

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

草場 彰

九州大学 応用力学研究所
助教

次世代半導体開発におけるプロセス設計の革新

§ 1. 研究成果の概要

窒化ガリウム(GaN)は、高効率に電力変換を行うための次世代パワーデバイス材料として期待されている。その代表的な成膜法である有機金属気相成長(MOVPE)法において、高品質化(転位密度低減、不純物濃度制御)・低コスト化(大口径化、高速成長)に向けたプロセス開発が進められている。そこでは、膨大な実験回数を削減するために、マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーションの活用が不可欠であり、さらに、AI 関連技術と組み合わせることで、プロセス開発期間を大幅に短縮することが期待される。

本研究では、気相反応シミュレーションの高精度化に取り組む。MOVPE 法の気相反応モデルにおける速度定数は、量子化学計算・遷移状態理論により求められるが、精密な不純物濃度制御のためのプロセス条件探索などに対して、その算出された理論値の精度は不十分なことがある。最新の計測技術による実験値と協調させることで、理論値のチューニングを行い、気相反応モデルの高精度化を試みる。

当該年度は、実験データ・計算データの整理と簡易シミュレーターの構築を行い、Ⅲ族原料であるトリメチルガリウムの分解反応のみを対象にデータ同化を開始した。その結果、妥当なチューニングの範囲内で、不純物ガス種の濃度のシミュレーション予測が大幅に改善された。今後は、MOVPE 法の気相反応全体を対象にデータ同化を進め、定量的予測のための速度定数セットを獲得する。