

2022年2月14日(月)

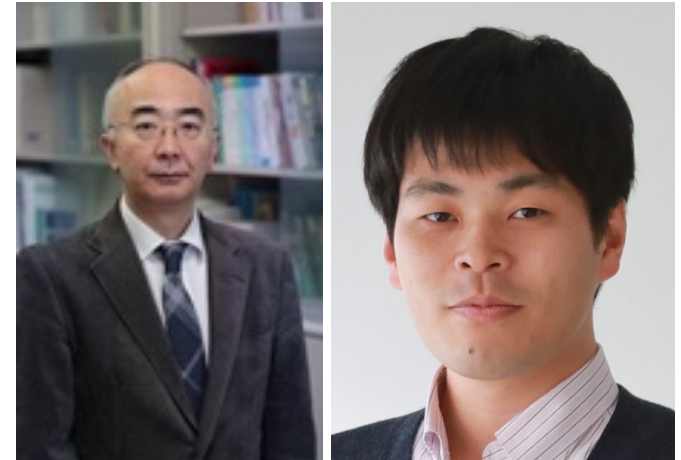
研究室紹介 (応用物理学研究室)

情報工学部 情報通信工学科
情報電子工学講座

研究室メンバー(R4年度)

- スタッフ

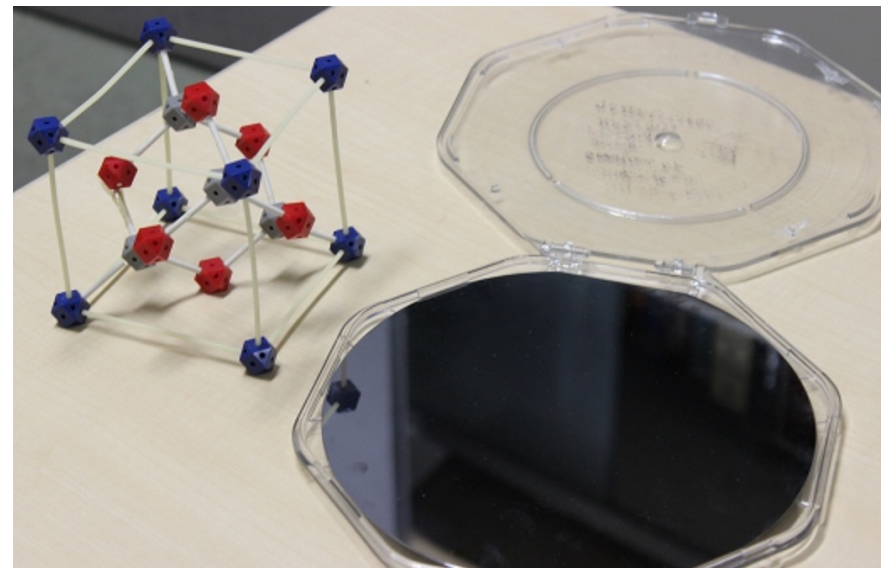
- 教授 **末岡 浩治** (居室:2303)
- 准教授 **野田 祐輔** (居室:2111)



- 学生

- 大学院 D2 1名 (社会人), M2 2名, M1 3名
- 学部 B4 ?名 (学生部屋:2311, 2402)

- 研究生 1名



応用物理学とは

“物理学をいかに産業応用するか”を念頭においた学問です。
当研究室では、**計算機シミュレーション**という研究手法を用い、**半導体材料**を中心に以下の研究を行っています。

- 末岡**: 電子状態計算, ANNポテンシャル(機械学習)
パワーデバイス用Si, SiC, GaN(科学研究費基盤研究)
赤外受発光デバイス用IV族混晶(CREST受託研究)
イメージセンサ用Si (企業共同研究)
- 野田**: 電子状態計算, 機械学習, マテリアルズ・インフォマティクス
誘電体, 低誘電率材料, CO₂還元触媒開発(NEDO受託研究)
原子間ポテンシャル開発とSi半導体への応用(企業共同研究)

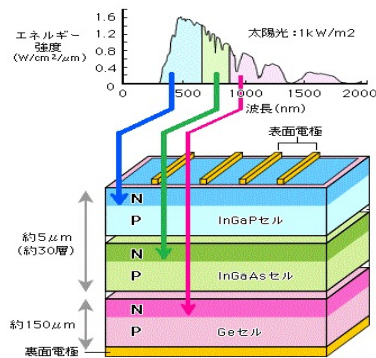
計算機シミュレーション

実験が難しい場合に、コンピューターの中でその現象を模擬(**シミュレーション**)し、物性を予測したり、メカニズムを解明する。

計算機シミュレーション:原子・電子レベルのミクロな視点!

