



プロジェクションマッピングと機械学習を用いた 結晶成長プロセスにおける熱流動の可視化システムの構築

畑佐豪記¹⁾, 角岡洋介¹⁾, 李相一¹⁾, 村山健太²⁾, 朱燦¹⁾,
原田俊太^{1),2)}, 田川美穂^{1),2)}, 石黒祥生³⁾, 宇治原徹^{1),2),4)}

- 1) 名古屋大学 工学研究科 (〒464-8603 愛知県名古屋市千種区不老町, hatasa@unno.material.nagoya-u.ac.jp)
2) 名古屋大学 未来材料・システム研究所 (〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)
3) 名古屋大学 未来社会創造機構 (〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)
4) 産業技術総合研究所 窒化物半導体先進デバイスオープンイノベーションラボラトリ
(〒464-8601 愛知県名古屋市千種区不老町)

概要: 約 2000°C の金属液体中の温度や流れの空間分布を瞬時に予測し可視化する技術を、プロジェクションマッピングと機械学習により実現した。我々は電力損失を大幅に低減させる次世代パワー半導体材料である炭化ケイ素(SiC)結晶の溶液成長法技術の開発を行っている。プロセス開発においては、高温溶液中の温度・流速分布が極めて重要であるが、その直接的な測定や観察は困難である。我々は、装置内部の限られた取得可能な情報から、熱流体解析と機械学習により溶液の温度・流速分布を予測し、それを実験装置上にプロジェクションマッピングにより投影することで、結晶成長の育成環境のリアルタイム観察システムを実現した。

キーワード: プロジェクションマッピング, 高温金属液体, 機械学習, 素材プロセス

1. はじめに

素材プロセスの開発には多くの年月が必要である。例えば、代表的な素材プロセスである半導体結晶成長を例にとっても、非常に多くの実験条件、装置の構造パラメータが存在する。それらを実験やシミュレーションから系統的に解析し最適条件を見出す必要があるが、これは非常に忍耐のいる作業である。しかも、多くの場合、装置内部の状態を観察できない場合が多く、「見ながら実験を行う」ということすらできない。

我々は、電力損失を大幅に低減させる次世代パワー半導体材料である炭化ケイ素(SiC)の単結晶の溶液成長技術の開発を行っている[1]。SiC 溶液成長法ではまず、黒鉛の坩堝に充填したケイ素等の原料を約 2000 °C にまで加熱し、溶融させる[2]。すると坩堝から炭素が溶液中に溶け込む。この溶液に黒鉛軸にとりつけた SiC の種結晶を浸漬させることで、結晶を成長させる(図 1)。溶液の温度・流速分布は結晶の成長に影響するため、実験条件の細かな調整が必

要である。しかし、温度・流速分布を制御するための実験条件には多くのパラメータの組み合わせが存在するため、最適化が困難である。また、SiC 溶液成長法は 2000 °C 近くの高温で行うため、溶液の入った坩堝は断熱材とコイルで覆われている。そのため、実験中の溶液の温度・流速分布を直接測定・観察することが困難である。

本研究では製造装置内の約 2000 °C の金属液体中の温度や流れを瞬時に予測し可視化する手法を提案する。最初に実験条件から溶液の温度・流速分布を瞬時に予測するモデ

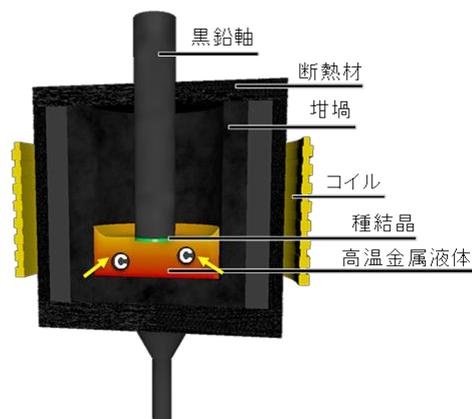


図 1: SiC 結晶の溶液成長法の模式図

Goki HATASA, Yosuke TSUNOOKA, Sangil LEE,
Kenta MURAYAMA, Can ZHU, Shunta HARADA,
Miho TAGAWA, Yoshio ISHIGURO and Toru
UJIHARA

ルを熱流体解析と機械学習を用いて構築した。次に、コンピュータグラフィックスによって装置内部の映像を再現し、実験装置上へプロジェクションマッピングを行うことで、結晶成長の育成環境のリアルタイム観察システムを実現した。

