

## SiC 溶液成長における最適条件高速探索手法の提案

## Suggestion of the method of fast search of optimized condition in SiC solution growth

名大院工, °角岡 洋介, 小久保 信彦, 原田 俊太, 田川 美穂, 宇治原 徹

Nagoya Univ., °Yosuke Tsunooka, Nobuhiko Kokubo, Shunta Harada, Miho Tagawa

and Toru Ujihara

E-mail: tsunooka@sic.numse.nagoya-u.ac.jp

【緒言】 SiC はパワーデバイス用半導体材料として期待されており、高品質な SiC 単結晶が求められている。我々は昇華法に比べ結晶の高品質化が期待できる溶液成長法に着目した。溶液成長法のプロセスでは溶液の流れや過飽和度が非常に重要であり、しばしば溶液の熱流体の数値シミュレーションが行なわれている[1]。しかし、熱流体解析は計算コストが高く、特定のパラメータに対する計算は行えるが網羅的な計算は困難であり、数値計算によるパラメータの最適化などは実質不可能である。そこで我々は、機械学習に注目した。本研究では、機械学習の一つであるニューラルネットワークを用いて SiC 溶液成長の熱流体解析結果を高速かつ網羅的に予測する手法を開発した。

【熱流体解析】熱流体解析には OpenFOAM を用いた。計算領域は溶液のみとした。軸対称の仮定をおいて、定常状態における温度・濃度・流速を解いた。また成長パラメータは、るつぼ壁界面の 3 点の温度( $2133\text{ K} < T_1, T_2, T_3 < 2153\text{ K}$ )および結晶回転速度( $0 < \omega < 150\text{ rpm}$ )とした。パラメータをランダムに設定し、学習用のデータを用意するために 300 通りの熱流体シミュレーションを行い、さらに、機械学習の結果を評価するために、学習に使用しないテストデータを 150 通り計算した。計算結果の一例として、流速と過飽和度の分布を Fig. 1(a)に示す。流れに伴って過飽和度分布が形成されている様子がわかる。

【機械学習による予測器の構築】予測器の構築のため、ニューラルネットワークによる回帰を行った。解析には TensorFlow を用いた。特徴量には、4 つの成長パラメータに加え、空間的な分布を予測するために座標を用い、教師データには 300 通りの計算から得た流速・過飽和度分布を用いた。さらに、回帰結果の評価として、予測器による予測結果とテストデータとの重相関係数  $R$  を求めた。Fig. 1 に同じ成長パラメータを用いたときの熱流体解析の結果と、今回構築した予測器による予測結果を示す。矢印は流速で、コントラストは過飽和度である。 $R$  の値は、流速(動径方向)・流速(鉛直方向)・過飽和度についてそれぞれ  $0.991 \cdot 0.989 \cdot 0.982$  であり、精度よく予測できていることがわかる。予測に要した計算時間は 0.1 秒程度で、これは熱流体解析の約 10000 倍の速さである。また、予測器により  $T_1, \omega$  の 2 つのパラメータについて、結晶下の鉛直方向の流速の平均値を予測した。このように、機械学習を用いれば知りたい情報の高速かつ網羅的な探索が可能である。

## 【参考文献】

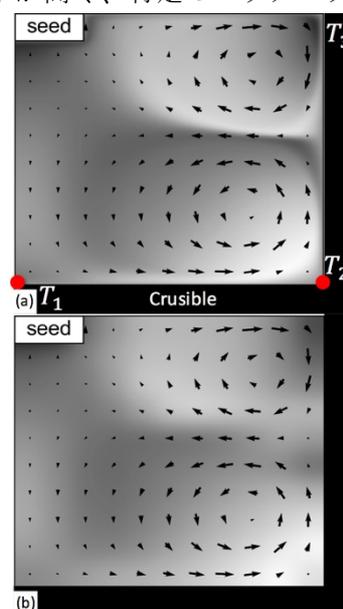
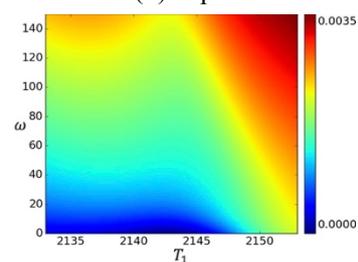
[1] T. Umezaki, *et al.*, Mater. Sci. Forum 778-780 (2014) 63-66.

Fig.1 Example of (a)Test data and (b)its prediction.

Fig.2 Prediction of vertical velocity about  $T_1$  and  $\omega$ .