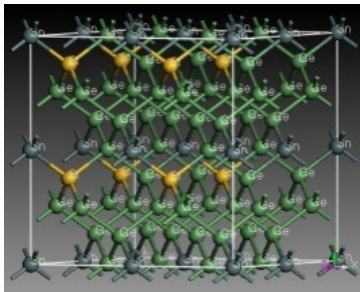
太陽電池の研究例(市販ソフトウェアを使う)

原子モデル作成



多層膜
太陽電池

$\text{Ge}_6\text{Sn}_1\text{Si}_1$
モデル

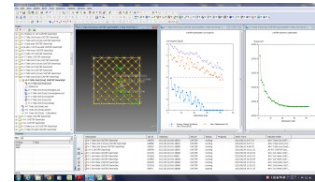


計算機シミュレーション

ソフトウェア

- CASTEP
- VASP

所有計算機

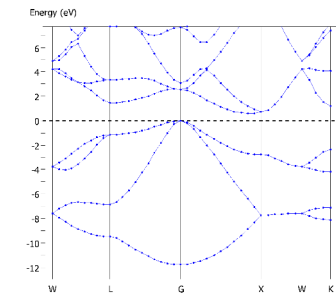


2402室
Box Clusters 7台
WS, PC 数十台
CPU: 計300コア

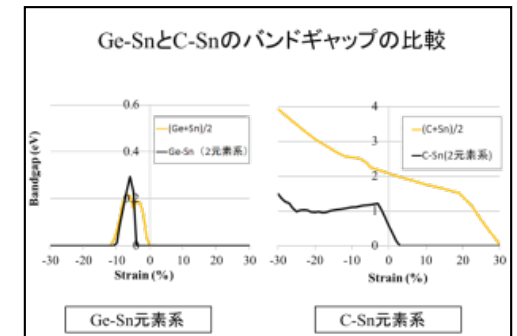


2311室
WS, PC 30台
CPU: 計200コア

計算結果の考察



Siのエネルギーバンド
IV族混晶系のバンドギャップ

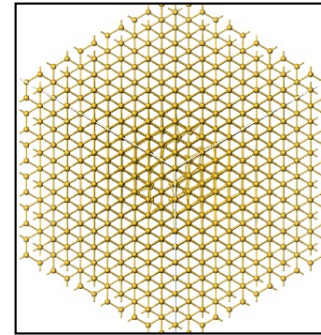


計算機性能の向上により, 計算機シミュレーションは実験と並ぶ有力な研究手法になっている.

ANNポテンシャル作成の試み (R1年度から)

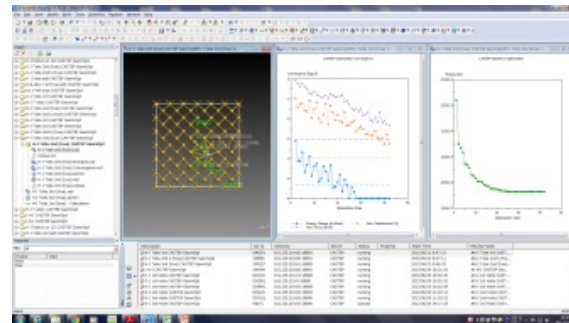
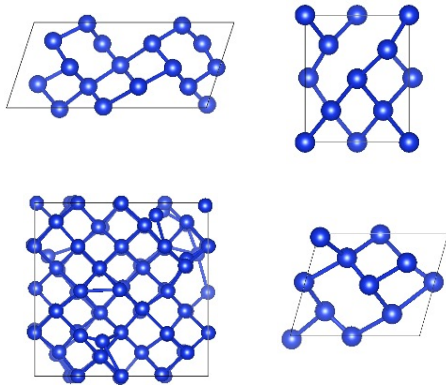
原子・電子レベルのシミュレーション

課題: 計算コストが非常に大きく,
大規模(原子数が多い)計算は
困難.



