

SiC 溶液成長における熱流体解析の機械学習を用いたパラメータ影響の可視化

Visualization of influence of parameters in solution growth of SiC

using machine learning of thermo-fluid analysis

名大未来機構¹, 名大未来研², 名大院工³, 名大 VBL⁴, 産総研 GaN-OIL⁵

○沓掛健太郎¹, 角岡洋介^{2,3,5}, 長田圭一^{2,3}, 安藤圭理^{2,3}, 林宏益^{2,3},

朱燦^{2,3}, 鳴海大翔^{2,4}, 原田俊太^{2,3}, 田川美穂^{2,3}, 宇治原徹^{2,3,5}

Nagoya Univ.¹, AIST GaN-OIL² ○Kentaro Kutsukake¹, Yosuke Tsunooka^{1,2}, Keiichi Osada¹, Keisuke

Ando¹, Lin Hongyi¹, Can Zhu¹, Taka Narumi¹, Shunta Harada¹, Miho Tagawa¹, and Toru Ujihara^{1,2}

E-mail: kutsukake@mirai.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】SiC 溶液成長では、溶液の複雑な流れを解析するため、有限要素法による熱流体解析が用いられるが、高コストシミュレーションであるため計算に時間がかかる。我々は、熱流体解析結果をニューラルネットワークによって機械学習することで、熱流体解析結果を瞬時にかつ高精度に予測するモデルを構築し[1]、最適な条件の探索に成功している[2]。本研究では、機械学習モデルの高速予測という特徴を活かし、育成条件パラメータ空間内での目的関数（例えば過飽和度）を網羅的に計算し、その分布の可視化を行った。

【方法】図 1 に示す成長条件パラメータのうち、上軸回転速度(U_rot)、ルツボ回転速度(L_rot)、ルツボ位置の 3 パラメータをランダムに振った条件で計算した 150 通りの熱流体解析結果を、表 1 の条件でニューラルネットワークを用いて機械学習し、予測モデルを作成した。次にこのモデルを用いて、結晶成長に強く影響を与える目的関数として、結晶表面の過飽和度(σ)および結晶表面近傍の水平方向の流速の大きさ(V)を、結晶半径方向の平均値として求めた。この計算を各パラメータセットに対して網羅的に行うことで、パラメータ空間内での目的関数の分布を求めた。

【結果】図 2 に、るつぼ位置が 0 mm での U_rot および L_rot に対する σ および V の分布を示す。それぞれ特徴的な分布が見て取れる。 σ の分布の等高線は全体として右肩上がりを示し、 σ は図中左上の条件（両軸とも回転速度 0）で最も小さく、図中の右下に行くほど（軸の相対的な回転速度が増加するほど）大きくなる傾向が示された。また V は図中の左下および右上の条件で大きくなる傾向が示されたが、それぞれ結晶表面で内向きおよび外向きの流れであった。

【まとめ】以上のように、機械学習モデルを作成することで高速予測を可能とし、網羅的計算によってパラメータ空間内での目的関数の分布を可視化した。各パラメータの影響を可視化して網羅的に掴むことが可能となるため、単に最適条件がわかるだけでなく、目的関数条件を満たすパラメータ範囲（プロセスウィンドウ）やパラメータ変動に対する応答性（ロバスト性）を評価することも可能である。このように本方法は、結晶成長プロセス開発の強力なツールとなる。

[1] 角岡洋介他, 2017 年秋季応用物理学会, 15p-MH-4. [2] 角岡洋介他, 2018 年春季応用物理学会, 19a-D103-5.

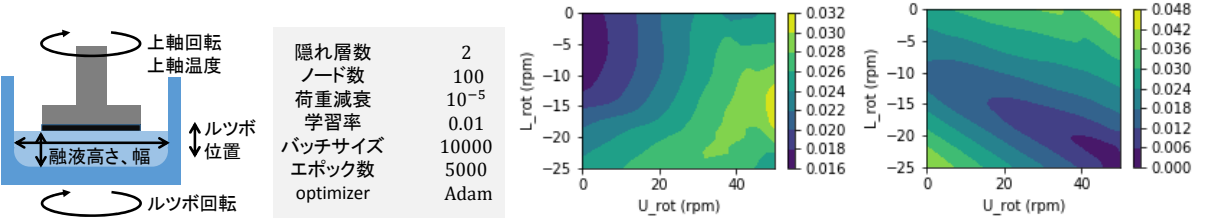


FIG 1. Growth parameters. Table 1. Hyper parameters.

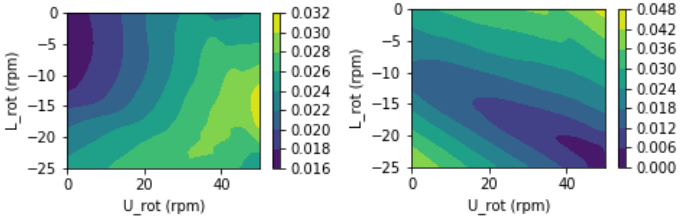


FIG2. Variation of σ (left) and V (right, m/s).