AI 技術で結晶成長研究開発を桁違いに高速にする - SiC 結晶成長を例にして -

AI technologies Speed-up Crystal Growth Research and Development

(SiC Solution Growth)

名大未来研 °宇治原 徹,

Nagoya Univ., °Toru Ujihara

E-mail: ujihara@nagoya-u.jp

半導体結晶成長の技術開発は非常に時間を要する。例えば、シリコン基板のためのバルク成長技術については、1958年に高品質結晶成長技術が発表されて以来、現在の300 mmサイズになるまでに、30年以上の年月を費やしている。ところで、SiCは次世代パワーデバイス用半導体として期待されている。現在、商用のSiC基板結晶はすべて昇華法によって製造されているが、さらなる高品質化を目指し、我々は溶液成長法による高品質SiCバルク結晶成長技術の開発を行ってきた。これまでに、結晶成長過程に生じる転位欠陥の構造変換現象を活用することで、極めて高品質の結晶を得ている。

次なる課題は、この品質を維持しつつ大口径化することである。溶液成長法による高品質SiC結晶の実現には、溶媒中の温度分布、組成分布、流れ分布を綿密に制御する必要がある。しかしながら、2000°C近い結晶成長温度において、これらの分布を観測することも直接制御することも困難である。また、結晶成長においては非常に多くのパラメータがあり、これらの分布を予測することも非常に難しい。このような場合、しばしばシミュレーションを用いる。しかし、結晶成長のような熱流体シミュレーションは非常に長時間の計算を必要とするため、やはり所望の分布を実現するためのパラメータ最適化は、困難であることには変わらない。我々は、この課題を解決するために、機械学習を活用し結晶成長シミュレーションを即座に予測するモデルの構築を行った。その結果、0.1秒以下で結晶成長シミュレーションの結果を予測することができるようになった。

この予測モデルは一種の関数である。そのため、最適条件の探索なども行え、つまり、我々は結晶成長プロセスを計算機上でデザインすることが可能となる。現在、我々は2インチ、3インチの結晶成長を行っており比較的素早く最適条件を見出すことができている。また、複数の条件での成長を組み合わせた複雑なシーケンスの設計なども可能となり、新たな制御法の可能性も見えてきた。最近では、気相成長への展開にもチャレンジしている。また、このモデルを用いたリアルタイムの可視化技術への展開についても紹介する。

これらは名古屋大学学生である角岡洋介氏、畑佐豪記氏、林宏益氏、遠藤友樹氏、安藤圭理氏、さらに沓掛健太郎講師、鳴海大翔研究員、朱燦特任助教、原田俊太講師の成果である。