

機械学習を用いた昇華法 SiC 結晶成長シミュレーションの高速予測

High-speed prediction of crystallization conditions of SiC PVT method using machine learning

名大院工¹, 名大未来研², 産総研 GaN-OIL³, 名大 VBL⁴, 理研 API⁵○(M1)江 逸群^{1, 2}, (D2)角岡 洋介^{1, 2, 3}, (D1)畑佐 豪記^{1, 2}, 鳴海 大翔⁴, 沓掛 健太朗⁵, 原田 俊太^{1, 2}, 田川 美穂^{1, 2}, 宇治原 徹^{1, 2, 3, 4}.Grad. School of Eng. Nagoya Univ.¹, IMASS Nagoya Univ.², GaN-OIL AIST³, VBL Nagoya Univ.⁴, RIKEN AIP⁵ ○Jiang Yiqun^{1, 2}, Yosuke Tsunooka^{1, 2, 3}, Goki Hatasa^{1, 2}, Taka Narumi⁴, Kentaro Kutsukake⁵, Shunta Harada^{1, 2}, Miho Tagawa^{1, 2}, Toru Ujihara^{1, 2, 3, 4}

E-mail: jiang@unno.materail.nagoya-u.ac.jp

【緒言】昇華法による SiC の結晶成長は直接観察や測定が困難な高温環境下で行われるため、シミュレーションによる温度・流速分布の予測は大口径・高品質結晶実現への非常に強力なツールとなる。しかし、一回のシミュレーションには長時間を要し、炉内部材の形状や各種条件など、温度や流速に影響を及ぼす成長条件パラメータの組み合わせは無数に存在するため、シミュレーションで最適な条件を見つけるには膨大な時間がかかる。我々はこれまでに、機械学習を活用して溶液法 SiC 結晶成長の熱流体シミュレーション結果(温度・流速)を高速で予測するシステムを報告している[1]。この方法を応用し、昇華法の SiC 成長シミュレーションの結果を高速で予測するモデルを構築した。

【計算方法】機械学習に必要な教師データを作成するため、温度や圧力等、合計5つの成長条件パラメータをランダムに振った100条件のシミュレーションを行った。シミュレーション完了後、機械学習を行う領域(図(a)赤枠内)の温度と流速を抽出し、成長条件パラメータとそれらの関係について機械学習を行った。

【結果】図(b)に機械学習で使用した教師データとは別の成長条件パラメータにおける(a)シミュレーションおよび図(c)機械学習によって予測した温度と流速分布を示す。機械学習で予測した温度および流速の分布は、シミュレーション結果をほぼ再現していることが分かる。通常のシミュレーションには20分程度の時間を要したが、機械学習による予測はわずかに0.1s程度であった。以上の結果より、昇華法の結晶成長シミュレーションにおいても、機械学習を活用することで温度・流速分布を高速に予測可能であることが分かった。この結果は、昇華法 SiC の結晶成長条件の最適化に貢献すると考える。

【参考文献】 [1] Y. Tsunooka et al., CrystEngComm, **20**, (2018), 6546.

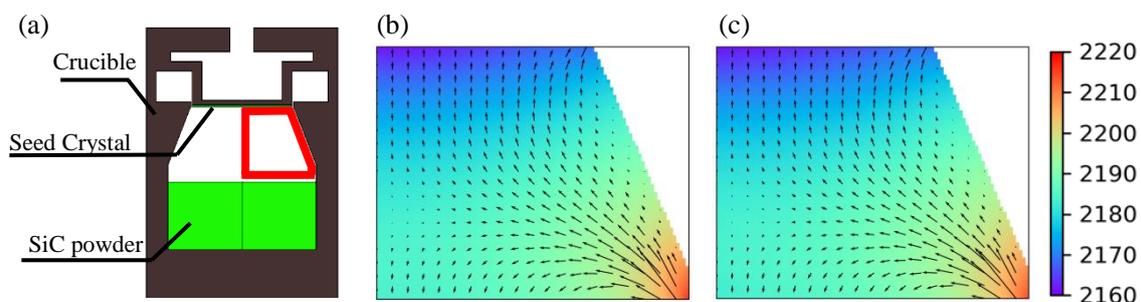


Fig. (a) Schematics of PVT, (b) CFD simulation and (c) prediction by machine learning; arrows and color-map are flow direction and temperature distribution, respectively.