

SiC 結晶成長シミュレーションの機械学習

Machine Learning of Crystal Growth Simulation for Silicon Carbide

物材機構¹, 名大院工², 理研³, 名大 IMaSS⁴

○小山 幸典¹, 角岡 洋介², 沓掛 健太朗³, 宇治原 徹⁴

NIMS¹, Nagoya Univ.², RIKEN³, Nagoya Univ. IMaSS⁴

°Yukinori Koyama¹, Yosuke Tsunooka², Kentaro Kutsukake³, Toru Ujihara⁴

E-mail: KOYAMA.Yukinori@nims.go.jp

半導体材料を本格的に実用化するためには、その結晶成長プロセスを最適化することが不可欠である。我々は、次世代パワー半導体として注目されている炭化珪素(SiC)の溶液法によるバルク単結晶の成長に注目している。溶液法による結晶成長プロセスを理解するためには、溶液の流速や温度分布などの状態を把握することが重要であるが、溶液状態を実験的に観測することは困難である。また、数値シミュレーションによる熱流体解析も行なわれているが、定常状態を得るために数時間もの計算が必要であることから、研究者のアイデアに対して即座に情報を提供することは未だ困難である。そこで、本研究では、数値シミュレーションの結果に機械学習を適用し、プロセス条件から溶液状態を推定する順問題モデルを構築、また、これとは逆に、溶液状態からプロセス条件を推定する逆問題モデルを構築したので、これらの結果について報告する。

熱流体解析は、2次元軸対称モデルを用いた有限体積法により行なった。溶液の形状は共通とし、プロセス条件を変えた計算を行なった。流速や温度などの溶液状態は等間隔直交メッシュ上でサンプリングした。順問題モデルはプロセス条件を説明変数、溶液状態を目的変数とし、逆問題モデルは融液状態を説明変数、プロセス条件を目的変数として構築した。

図1に数値シミュレーションと機械学習モデルで得られた流速分布の例を示す。一見したところでは、両者はかなり似ている。詳細を見ると、流速が遅い図右下の領域(外周底部に相当)において渦の形状に差異が見られるが、溶液の流れを把握するためには十分な精度と思われる。この機械学習モデルは、溶液状態の推定時間は10ミリ秒以下であり、研究者のアイデアに対してほぼリアルタイムで溶液状態を示すことが可能である。発表では、推定精度や逆問題モデルについても議論する。

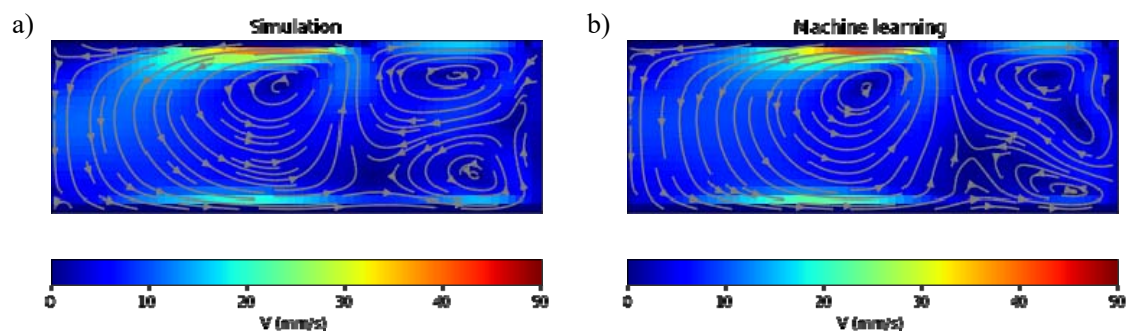


Fig. 1 Flow velocity a) calculated by simulation, and b) predicted by a machine learning model.