

トポロジーと機械学習を用いた SiC 溶液成長における流れ分布の最適化

Optimization of flow distribution in SiC solution growth using topology and machine learning

名大院工¹, 岐大工², 理研 AIP³, 名大未来研⁴

○(M2)磯野 優¹, 横山 知郎², 沓掛 健太朗^{3,4}, 原田 俊太^{1,4}, 田川 美穂^{1,4}, 宇治原 徹^{1,4}
Grad. School of Eng. Nagoya Univ.¹, Dep. of Eng. Gifu Univ.², AIP RIKEN³,
IMaSS Nagoya Univ.⁴

○Masaru Isono¹, Tomoo Yokoyama², Kentaro Kutsukake^{3,4}, Shunta Harada^{1,4},
Miho Tagawa^{1,4}, Toru Ujihara^{1,4}

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

【緒言】SiC 溶液成長法において結晶の成長速度やモフォロジーに影響を与える坩堝内溶液の流れ分布を制御することは重要である。最適化を行うときには実験者の知見を目的関数に反映させる必要があるが、流れ分布などの分布をパラメータとして表すのは困難である。流れの可視化手法としてトポロジーに基づいた解析を用いることで、流れ分布のよどみ点や周期軌道を可視化および分析する研究が行われている[1]。本研究では、流れ分布の中で流速がゼロになるよどみ点に着目し、結晶の大口径化に向けて、高品質な 3inch の結晶が得られたときの流れ分布を 6inch の結晶成長でも再現するようなプロセスパラメータの探索を行った。

【方法】熱流体計算ソフト CGSim を用いて、設定温度、結晶軸回転数、坩堝回転数、坩堝位置をプロセスパラメータに設定し、490 条件の溶液の温度・流れ分布のシミュレーションを行った。そのシミュレーションデータを教師データとして、ニューラルネットワークを用いてプロセスパラメータから温度と流速を予測する機械学習モデルを構築した。次に、よどみ点の指数を計算することで、流れ分布からよどみ点の位置を自動で抽出した。実験者の知見から目標とする流れ分布を予め決定し、その分布のよどみ点と機械学習モデルで予測した流れ分布のよどみ点の距離を最小化するようなプロセスパラメータを遺伝的アルゴリズムで探索した。

【結果と考察】ある流れ分布から自動で抽出したよどみ点を Fig. 1 に示す。渦心点と呼ばれるその点を中心に周りの流れが回転するよどみ点と鞍点と呼ばれるある方向からは流れが近づき、別の方向からは流れが遠ざかるよどみ点を判別することができている。高品質な 3inch の結晶が得られた流れ分布を Fig. 2 (a) に示しており、上下に渦が分かれたような流れ分布になっている。Fig. 2 (a) の流れ分布からよどみ点を抽出すると、両端の中央部分に鞍点が存在する流れ分布となっている。そこで、6inch の流れ分布でもその位置に鞍点が存在するような流れ分布を探索した。鞍点の位置を最適化した 6inch の流れ分布を Fig. 2 (b) に示している。よどみ点の位置を最適化したことで、上下に渦が分かれた流れ分布になっており、3inch と比較して大域的に近い流れ分布が 6inch でも得られた。この結果から、結晶を大口径化するときに小口径の結晶の流れ分布の知見をよどみ点の位置として目的関数に反映させることができると考えられる。

【参考文献】 [1] C. Heine, *et al.*, COMPUT GRAPH FORUM, **35**, 643-667, (2016).

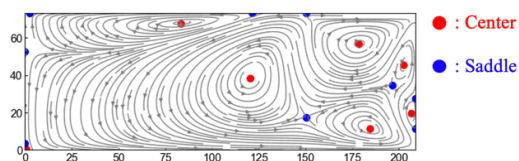


Fig. 1 Extraction of stagnation points

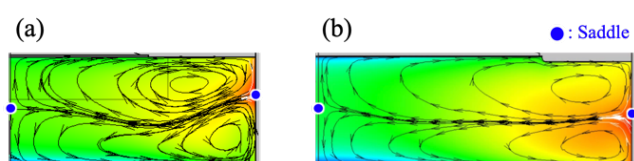


Fig. 2 (a) Flow distribution of high-quality 3-inch crystal
(b) Optimized flow distribution of 6-inch crystal