

大口径化にむけた機械学習による SiC 溶液成長の最適成長条件の決定

Optimization of growth condition of SiC solution growth by the predication model constructed by machine learning for larger diameter

名大未来研¹, 名大院工², 産総研³, 理研 AIP⁴, 名大 VBL⁵ ◦宇治原徹^{1,2,3}, 角岡洋介^{2,3},
遠藤友樹², 朱燦¹, 沓掛健太郎⁴, 鳴海大翔⁵, 三谷武志³, 加藤智久³,
田川美穂^{1,2}, 原田俊太^{1,2}

IMaSS Nagoya Univ.¹, Grad. School of Eng. Nagoya Univ.², AIST³, RIKEN⁴, VBL Nagoya Univ.⁵,
Toru Ujihara^{1,2,3}, Yosuke Tsunooka^{2,3}, Tomoki Endo², Can Zhu¹, Kentaro Kutsukake⁴,
Taka Narumi⁵, Takeshi Mitani³, Tomohisa Kato³, Miho Tagawa^{1,2}, Shunta Harada^{1,2}

E-mail: ujihara@nagoya-u.jp

我々は、マクロステップによる転位変換現象を活用することで、溶液法による高品質 SiC 結晶成長を実現している。しかし、そのサイズはまだ小さく、今後、大口径化に向けた開発が必要だが、そのための成長条件最適化には大きな困難を伴う。我々は結晶成長シミュレーションと機械学習を活用することで、SiC 溶液成長における溶媒内の温度分布、組成分布、流速分布を即座に予測できる高速予測モデルの構築にすでに成功している。本研究では、小さなサイズの結晶成長で得られた知見に基づき、3 インチ超の結晶成長において最適と考えられる溶液状態を想定し、その状態を実現するための成長条件を即座に予測することを試みた。

最初にグローバルシミュレーションにより機械学習のためのデータを生成し、計算条件・結果の関係を機械学習の方法で学習し予測モデルを構築した。成長パラメータとして上軸回転速度、るつぽ回転速度、るつぽ内径、メニスカス高さ、るつぽのコイルとの相対位置の 5 つとした。この予測モデルを用いて成長条件の最適化を行なった。本研究では、遺伝的アルゴリズムを用いてパレート最適解を求めた。高品質結晶を得るための最適条件として、種結晶直下の過飽和度と、流れの向きについて目的関数を設定した。

多目的最適化によって得られた最適解を図 1 に示す。また、最適解は k-means 法を用いて、育成パラメータを基に 5 つにクラスタリングされている。本手法では、目的を満たすための条件が複数提案され、その中から選んで成長を行うことになる。図 2 に本研究によって成長した 85mm 径の結晶を示す。比較的平坦で良好な結晶が成長できている。

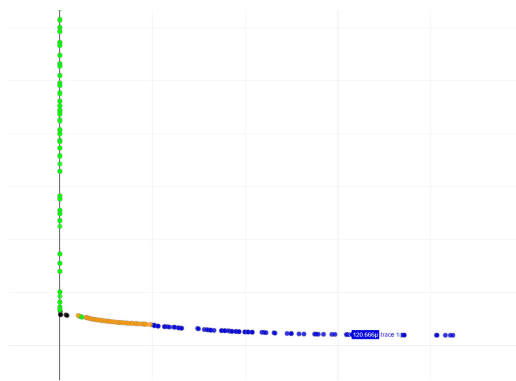


Fig. 1 Results of Pareto optimization. Both axes mean two objective functions. The candidates are categorized into five groups indicating different strategies to satisfy the objectives.

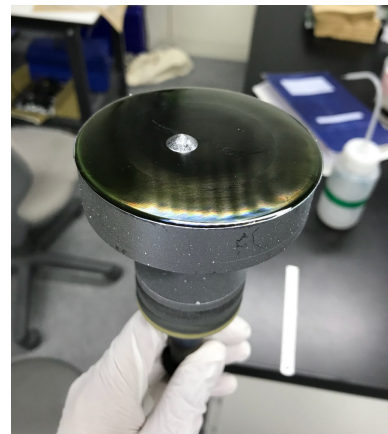


Fig. 2 85mm diameter SiC crystal grown by solution method under the condition optimized by the machine learning prediction model