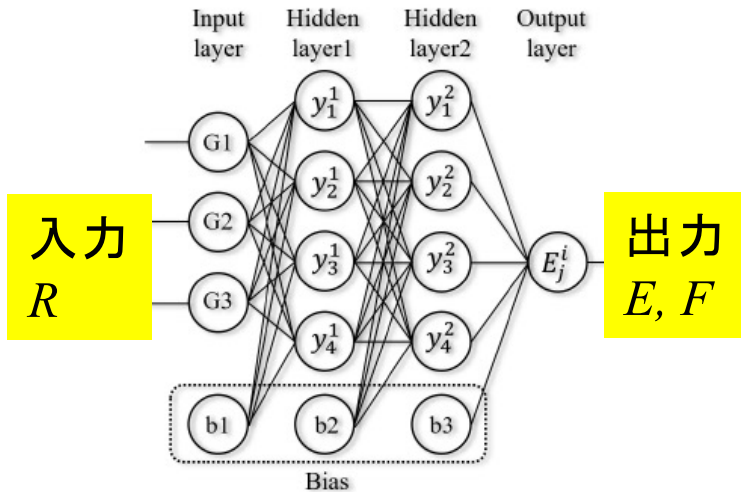
3日以上

小さいモデルを多数準備 ⇒ 電子状態計算



原子の座標 R
モデルのエネルギー E
原子に働く力 F

機械学習でANN
ポテンシャルを作成



●計算時間

	64atoms	216atoms	512atoms	1728atoms
ANN	1分未満	1~2分	5~10分	30~50分
従来法	半日~1日	3日以上	-	-

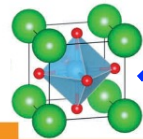
●使用メモリー

	64atoms	216atoms	512atoms	1728atoms
ANN	≥1GB			
従来法	30~40GB	80~100GB	≤200GB	≤800GB

理論計算と材料物性評価

マクロスケールシミュレーションの半導体材料への応用
(横浜国大 他、共同研究)

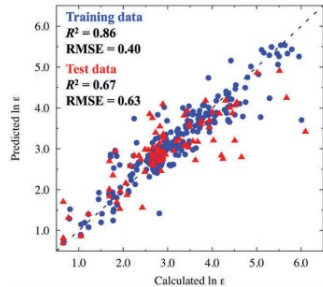
誘電率予測の
機械学習モデル



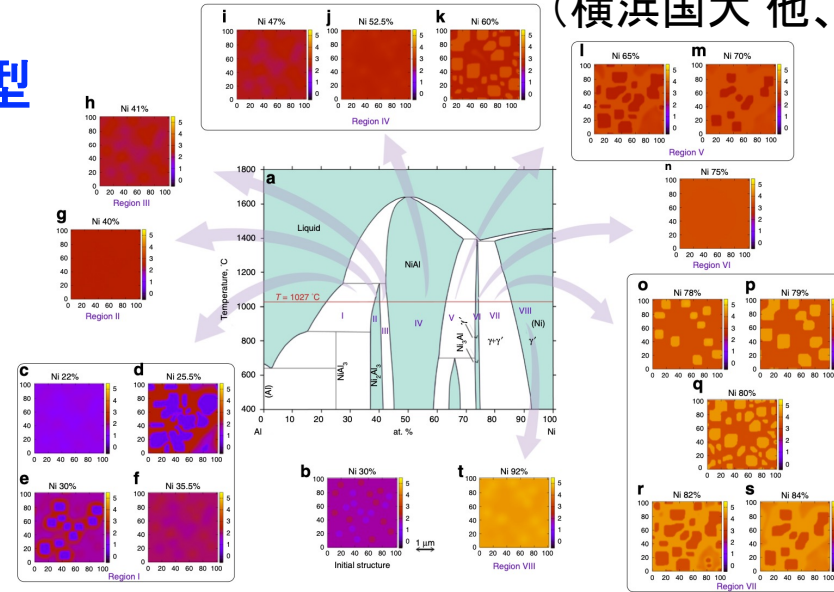
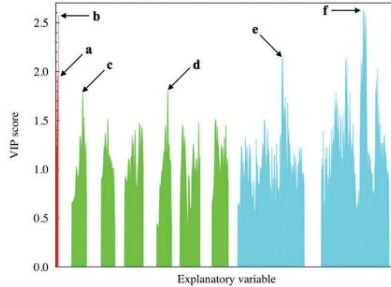
ペロブスカイト型
酸化物

