

材料プロセスの実験への機械学習の応用と課題

Application of machine learning to experiments of material processes

理研 AIP, °沓掛健太郎

AIP, RIKEN, °Kentarō Kutsukake

E-mail: kentaro.kutsukake@riken.jp

材料科学と情報科学を融合したマテリアルズインフォマティクスが大きく盛り上がっている。特に、材料特性の計算データベースをもとに機械学習を用いて、所望の材料特性を発現させるような元素と結晶構造の組合せを見出すといった「材料探索」の分野で大きく研究が進んでいる。一方で材料特性は、作り方すなわち「材料プロセス」にも大きく左右されるが、材料プロセスへの機械学習応用は端緒についたばかりである。特に、実際の実験への応用はまだまだ報告が少ない。本講演では、計測への応用も含めて、講演者らがこれまでに取り組んできた以下の事例を紹介しながら、材料プロセスの実験への機械学習応用の可能性と課題を議論する。

【Si エピタキシャル成長における最適条件取得】

実際の実験における最大の課題は、実験回数が限られることである。本研究では、化学気相堆積法による Si エピタキシャル成長にベイズ最適化を応用し、少ない実験回数でより良い条件を求めた。ここでは、実際の実験特有の課題であるパラメータの評価コスト、未判明な実験不可能な条件、各目的の達成度を考慮して、適応的に制約を選択することで効率的に最適化を行った。

【CZ-Si 結晶中の酸素濃度のリアルタイム予測】

実際の実験では、実験条件の設定パラメータ以外に、装置内環境の微妙な状態の違いによっても、作製される材料の特性が影響を受けることがある。本研究では、CZ 法による Si 結晶の育成プロセスに機械学習を応用し、結晶成長のログデータから結晶中の酸素不純物濃度を予測した。ここでは、引き上げ速度やルツボ回転速度などの設定パラメータに加えて、圧力やモニタ温度など計測パラメータを機械学習の入力とすることで、より高い精度での予測を達成した。

【放射光 μ ビーム X 線回折における特徴領域の自動探索】

逐次プロセスでは、評価や解析に要する時間が問題になる場合がある。放射光 μ ビーム X 線回折への応用では、教師なし機械学習を活用することで回折パターンの解析を高速化し、さらにベイズ最適化と組み合わせることで、試料表面内で材料物性値（ここでは組成もしくは結晶配向）が最大（もしくは最小）となる箇所を少ない測定回数で取得した。実際の装置において、測定・解析・最適化を繰り返す自動探索システムを構築した。

謝辞 Si エピタキシャル成長および CZ-Si 結晶に関する研究は、グローバルウェーハズ・ジャパンとの共同研究によって実施されました。