

シミュレーションと機械学習を用いた結晶成長プロセスの最適化

角岡 洋介^{1,2†} 原田 俊太^{1,3} 田川 美穂^{1,3} 宇治原 徹^{1,2,3}

¹名古屋大学大学院工学研究科 ²産業技術総合研究所 GaN-OIL ³名古屋大学未来材料・システム研究所

Optimization of crystal growth using simulation and machine learning

Yosuke TSUNOOKA^{1,2†} Shunta HARADA^{1,3} Miho TAGAWA^{1,3} Toru UJIHARA^{1,2,3}

¹Department of Materials Process Engineering, Nagoya University

²GaN Advanced Device Open Innovation Laboratory, (GaN-OIL), National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)

³Center for Integrated Research of Future Electronics (CIRFE), Institute of Materials and Systems for Sustainability (IMaSS), Nagoya University Nagoya University

Abstract

Optimization of crystal growth was conducted using numerical fluid simulation and machine learning. High quality single crystal requires control of flow and supersaturation distribution. Ideal growth conditions were obtained by optimization satisfying some objectives.

Keywords: Crystal growth, Machine learning, Optimization, OpenFOAM, Python

1. はじめに

高性能で信頼性のある半導体デバイスを作るには、シリコンを始めとする半導体の単結晶が必要であり、この単結晶を得るプロセスは結晶成長と呼ばれている。半導体の単結晶には、デバイスの性能や信頼性、およびコストの観点から、結晶品質と大口径の両立が求められている。しかし、高品質かつ大口径の結晶を得るには、結晶成長の成長条件を最適化する必要があり、多くのパラメータを持つ結晶成長の最適化は非常に長い時間を要する。そのため、結晶成長の条件を最適化する手法が求められている。我々はこれまでに、機械学習により結晶成長のシミュレーション結果を瞬時にかつ高精度に予測するモデルを構築することに成功しており[1]、これを用いれば高速に結晶成長プロセスの最適化が可能になると考えられる。そこで本研究では、パワーデバイス用半導体材料として期待されている SiC (Silicon carbide) の溶液成長を例に、シミュレーションと機械学習を用いた結晶成長プロセスの最適化手法の確立を行なった。手順としては、最初にシミュレーションにより機械学習のためのデータを生成し、次にシミュレーションの計算条件・結果の関係を機械学習の方法で学習し、最後に学習したモデルを用いて、設定した目的に対する最適化を行なった。

2. シミュレーションによるデータ生成

まず、機械学習で学習するシミュレーションデータを生成した。SiC 溶液成長においては、るつぼ中に溶液が入っており、そこに種結晶を浸漬している。温度の低い種結晶上でるつぼ壁から炭素が供給され、結晶が成長するようになっている。本研究では、溶液中のみの流れ、温度、濃度場を計算した。解析領域を Fig. 1 (a) に示す。ここでは、2 次元軸対称、定常状態として解いた。解析には、OpenFOAM-2.4.0 のソルバー BuoyantBoussinesqSimpleFoam に濃度場の輸送方程式を追加したものを用いた。Fig. 1 (b) にこの溶液成長の系のパラメータを示す。パラメータはそれぞれ 3 点の温度(T_1, T_2, T_3)、結晶回転速度(ω)、るつぼ内径(D_C)、溶液高さ(H)、結晶口径(D_S)、結晶の浸漬深さ(d)とした。3 点の温度は溶液・るつぼ壁界面の温度の境界条件を線形補間で与え、結晶回転速度は種結晶界面の流速の境界条件を、るつぼ内径、溶液高さ、結晶口径、結晶の浸漬深さは解析対象の形状の情報を与える。これらの 8 つのパラメータをランダムに決定し、800 通りの計算を行なった。

3. シミュレーション結果の機械学習

次に、ニューラルネットワークによるシミュレーション結果の学習を行なった。ニューラルネットワークとは、機械学習の手法の 1 つで、画像認識や音声認識、自然言語処理など幅広い分野に用いられている。ソフトウェアには Google の機械学習ライブラリ TensorFlow[2]を用いた。ニューラルネットワークの入力には、