Machine Learning Regression

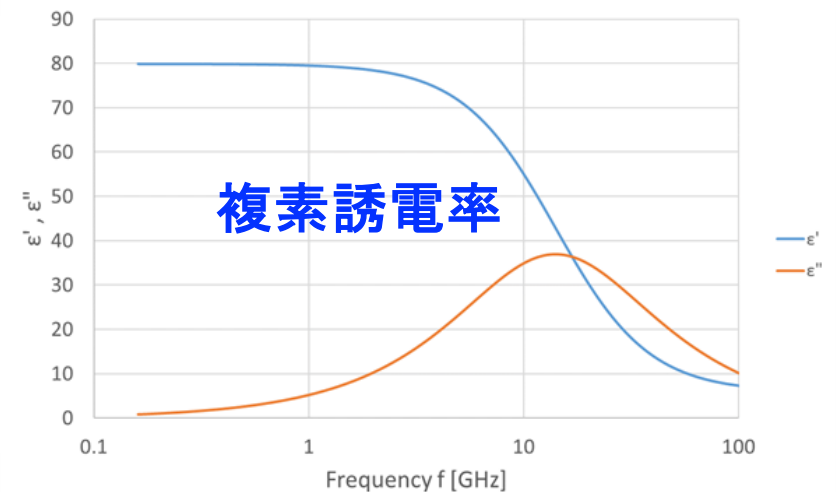
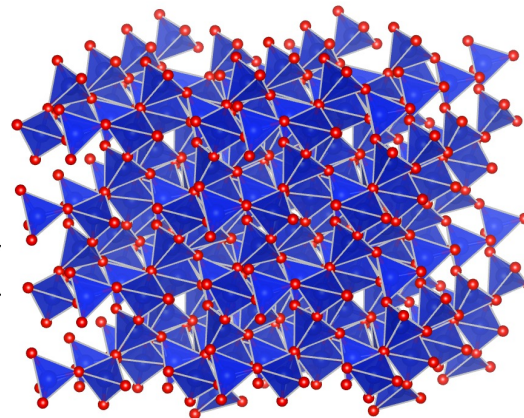
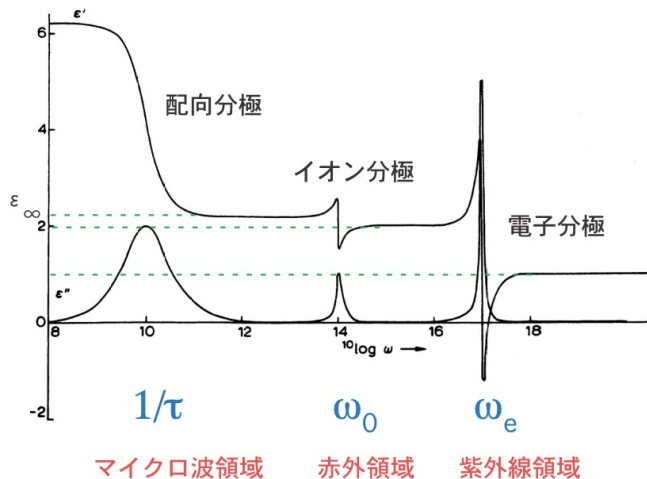
Prediction of Dielectric Constants



