

マルチデータによる結晶成長熱流体シミュレーションのパラメータ同定

Parameter identification for thermal fluid simulation in crystal growth using multi-data

名大院工¹, 理研 AIP², 名大院情報³

○(M1) 田中 博之¹, 沓掛 健太朗², 小島 拓人³, 劉 鑫¹, 宇佐美 徳隆¹

Graduate School of Eng., Nagoya Univ.¹, AIP, RIKEN², Graduate School of Info., Nagoya Univ.³

°Hiroyuki Tanaka¹, Kentaro Kutsukake², Takuto kojima³, Xin Liu¹, Noritaka Usami¹

E-mail: tanaka.hiroyuki@d.mbox.nagoya-u.ac.jp

【はじめに】材料製造プロセスの開発には、シミュレーションが盛んに活用されているが、シミュレーションには実験結果を完全再現できないという課題がある。この課題を解決するために、実測値を活用してシミュレーション内部のパラメータを調整し、解析精度の向上させる「パラメータ同定」が広く行われている。しかし、実験から複数種類の測定値を取得し、パラメータ同定に利用した事例はあまり見られない。そこで本研究では、シリコンインゴット成長実験を対象とした熱流体シミュレーションに対し、実験から取得した複数種類の測定値を用いてパラメータ同定を行い、多角的なモデルの検証と改善を行った。

【実験方法】3つのゾーンヒータを持つ縦型ブリッジマン結晶成長炉において多結晶シリコンインゴットの作製を行った。マルチデータとして、ヒーター付近と坩堝周囲に計10個の熱電対を設置し、プロセス中の炉内温度を多点計測した。また、成長炉上部の覗き穴から、プロセス中のシリコンの表面状態を観察することで、溶融開始時刻・固化完了時刻を取得した。更に、成長したシリコンインゴットの電気抵抗率分布より、プロセス中のシリコンの固液界面形状を求めた。熱流体シミュレーションには結晶成長解析ソフト CGSim (STR 社) を用いた。数値計算は、ジオメトリに対して二次元軸対称回転体を仮定して行うため、装置形状のモデル化には近似が必要となる。Fig.1 に成長炉のモデル形状を示す。形状近似はヒーター、サセプターに対して行った。実際のヒーターは蛇腹形状をしているが、シミュレーション上ではリング形状に近似した。この近似によりヒーターと制御用熱電対の相対位置関係には不確実性が生じる。そこで、ヒーター制御用の熱電対位置と、サセプターの幅と高さをパラメータとし、実験から得られた各測定値とシミュレーション結果が一致するように、パラメータ同定を行った。

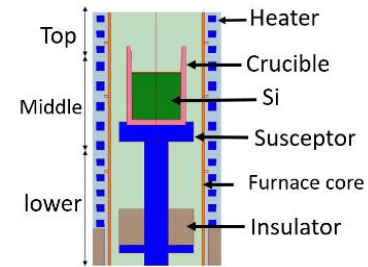


Figure 1 – Model figure around the crucible

【結果】Fig.2 に、パラメータ同定前後の坩堝壁温度の測定値と解析結果の比較を示す。パラメータ同定により誤差が減少し、シミュレーションにおける温度変化が実測値とよく一致した事がわかる。また Fig.3 に、実験における固液界面形状の推定結果と、パラメータ同定後のシミュレーションにおける固液界面形状を示す。シミュレーションにおける固液界面形状の変化の傾向（上に凸→下に凸）が、インゴットの抵抗率分布から推定される界面形状の変化と、一致していることが分かる。複数種類の測定値を用いてモデルを多角的に検証し、モデルの改善を行ったことで、解析精度の向上が得られた。

【謝辞】本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)の支援のもと行われた。

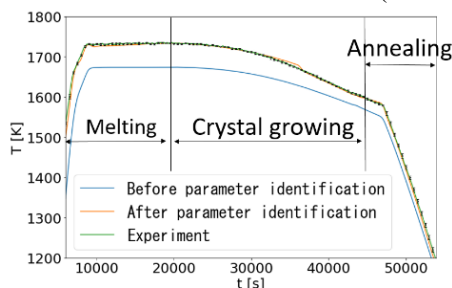


Figure 2– Comparison of temperature on the crucible wall

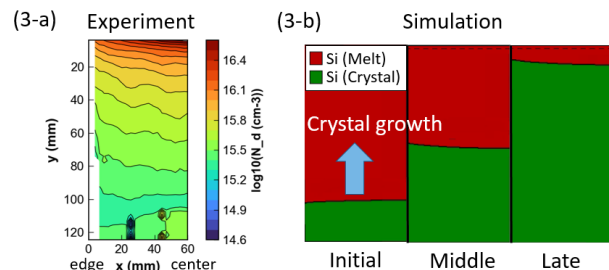


Figure 3– Comparison of solid-liquid interface shape
(3-a) Estimated interface shape in the experiment
(3-b) Calculated interface shape in the simulation