

AI 活用で挑む学問の革新と創成
2020 年度採択研究者

2021 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

本研究課題では、窒化ガリウム有機金属気相成長 (GaN MOVPE) の定量的なマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション構築に資する気相反応モデルの改善に取り組んでいる。

当該年度は、量子化学計算と遷移状態理論により求められた反応速度定数をチューニングするため、Ⅲ族原料であるトリメチルガリウム (TMG) の分解反応を対象に、ベイズ推定に基づくデータ同化について検討を行った。具体的には、第一原理計算による理論値から反応速度定数の事前分布を設定した。反応速度定数が決まれば、反応シミュレーションを実施して、高分解能飛行時間型質量分析の実験データと比較することができ、その差異から尤度関数を設定した。マルコフ連鎖モンテカルロ (MCMC) 法でサンプリングを行い、反応速度定数の事後分布を得た。経験的に事前分布と尤度関数のハイパーパラメータを設定することで、最大事後確率を与える反応速度定数は、前年度に実施した多目的最適化に基づくデータ同化の結果と良い一致を示した。

また当該年度は、MOVPE 法の気相反応全体を対象に、反応シミュレーションを準備して多目的最適化に基づくデータ同化を開始した。ここでは、パラメータ数が TMG 分解の場合と比べて約 10 倍に増加するため、適切なパラメータの制約が必要であることが分かってきた。