[†] E-mail address of corresponding author: tsunooka@unno.material.nagoya-u.ac.jp

8つのパラメータに加えて、Fig. 1 (b)に示したような400点の格子点状の空間位置と、その位置において溶液が存在するかどうかの0か1の情報を用いた。出力は、動径方向・鉛直方向の流速および過飽和度とした。隠れ層が4層、ノード数が128のニューラルネットワークで学習を行なった。

ニューラルネットワークの学習に用いたデータとは別に200通りのテストデータを用意し、学習した結果の検証を行なった。評価には、ニューラルネットワークによる予測とテストデータとの重相関係数を用いた。Fig. 2にその比較の一例を示す。2つの渦を再現できており、過飽和度もよい一致をみせていることが分かる。重相関係数は動径方向・鉛直方向の流速および過飽和度でそれぞれ0.878, 0.933, 0.952であった。200通りのテストデータ全体との重相関係数は、それぞれ0.957, 0.961, 0.970であり、テストデータ全体に対してもシミュレーション結果を精度よく予測できていることが分かる。

4. 機械学習を用いた最適化

最後に、学習したニューラルネットワークを用いて、成長条件の最適化を行なった。複数の目的に対する最適化は多目的最適化と呼ばれ、その解は複数の目的がトレードオフな関係になっていることが多く、このような解の集合はパレート最適と呼ばれている。本研究では、遺伝的アルゴリズムで多目的最適化の手法であるNSGA-II [3]を用いてパレート最適を求めた。遺伝的アルゴリズムでは、最初に複数の個体を生成し、各個体に交叉・突然変異の演算子を適用したのち、個体の適応度(目的関数にあたる)を計算し、適応度の値に応じて次世代に残す個体を選択するという一連の手続きを繰り返すことで最適解を求める。NSGA-IIでは、トレードオフな関係にある解を優先的に選択することでパレート最適解を求める。ニューラルネットワークは、適応度を計算する際に用いられる。本研究では、Pythonの進化的アルゴリズム開発用ライブラリであるDEAP[4]を用いて実装した。

結晶成長に求められる条件として、成長速度の向上、結晶直下の流れ分布の制御[5]、るつぼ壁における多結晶析出の抑制などがある。そこで目的関数は、結晶直下の過飽和度の増大(f_1)、結晶直下の動径方向の流れ増大(f_2)、るつぼ壁近傍の過飽和度減少(f_3)、の3つとした。

Fig. 3に最適化の結果として目的関数値のプロットを示す。各点は各成長条件における目的関数値の値を示している。各点は、成長条件ごとにK-meansによるクラスタリングで色分けしている。大きく分けて、3種類の解があることがわかる。Fig. 3中に示した3点の条件における流速・過飽和度分布をFig. 4に示す。#1を含む黄緑色の点では、るつぼ壁の温度をいずれも高くすることで過飽和度を上げている。#2を含む黒の点では、溶液高さを上げることで、流れが変化し結晶直下の流れが強くなっている。#3を含む緑の点では、るつぼ底温度を下げ温度分布を変えることで、#1, #2の中間的なバランスの過飽和度・流速分布を作り出している。本研究の手法を用いれば、このように異なる物理で目的を満たす様々な条件を探索することができる。

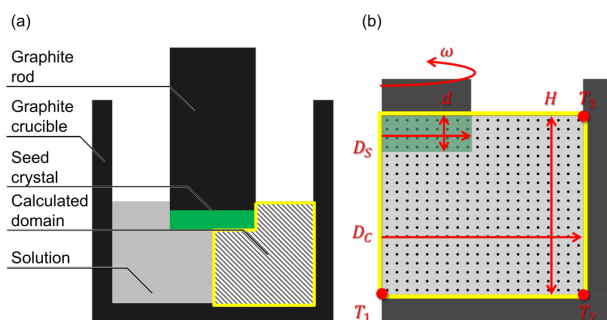


Fig. 1 (a) Schematic of SiC solution growth.
(b) Parameters of the solution growth.

