

日本- ブルガリア・ポーランド国際共同研究 「原子レベルでの材料設計」 2023 年度 年次報告書	
研究課題名（和文）	深紫外 LED の実用化に向けた AlGaN ヘテロ界面の原子レベル制御
研究課題名（英文）	Atomic-level control of AlGaN hetero-interfaces for deep-UV LED
日本側研究代表者氏名	寒川 義裕
所属・役職	九州大学応用力学研究所・教授（副所長）
研究期間	2023 年 4 月 1 日 ～ 2026 年 3 月 31 日

1. 日本側の研究実施体制

氏名	所属機関・部局・役職	役割
寒川 義裕	九州大学応用力学研究所・教授	機械学習による条件最適化
三宅 秀人	三重大学工学研究科・教授	AIN バッファ層の開発
秋山 亨	三重大学工学研究科・准教授	第一原理計算による物性値の予測
草場 彰	九州大学応用力学研究所・助教	機械学習による条件最適化

2. 日本側研究チームの研究目標及び計画概要

（課題 1：AlGaN MOVPE プロセスを模擬するデジタルツインの開発）微傾斜表面における拡散ポテンシャル、ステップ間相互作用の計算予測を遂行する。

（課題 2：AIN 下地層（バッファ層）の開発）機械学習を活用して Face-to-Face スパッタ AIN 高温アニール（FFA-Sp-AIN）の条件最適化を行う。さらに、オペランド計測を活用して平坦な MOVPE AIN 薄膜（バッファ層）を得る。

3. 日本側研究チームの実施概要

本研究プロジェクトは、コロナウイルスや細菌などの RNA、DNA の破壊、不活化に資する深紫外 LED の開発を目的とする。具体的には、[Work Package, WP1（ポーランドと日本の研究チーム）] 原料原子・分子の結晶成長表面への吸着確率などの物性パラメーターを解析し、[WP2（ブルガリアとポーランドの研究チーム）] 得られた物性パラメーターを実装した表面原子ステップの動的挙動を解析するデジタルツイン（現実空間のデジタル複製）を開発する。[WP3（日本チーム）] 開発されたデジタルツインを活用した機械学習により原子レベルで平坦な表面／界面を得るための結晶成長条件を予測し、[WP4（日本チーム）] AlGaN 有機金属気相成長により深紫外 LED を作製し、概念実証を行う。3カ国4チーム（WP1～4）による国際共同研究を通して、クリーンで安全・安心な社会の実現に貢献する。2023 年度は次の課題解決に向けて研究を実施した。

（課題 1：AlGaN MOVPE プロセスを模擬するデジタルツインの開発）

[WP1] AlGaN 表面における H（水素）の被覆率と吸着エネルギーの相関を解明した。また、[1-100]m 方位微傾斜 AlN(0001)基板における Ga 拡散ポテンシャルおよびステップ-ステップ間相互作用を明らかにした。

[WP2] WP1 による解析結果（ステップ端近傍における Ehrlich-Schwoebel 障壁）を考慮してステップダイナミクスシミュレーションを実施した。得られた知見を WP4 にフィードフォワードした。

[WP4] AlGaN MOVPE 成長実験を行い、成長条件と表面形態の相関を明らかにした。ここで得られた知見を WP1～2 にフィードバックし、物理モデルの改良・改善を進めている。

（課題 2：AlN 下地層（バッファ層）の開発）

[WP3] 機械学習（スパースモデリング）により、FFA-Sp-AlN の条件探索を行い、重要な条件パラメータとその結果への影響を特定することに成功した。ここで得られた知見を WP4 にフィードフォワードし実験を実施した。