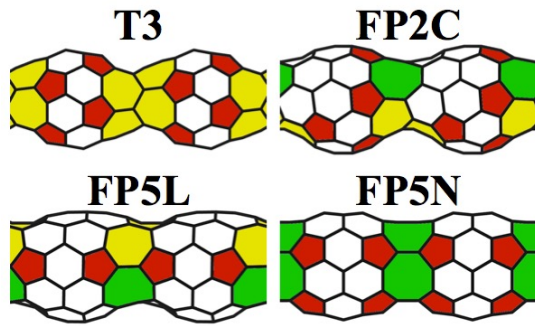
Extraction of Important Descriptors



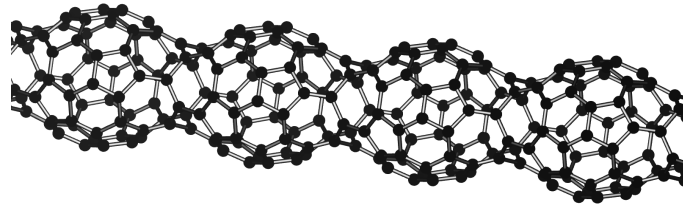
電子状態計算による低誘電率材料の探索



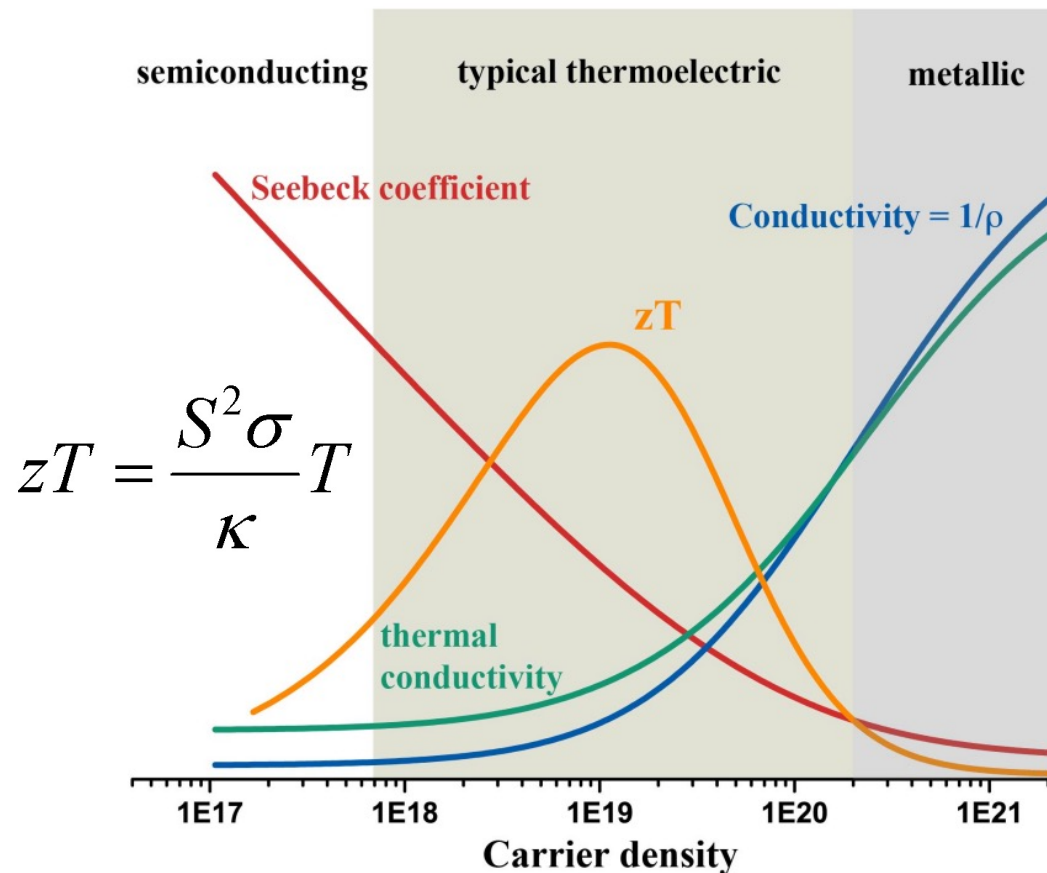
理論計算と材料物性評価



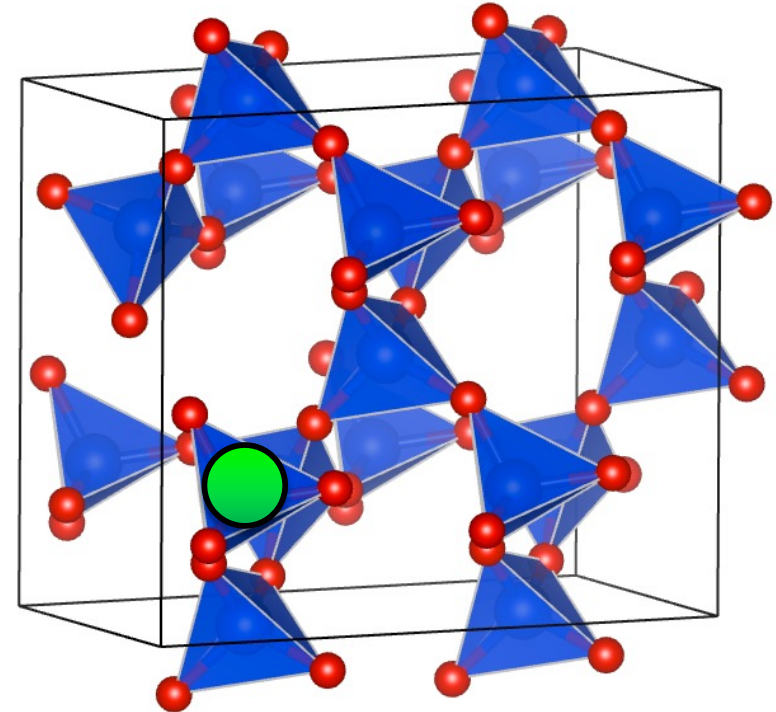
C₆₀ フラーレンポリマー



炭素材料(フラーレンポリマー)・
二酸化ケイ素(SiO₂)の
熱電特性の理論的研究
(名古屋大 共同研究)



異種元素ドーピング
二酸化ケイ素(SiO₂, α-quartz)



研究室の指導方針

企業で活躍できる技術者となるきっかけ、自信を与えます。

1) 学会発表を目指そう

- ・2021年 応用物理学会秋季学術講演会(オンライン M2 2名)
- ・国際会議GADEST 2021(オーストリア→開催中止 M2 2名)
- ・2022年 応用物理学会春季学術講演会(現地+オンライン M1 2名)
- ・2022年 国際会議Silicon Materials(日本(岡山) 参加者未定)

2) 受賞を目指そう

- ・日本材料学会 第5回半導体エレクトロニクス部門委員会
学生優秀講演賞 2019
- ・2020年度 応用物理学会中国四国支部 学術講演会発表奨励賞
- ・2021年度 応用物理学会中国四国支部 学術講演会発表奨励賞

研究室の指導方針

3) 共同研究に参加しよう（令和3年度の実施状況）

共同研究「イメージセンサー用Si」

S社, G社 D3 1名, M1 1名

共同研究「ANNポテンシャル開発と半導体への応用」

名古屋大学 D3 1名, M2 2名, M1 1名, B4 2名