2. 関連研究

これまでに SiC の結晶成長の分野では実験条件を最適化するために熱流体解析が行われている[3, 4]。また、装置内部を可視化するために X 線を用いたその場観察の手法も提案されている[5, 6]。しかし、従来の熱流体解析では計算に時間がかかるため、実験中に瞬時に溶液の状態を計算することが困難である。また、X 線を利用するためには、X 線源や検出器、X 線を遮蔽する鉛製の部屋を準備する必要があり、汎用的ではない。

我々のグループでは、熱流体解析における部材の回転速度や幾何学形状に対する熱流体解析結果の関係を機械学習により回帰問題として解くことで、実験条件の変化に対して熱流体解析結果を瞬時に予測することが可能であることを報告してきた[7]。

そこで本研究では、実際の装置の熱流体解析を行い、機械学習を用いて坩堝の温度や種結晶の回転速度等の実験条件から、溶液の温度・流速分布を瞬時に計算する予測モデルを構築し、実験中に瞬時に可視化するシステムを構築した。

3. システム概要

3.1 使用した熱流体解析モデル

熱流体解析には 2 次元軸対称モデルを用いて、対流や高周波コイルによる電磁場を考慮し、熱移動、物質移動の定常解析を有限体積法により計算した。計算ソフトには CGSim を用いた[8]。

熱流体解析に用いた代表的なモデルを図 2 に示す。計算

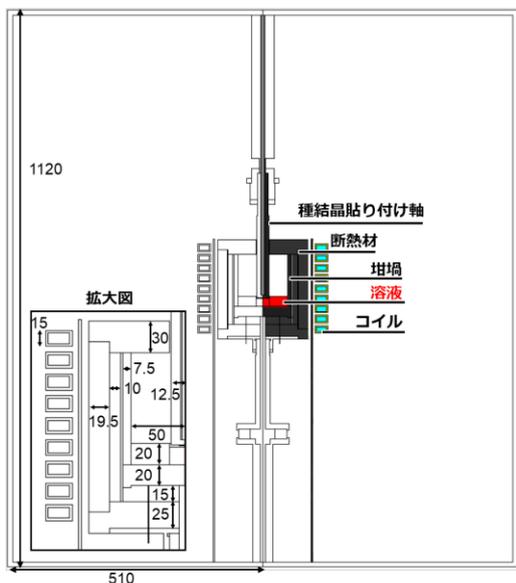


図 2: 計算モデル

の際には坩堝の底の中心の温度、種結晶の回転速度、坩堝の回転速度、坩堝位置を実験条件に設定した。

3.2 溶液の温度・流速の予測モデルの構築

溶液の温度・流速分布の予測モデルの構築の手順を図 3 に示す。最初に訓練データの準備するために 90 通りの実験条件の組み合わせについて熱流体解析を行った。この時の実験条件の組み合わせの範囲を表 1 に示す。次に、この 90 通りの熱流体解析結果から、溶液の温度、動径方向・鉛直方向の流速を抽出した。図 4 に図 2 の計算モデルの溶液部分を拡大表示したものを示す。赤線で囲われた領域は温度・流速分布を抽出した領域であり、この領域から 1 mm 間隔で格子状に抽出した。

次に実験条件から、抽出領域の温度・流速分布を出力する予測モデルを機械学習により構成した。機械学習にはニューラルネットワークを利用した。計算にはオープンソースの機械学習ライブラリである Tensorflow[9]を用いた。予測モデルへの入力層は熱流体解析の実験条件である坩堝底温度、黒鉛軸回転速度、坩堝回転速度、坩堝位置に加え、溶液の座標(x, y)の 6 つとした。中間層は 2 層用い、各層のニューロン数は 128 とした。また活性化関数にはシグモイド関数を用いた。出力層は溶液の温度・動径方向の流速・鉛直方向の流速の 3 つとした。

構築した予測モデルを評価するために、テストデータ

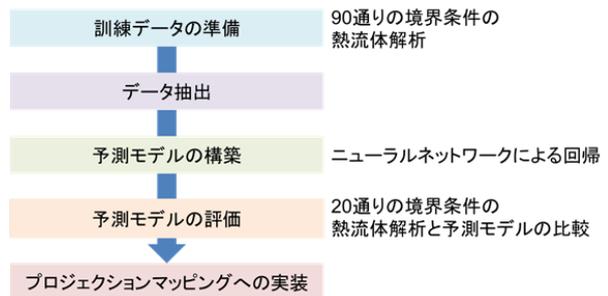


図 3: 予測モデルの構築手順

表 1: 熱流体解析の変数

	坩堝底温度 (°C)	種結晶回転速度 (rpm)	坩堝回転速度 (rpm)	坩堝位置 (mm)
Range	1750~1850	0~150	-20~20	280~340

