

デジタルツインを用いた最適化手法による SiC 結晶成長技術開発

(名大未来研¹) ○宇治原 徹¹

Development of SiC Crystal Growth Technology by Optimization Method Using Digital Twin

(¹*Institute of materials systems for sustainability, Nagoya University*)○Toru Ujihara¹

There are two major approaches to so-called process informatics. One is a method of acquiring process data in experiments and manufacturing, and analyzing the data. In the case of obtaining optimal process conditions, the process data can be analyzed to efficiently find such conditions using methods such as Bayesian optimization. The other method is to construct a surrogate model in the computer that mimics the actual phenomenon, and optimize it using the surrogate model. We use the latter method for our crystal growth optimization. Specifically, we generate data by simulating crystal growth and use machine learning to construct a model that reproduces the simulation results quickly and accurately. Using this model, millions or tens of millions of experiments are performed on the computer, and the optimal solution is then obtained.

Keywords : Process Informatics; Crystal Growth; SiC; Digital Twin

いわゆるプロセス・インフォマティクスには、大きく分けて二つのアプローチがある。一つは、実験や製造などにおけるプロセスデータを取得し、そのデータを分析する手法である。最適プロセス条件などを得る場合は、プロセスデータを分析することで、ベイズ最適化などの手法によって効率よくその条件を見出すことができる。もう一つは、コンピュータ内に実際の現象を模倣する、いわば代理モデル（サロゲートモデル）を構築し、それを用いて最適化する手法である。我々の結晶成長の最適化はこの後者の方法を用いて行っている。具体的には、結晶成長のシミュレーションによりデータを生成し、機械学習を用いて、高速で正確にシミュレーション結果を再現するモデルを構築する。このモデルを用いて、何百万回、何千万回の実験を計算機上で行い、それにより最適解を求める。

本研究では、これらの手法を SiC 溶液成長法に応用し、6 インチの結晶成長に成功している。それを例にして、手法を紹介する。

本研究は、名古屋大学、名古屋工業大学、産総研、理化学研究所、株式会社 UJ-Crystal、アイスクリスタル株式会社との共同研究として実施された。また、NEDO プロジェクト(人と共に進化する次世代人工知能に関する技術開発事業)、 NEDO プロジェクト(マテリアル先導研究)の支援のもと実施された。