卒論テーマと指導教員について

配属学生は、まず、**指導教員(末岡教授, 野田准教授)**から**テーマ(案)の説明**を受ける。テーマを決定するにあたり、配属学生には、その内容について十分に勉強する時間が与えられる(**配属後に研究に関連する内容は丁寧に説明します**)。

最終的に、**各自の希望を尊重してテーマを決定する**。従って、各指導教員が担当する学生数は、年度によって異なる。

参考) 令和元年度: 末岡教授 **3名**, 坂本准教授 **1名**
令和2年度: 末岡教授 **3名**, 坂本准教授 **2名**
令和3年度: 末岡教授 **2名**, 野田准教授 **3名**

研究室の年間スケジュール

月	卒論	備考(R1年度実績)
2022.4	教員からテーマ説明	新歓コンパ
5	ゼミでの発表(興味あるテーマ)と勉強会	飲み会2回(企業の方と)
6	研究, ゼミ報告 ↓	1Q終了飲み会
7		ビアガーデン
8		進路決定飲み会
9	ゼミでの進捗報告(3週間に1回程度), <u>中間報告会(情報電子工学講座)</u>	応用物理学会飲み会 (企業の方と)
10	研究, ゼミ報告 ↓	半導体企業見学飲み会 (企業の方と)
11		3Q終了飲み会
12		半導体企業見学飲み会 忘年会(R3年度実施)
2023.1	卒論執筆開始, 1月末を目途に完成	研究室OB会, 新年会
2	卒論提出, 発表	
3	卒業	応用物理学会飲み会 追出しコンパ

求める学生像

(どれか1つでも当てはまれば)

- 企業や他大学との共同研究に参加して、社交性や積極性を高めたい人
- パワーデバイス, 太陽電池, 誘電体などの半導体材料に興味がある人
- 機械学習, 情報科学を活用した研究に興味がある人
- 大学院に進学したい人
- 学会発表で旅行したい人
(+飲み会が好きな人)

学会を利用して知床峠に行った
M2 3名

