機械学習による結晶成長シミュレーション回帰モデルの構築とその応用（結晶成長における CPS 実現を目指して）

Regression model of crystal growth simulation constructed by machine learning

名大未来研 [1]，名大院工 [2]，産総研 [3]，理研 AIP[4]，名大 VBL[5] ◦宇治原 徹 [1, 2, 3]，角岡洋介 [2, 3]，朱燦 [1]，沓掛健太朗 [4]，鳴海大翔 [5]，田川美穂 [1, 2]，原田俊太 [1, 2]

IMaSS Nagoya Univ.[1], Grad. School of Eng. Nagoya Univ.[2], AIST[3], RIKEN[4], VBL Nagoya Univ.[5],

Toru Ujihara[1, 2, 3], Yosuke Tsunooka[2, 3], Can Zhu[1], Kentaro Kutsukake[4],

Taka Narumi[5], Miho Tagawa[1, 2], Shunta Harada[1, 2]

E-mail: ujihara@nagoya-u.jp

我々の究極の目標は、結晶成長におけるサイバー・フィジカル・システム(Cyber-Physical-System: CPS)の実現である。現在、自動車開発などでは CPS の一例であるモデルベース開発が盛んに行われている。この手法では，開発の初期段階をコンピュータ内に構築されたモデル（シミュレータ）を用いて行われ，ある段階から実際の物理的な開発へと移行する。これにより，飛躍的に開発期間が短縮されている。これが自動車開発で実現できる理由の一つとして，高速で正確なシミュレーションが存在する点が挙げられる。この手法を結晶育成技術開発に持ち込みたい。しかし，結晶成長においては，そのようなシミュレータはない。特に，熱流体計算が時間を要する。

我々は炭化ケイ素(silicon carbide: SiC)の溶液成長法の開発を行っている。SiC は次世代パワーデバイス用半導体として期待され，一部では実用化が始まっている。デバイスの低コスト化や信頼性向上においては，さらなる高品質化，特に転位欠陥の低減が求められているが、我々の手法では実際に超高品質結晶を実現した。しかし、当時の結晶サイズは高々10 mm 角であり，それに対して必要とされているのは 6 inch, 8 inch である。つまり、大口径化のための最適化が必要となる。

我々は、最近，機械学習で SiC 溶液成長における熱流体シミュレーションの結果を高速に予測するモデルを構築した[1]。このモデルを用いることで，シミュレーション結果を桁違いに高速に求めることができるようになった。つまり結晶成長においてモデルベース開発ができる可能性が出てきたのである。本講演では、機械学習による高速モデル構築の概要を紹介し，その応用として，結晶成長条件の最適化の例を示す。

SiC 溶液成長では、高温溶液中の温度分布，組成分布，流れ分布を制御する必要がある。これらを予測するモデルは次のように構築する。最初に，ランダムに結晶成長条件を選択し，数百通りのシミュレーションを行う。次に、溶液中の任意の場所における温度，組成，流速を予測するモデルを機械学習によりニューラルネットワークによるモデルを構築する。これにより、シミュレーション結果を桁違いに高速に推定することが可能になる。ところで、成長実験のパラメータは大きく分けると二種類に分けられる。一つは設定温度や坩堝の回転速度といった制御パラメータであり，もう一つは坩堝や断熱材などの形状やサイズといった設計パラメータである。実際の実験を考えた時に，後者は一度決めると変更しがたいパラメータである。しかし，この予測モデルは装置デザインに関するパラメータも最適化することができる。実際に、この手法を用いて結晶成長条件の最適化を行い、現在では 3 インチ以上の結晶成長条件の探索にも活用できている。

[1] Y. Tsunooka, et al. CrystEngComm **20**, (2018), 6546.