

顕微ラマン分光法による GaN 中の転位欠陥解析と機械学習の活用

Dislocation characterization in GaN crystals with micro-Raman spectroscopy and various applications of machine learning for materials researches

名大未来研¹, 名大院工², 産総研³ ○宇治原徹^{1,2,3}, 小久保信彦^{2,3}, 角岡洋介^{2,3}, 藤榮文博²,

井爪将^{2,3}, 恩田正一¹, 山田永³, 清水三聡³, 原田俊太^{1,2}, 田川美穂^{1,2}

IMaSS Nagoya Univ.¹, Grad. School of Eng. Nagoya Univ.², AIST³, ○Toru Ujihara^{1,2,3},

Nobuhiko Kokubo^{2,3}, Yosuke Tsunooka^{2,3}, Fumihiko Fujie², Sho Inotsume^{2,3}, Shoichi Onda¹,

Hisashi Yamada³, Mitsuaki Shimizu³, Shunta Harada^{1,2}, Miho Tagawa^{1,2}

E-mail: ujihara@nagoya-u.jp

【はじめに】 最近、機械学習は研究に必須のツールになりつつあり、これを使いこなすことが求められている。我々は、SiC や GaN の結晶成長や欠陥評価について、機械学習の様々な活用方法について可能性を検討し、その有効性を示してきた。GaN に関しては、顕微ラマン分光法を用いた転位評価において、機械学習を用いた転位種の同定を試みている。また、結晶成長に関しても、SiC 溶液成長における成長条件の最適化において、機械学習の有用性を示し、さらに気相成長への展開についても検討を始めている。

【GaN 欠陥評価における活用例】 GaN 結晶の転位の評価には、X 線トポグラフィ、エッチングやフォトルミネッセンスなどがしばしば用いられる。それに対して我々は、ラマン分光法に着目し、ラマン散乱光のピークシフトから局所的な歪み分布を観察し、そこから転位種を同定する手法を確立した[1, 2]。この方法は比較的汎用性の高い評価装置を用いて、非破壊で転位の観察が可能で、今後、顕微フォトルミネッセンス観察と組み合わせることで、さらに強力な手法となりうる。Fig. 1 に、ラマン分光法により得られた E_2^H ピークシフトのマッピング像の例を示す。この像は、そのまま貫通転位の歪み場を表している。 E_2^H ピークのシフトにせん断歪みの与える影響は小さいことから、これらの歪み場は主に刃状転位によるものであり、またピークシフトの向きの異方性からバーガーズベクトルの向きを特定することも可能である。これらのピークシフト像を複数取得し教師データとし、機械学習によりニューラルネットワークを構築することで、ピークシフト像からバーガーズベクトルの向き、および混合転位と刃状転位の分類ができる。

【結晶成長などへの活用】 我々はこれまでに SiC 溶液成長に関する研究開発を行ってきた。結晶成長プロセスにおいては、非常に多くのパラメータが存在する。仮に結晶成長メカニズムを明らかにしたとしても、実際の装置で最適な状況をいかに実現するか、それには試行錯誤的な最適化が必要となり、これが結晶成長プロセス開発を困難にさせていると言っても過言ではない。我々は、シミュレーションと機械学習を組み合わせることで、高温融液内部の状態を即座に予測することに成功している[3]。このモデルを活用すると最適な状態を実現するための成長パラメータを即座に知ることもできる。現在、この手法を気相成長法へ拡張することも検討している。

[1] N. Kokubo et al., Appl. Phys. Express **11**, 061002(2018) [2] N. Kokubo et al., Appl. Phys. Express **11**, 111001(2018) [3] Y. Tsunooka et al., CrystEngComm **20**, 6546 (2018)

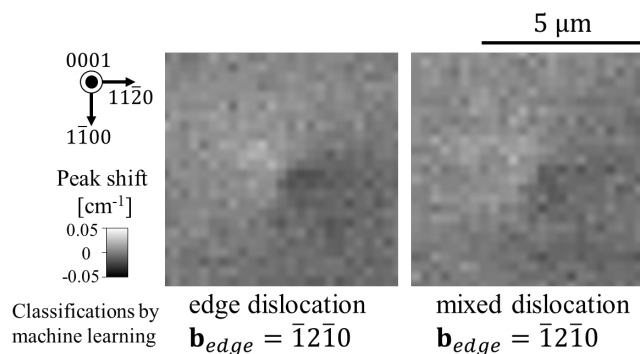


Fig. 1 Results of Raman mapping images and classifications by machine learning.