

機械学習を用いた SiC 結晶成長実験条件の最適化

Optimization of crystallization conditions of SiC crystal with machine learning

名大¹, AIST² ◯村井 良多¹, 畑佐 豪記¹, 角岡 洋介¹, 林 宏益¹, 村山 健太¹, 朱 燦¹,
原田 俊太¹, 田川 美穂¹, 宇治原 徹^{1,2}

Nagoya Univ.¹, AIST², ◯R. Murai¹, G. Hatasa¹, Y. Tsunooka¹, H. Lin¹, K. Murayama¹, C. Zhu¹,
S. Harada¹, M. Tagawa¹, T. Ujihara^{1,2}

E-mail: murai_r@unno.material.nagoya-u.ac.jp

SiC 溶液法は高温で直接観察が困難な環境下で結晶成長を行うため、シミュレーションによる温度・流速の計算は非常に強力なツールとなる。しかし、温度や流速に影響を及ぼすパラメータは多岐に渡り、シミュレーションを用いて結晶成長条件を最適化するには膨大な時間を要する。我々は、第 64 回応用物理学会春季学術講演会において、熱流体シミュレーションの計算結果(温度・濃度・流速)を機械学習することで、シミュレーションを行っていない条件についても計算結果を精度良く高速に予測できることを報告した[1]。この発表では結晶回転速度とルツボ壁界面の 3 点の温度をシミュレーションのパラメータに設定した。しかし、実際の結晶成長においてルツボ壁界面の温度は、ヒーター温度、ルツボ位置やルツボ形状等の様々なパラメータにより決定されるものであり、ルツボ壁界面の温度自体も予測したい項目の一つである。そこで、本研究ではヒーター出力やルツボ位置等の、結晶成長実験において実際に検討を行う項目をパラメータにして、温度、流速分布を高速で予測するシステムの作成を試みた。

我々は、機械学習に必要な教師データを作成するため、温度やルツボ位置等、合計 10 のパラメータについてランダムに条件を振り、100 条件のシミュレーションを行った。表 1 に成長条件パラメータをまとめる。シミュレーションには結晶成長数値解析ソフト CGSim (STR Japan 株式会社) を使用した。シミュレーション完了後、成長条件パラメータと温度、流速の関係について機械学習を行った。機械学習モデルにはニューラルネットワークを使用した。表 1 のパラメータを入力として、温度と流速を出力した。中間層は 4 層、ニューロン数は 64 と設定した。

Table 1. crystallization conditions

No.	Parameters	Min	Max
1	Temperature (°C)	1700	2000
2	Crucible position (mm)	120	170
3	Depth of solution (mm)	10	40
4	Crucible diameter (mm)	60	100
5	Crucible curve (mm)	10	40
6	Seed position (mm)	-5	20
7	Seed rod size (mm)	5	30
8	Seed rotation (rpm)	0	150
9	Crucible rotation (rpm)	-20	20
10	Melt trap (mm)	40	80

図 1(a)赤点線部に示す、種結晶と Si 溶液中の温度、流速分布についてシミュレーションと機械学習により予測した結果を比較する。図 1(b)に機械学習で使用した教師データとは別に、新しい条件でシミュレーションにより計算した温度、流速分布を示す。結晶成長条件は、ヒーター温度 1906°C、種結晶回転速度 64 rpm、ルツボ回転速度 15 rpm と設定した。図 1(c)に同様の結晶成長条件で機械学習により予測した溶液中の温度、流速分布を示す。上部が低温で右下が高温となる温度分布や、ルツボ壁に沿って溶液の上部から底部に向かう流速分布等、これらの結果の傾向はよく一致した。通常のシミュレーションには 3 時間程度の時間を要したが、機械学習による予測はわずか 0.1 s 程度であった。以上の結果より、機械学習を行うことで、結晶成長条件から温度分布・流速分布を高速で予測することができるようになり、網羅的な結晶成長条件の最適化が可能になったと考えている。

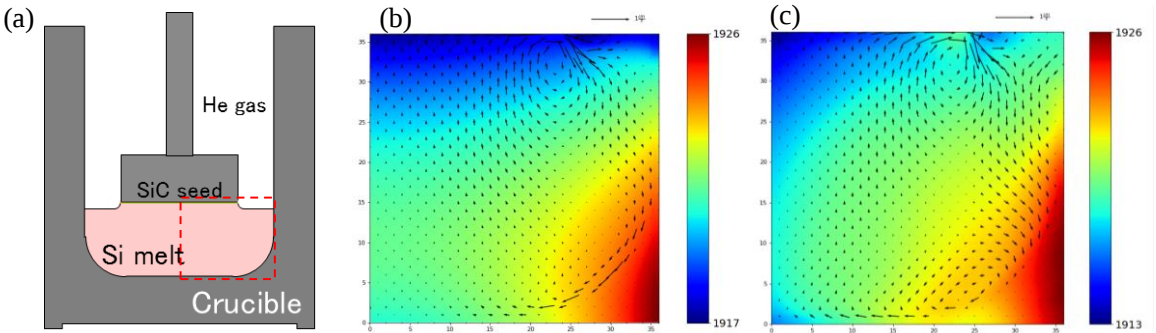


Fig. 1. The solvent temperature distribution and flow direction calculated by (a) TSSG model, (b) simulation and (c) machine learning.

[1] Y. Tunooka et al, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会(15p-MH-4)