

Si エピタキシャル成長プロセスにおける 適応的な制約を用いたベイズ最適化

Bayesian optimization for epitaxial growth process of Si thin film
using adaptive constraints

名大院工¹, 理研 AIP², グローバルウェーハズ・ジャパン³, 名大未来研⁴,
名大院医⁵, 名工大院工⁶, 産総研 GaN-OIL⁷

○長田圭一^{1,4}, 沓掛 健太郎^{2,4}, 山本 純³, 山下 茂男³, 小寺 崇³,

永井 勇太³, 堀川 智之³, 松井 孝太⁵, 竹内 一郎^{2,6}, 宇治原 徹^{1,4,7}

Nagoya Univ.¹, RIKEN², GlobalWafers Japan³, Nagoya Inst. Tech.⁴, GaN-OIL, AIST⁵

°Keichi Osada¹, Kentaro Kutsukake^{1,2}, Jun Yamamoto³, Shigeo Yamashita³, Takashi Kodera³,

Yuta Nagai³, Tomoyuki Horikawa³, Kota Matsui¹, Ichiro Takeuchi^{2,4}, Toru Ujihara^{1,5}

E-mail: osada@unno.material.nagoya-u.ac.jp

【緒言】回帰の不確実性を利用して探索と活用をバランス良く行うベイズ最適化は、少ない実験回数でより良い条件を得る逐次最適化法として広く利用されている。本研究では、化学気相堆積法 (CVD) による Si エピタキシャル成長への応用を報告する。

【方法】ガス流量、温度、基板位置など 12 パラメータを実験条件として、CVD による Si エピタキシャル成長を行った。その後、各試料について、膜厚均一性やスリップ転位の累積長を含む、5 つの成膜品質と成長速度の評価を行った。最適化は、まず、ランダムな実験条件 162 セットについて、成長と評価を行い初期データとした。次に、品質の要求値を全て満たし、かつ、成長速度を最大化するように、制約付きベイズ最適化を用いて実験を 156 回行った。この最適化では、実際の実験特有の課題であるパラメータの評価コストや装置の使用制限、未判明な実験不可能な条件を考慮し、状況に応じて各制約を適応的に用いた。

【結果と考察】図 1 にベイズ最適化によって得られた条件での実験結果 (成長速度と膜厚均一性) を示す。成長速度は最適化前の値を、膜厚均一性は要求値をそれぞれ 1 として規格化してある。◆は制約付きベイズ最適化の結果を示し、プロットの色は実験回数を表す。ベイズ最適化の進行とともにプロット点が左上に移動しており、適切に最適化が進んだことがわかる。さらに、ベイズ最適化によってグローバルな探索が進んだ段階で、実験者が特定のパラメータでファインチューニングを行った (★)。以上の結果を合わせ、最終的に、成長速度を 2 倍かつ成膜品質の要求値をすべて満たす成膜条件を取得した。

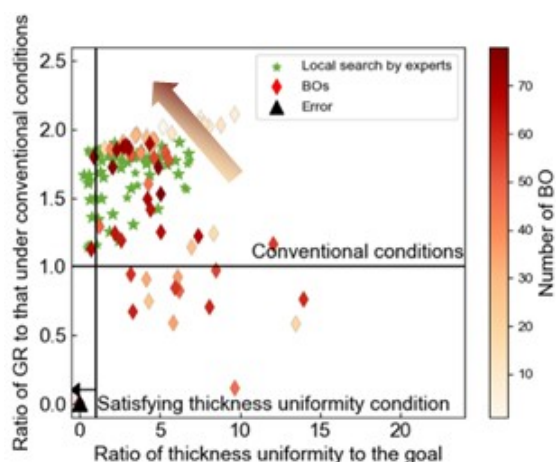


Figure 1 Film growth rate vs. thickness uniformity.