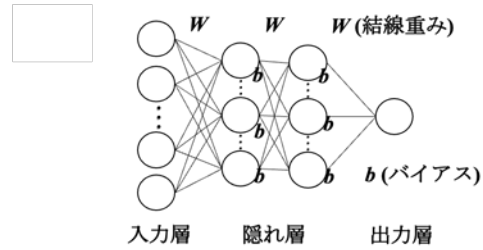
I クラスターの一例として、右中図に示すような Si 結晶中の拡張格子欠陥の構造と安定性の解析に取り組んだ。なお、(a) は (311) Rod-like Defect (RLD) の断面構造であり、(b) は Frank-loop Defect (FLD) の断面構造である。

右下図に、格子間 Si 原子の数 n が 1,000 個程度まで増加したときの、2 種類の拡張格子欠陥 ((311)RLD と FLD) の形成エネルギーを示す。 n が 50 以上になると、DFT による計算は非常に困難となる。この図より、 $n = 860$ 程度までは (311)RLD が最安定であり、それ以降は FLD が最安定となることがわかる。

さらに、ANN ポテンシャル計算から得られた結果を基に、

(311)RLD と FLD の形成エネルギーの定式化にも成功した。

なお、本研究は赤外線受発光デバイス用 IV 族混晶系へと発展し、今年度、CREST の採択にもつながった。



成果資料目録

1. H. Nagakura, K. Sueoka, N. Nonoda, "Density Functional Theory Study on Dependence of Stability of Fe, Cu, and Ni Atoms on Surface Orientation of Si Crystal", ECS Journal of Solid State Science and Technology, 10 (2021) 094002.
2. H. Nagakura, K. Sueoka, E. Kamiyama, "Density Functional Theory Study on Anisotropic Arrangement of Interstitial Oxygen Atoms at (001) Interface of Oxide Precipitates in Si Crystal", ECS Journal of Solid State Science and Technology, 10 (2021) 123003.
3. T. Ushiro, T. Yokoi, Y. Noda, E. Kamiyama, M. Ohbitsu, H. Nagakura, K. Sueoka, K. Matsunaga, "Preferential Growth Mode of Large-Sized Vacancy Clusters in Silicon: A Neural-Network Potential and First-Principles Study", The Journal of Physical Chemistry C, 125, 48 (2021) 26869.