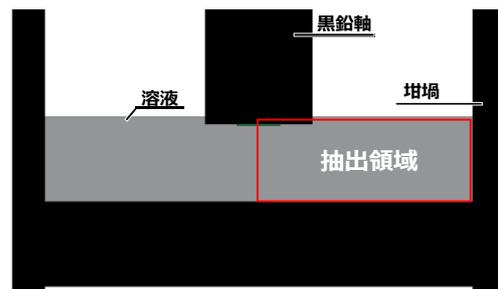


図 4: 熱流体解析結果の抽出領域

として訓練データに用いた実験条件とは別の 20 通りの熱流体解析の計算を行った。また、構築した予測モデルにテストデータの実験条件と溶液の座標を入力し、溶液の温度・動径方向の流速・鉛直方向の流速を計算した。モデルの精度を評価するためにテストデータの熱流体解析による溶液の温度・動径方向の流速・鉛直方向の流速の計算結果と予測モデルによる溶液の温度・動径方向の流速・鉛直方向の流速の計算結果から相関係数を計算し評価した。

3.3 プロジェクションマッピングのシステム

プロジェクションマッピングのシステム構成を図 5 に示す。内部の様子を提示するために、結晶成長装置の正面にスクリーンを設置し、その正面上方にプロジェクタを設置した。装置制御盤から実験中の測定している坩堝底温度、黒鉛軸の位置、黒鉛軸の回転速度、坩堝回転速度、坩堝位置のデータを PC に転送し、コンピュータグラフィックスによって装置内部の映像を再現した。その再現した映像をスクリーン正面上方のプロジェクタから投影した。PC は HP 社の ZBook Studio G3 Mobile workstation を使用し、プロジェクタには EPSON 社の EB-1776W を使用した。

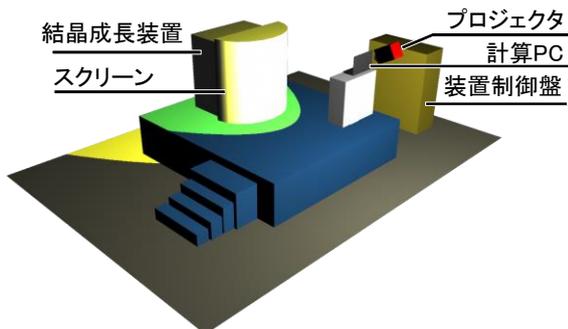


図 5: プロジェクションマッピングのシステム構成

4. 実装

4.1 溶液の温度・流速分布の予測

実験条件を坩堝底温度 1845°C、種結晶回転速度 129 rpm、坩堝回転速度 19 rpm、坩堝位置 339 mm に設定した時の熱流体解析による溶液の温度・流速分布の計算結果を図 6(a)に示す。矢印は溶液の流速の方向と大きさを示し、カラーマップは温度を 1071 点のサンプリング点について示している。Intel(R) Xeon(R) CPU E3-1220 v5 を用いた計算時間は 1 計算あたり平均 2.42×10^4 秒であった。

機械学習により構築した予測モデルを用いた同じ実験条件の溶液の温度・流速分布の計算結果を図 6(b)に示す。図 6(a)に示した熱流体解析結果と比較すると、溶液の高温・低温部分の広がりや精度よく予測できた。また流速についても、渦の大きさや向きを精度良く予測できている。出力した 1071 点について熱流体解析結果との相関係数を計算した結果、温度、動径・鉛直方向の流速についてそれぞれ 0.999363, 0.999986, 0.999981 であった。また、Intel(R) Core(TM) i7-6650U CPU を用いた場合、1 つの実験条件の計算時間は平均 0.04 秒であった。

20 個のテストデータ全て(21420 点)において、熱流体解析結果と予測モデルの計算結果について、溶液の温度・動径方向・鉛直方向の流速の相関係数をそれぞれ計算したところ 0.999996, 0.999982, 0.999971 であり、テストデータ全体に対して高い相関があるため、機械学習による予測は熱流体解析結果を精度よく予測している。

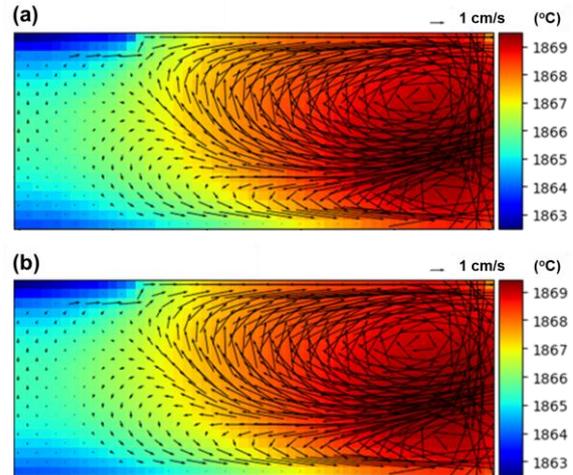


図 6: 温度・流速分布の計算結果

(a) 熱流体解析 (b) 機械学習

4.2 プロジェクションマッピングによる可視化

図 7(a)に成長装置のオペレータと、プロジェクションマッピングにより装置内部を可視化したものを示す。コンピュータグラフィックスにより可視化した坩堝・黒鉛軸の位置や回転速度等は実際の状態と同期して変化するように調整している。図 7(b)は投影した溶液を拡大表示したものの

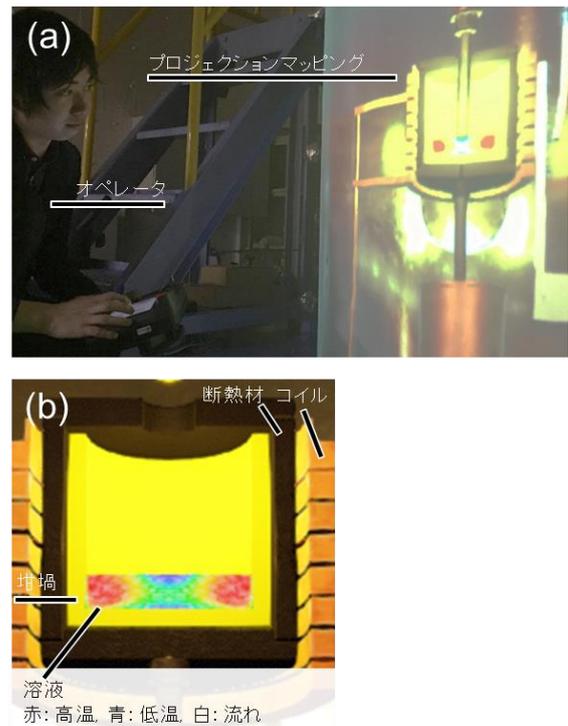


図 7: プロジェクションマッピングの実装結果

(a) 投影した様子 (b) 溶液の温度・流速分布

である。カラーマップは温度分布、白色のトレーサーの動きで流速の方向と大きさを示している。この溶液の温度・流速分布は実験条件から予測モデルを用いて瞬時に計算しているため、実験中の温度・流速分布をリアルタイムに可視化するものとなっている。

このシステムによりオペレータは、これまで実験中に見ることが出来なかった溶液の温度・流速分布を「見ながら実験を行う」ことが可能となった。

5. まとめと展望

本論文は実測・直視が困難な約 2000 °C の金属液体中の温度と流れを瞬時に可視化する手法を、機械学習とプロジェクションマッピングにより提案した。実際の装置の熱流体解析を行い、機械学習を用いて、炉内で測定している坩堝の温度や種結晶の回転速度等の実験条件から、溶液の温度・流速分布を瞬時に出力する予測モデルを構築した。また、コンピュータグラフィックスによって装置内部の映像を再現し、実験装置へプロジェクションマッピングを行うことで、結晶成長の育成環境のリアルタイム観察システムを実現した。このシステムを通じて、オペレータは装置内部の部材の位置や溶液の状態を「見ながら実験を行う」ことが可能となった。このシステムにより、内部がブラックボックスである装置の実験条件の最適値探索をより効率化することが期待される。

謝辞

情熱的にプロジェクションマッピングを制作くださいました、だるまジャパン合同会社の尾崎竜二氏、北川正義氏にこの場を借りて深く感謝申し上げます。

参考文献

- [1] Yamamoto, Y., Harada, S., Seki, K., Horio, A., Mitsuhashi, T., Ujihara, T.: High-efficiency conversion of threading screw dislocations in 4H-SiC by solution growth. *Appl. Phys. Express*, 5, pp.115501, 2012.
- [2] Narumi, T., Kawanishi, S., