

SiC 溶液成長における熱流体解析と機械学習を用いた最適化手法の提案

Suggestion of optimization method using thermo-fluid analysis and machine learning in SiC solution growth

名大¹, 産総研 GaN-OIL², °角岡 洋介^{1,2}, 小久保 信彦^{1,2}, 原田 俊太¹, 田川 美穂¹,
宇治原 徹^{1,2}

Nagoya Univ.¹, AIST GaN-OIL², °Yosuke Tsunooka^{1,2}, Nobuhiko Kokubo^{1,2}, Shunta Harada¹,
Miho Tagawa¹ and Toru Ujihara^{1,2}

E-mail: tsunooka@unno.material.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。そこで、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。これまでに我々は、ニューラルネットワークにより、SiC 溶液成長の熱流体解析を瞬時にかつ高精度に予測するモデルを構築することに成功している[1]。このモデルを用いれば、原理的には最適な入力のパラメータを見いだすことができる。本研究では、この予測モデルを用いて、最適な条件を探索するための方法論を確立した。

【流体解析の機械学習】まず、熱流体解析と機械学習により、予測モデルを構築した。計算する系の概略図および成長のパラメータを Fig. 1 に示す。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。パラメータをランダムに設定し、800 通りの流体解析を行なった。ニューラルネットワークによる回帰には、特徴量には 8 つの成長のパラメータに加え、400 点の空間位置と結晶部を考慮するための溶液の有無の情報を用いた。流速・過飽和度分布の予測モデルを構築した。

成長のパラメータの最適値の探索手法を考案した。Fig. 2 にパラメータ最適化の概念図を示す。まず、適当なパラメータの初期値を与える。予測モデルを用いて、流速・過飽和度分布がただちに計算できる。次に、流速・過飽和度分布から、理想の成長条件を満たすような目的関数を定義する。この目的関数が最小となるとき、パラメータは最適値となる。ここで、ニューラルネットワークでは目的関数のパラメータ微分は容易に求まる。この微分の値を用いて、勾配法によりパラメータを初期値から最適値へ近づけていく。この方法では、初期値に依存した局所解に辿り着くことで、様々なパラメータを探索することができる。

【パラメータの最適化】ここでは、成長速度が速く、均一に成長し、るつぼ壁で雑晶を生じない条件を考える。この条件をそれぞれ、結晶下 1 mm の過飽和度の平均値が大きく、分散が小さく、るつぼ壁近傍の過飽和度の 2 乗が小さいことに置き換え、目的関数はこれらの和とした。ランダムに決定したパラメータの初期値を 100 通り用意し、それぞれ最適化した。最適条件における流速・過飽和度の予測の例を Fig. 3 に示す。このように、最適化の方法を用いれば、任意の目的を達成する様々な条件を多次元のパラメータ空間中から探索することができる。

【参考文献】

[1] 角岡洋介, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会, 横浜, 2017 年 3 月.

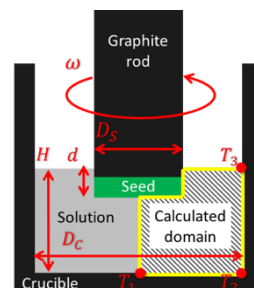


Fig.1 Schematic and growth parameters.

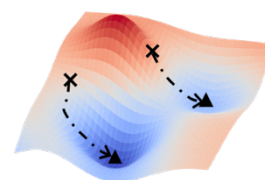


Fig.2 Schematic of optimization.

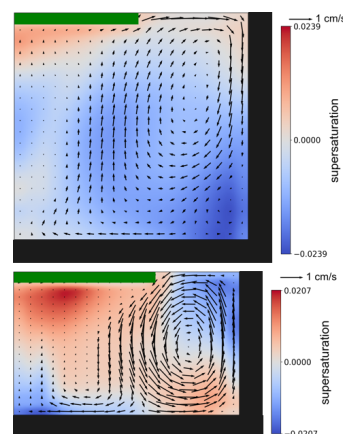


Fig.3 Predictions of optimum conditions.