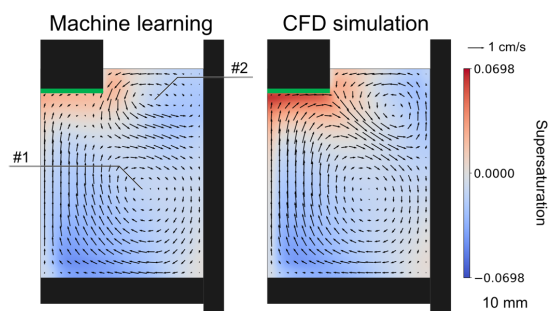


Fig. 2 Comparison of result of machine learning and simulation[1].

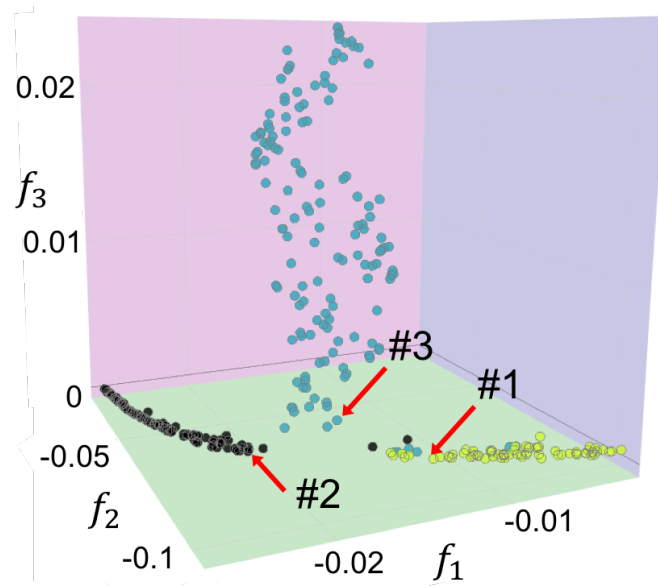
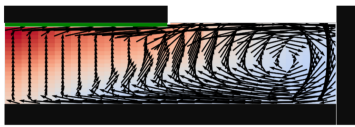
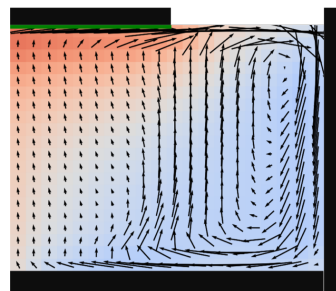


Fig. 3 Pareto optimal solutions. Colors of the solutions are given by clustering.

(a) #1



(b) #2



(c) #3

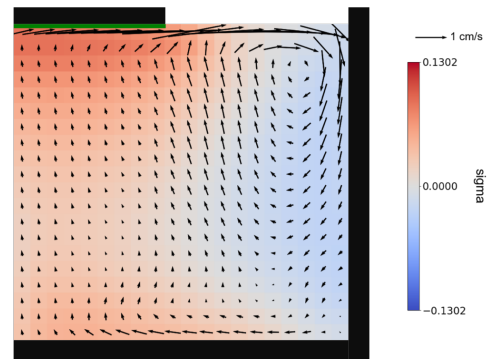


Fig. 4 Examples of Pareto optimal solutions with parameters $(T_1, T_2, T_3, \omega, D_C, H, D_S, d) =$

- (a) (2173, 2173, 2173, 131, 100, 12, 49, 0.51), (b) (2173, 2173, 2173, 150, 95, 37, 48, 0.50),
 (c) (2153, 2173, 2173, 97, 100, 47, 45, 0.55).

参考文献

- [1] Y. Tsunooka, *et. al.*, CrystEngComm, **20** (2018) 6546-6550.
- [2] TensorFlow <https://www.tensorflow.org/>, (accessed 2018-11-14).
- [3] DEAP <https://github.com/DEAP/deap>, (accessed 2015-11-14).
- [4] K. Deb, *et. al.*, IEEE Trans. Evol. Comput., 6.2 (2002) 182.
- [5] T. Endo, *et. al.*, ECSCRM 2018, Birmingham, U. K.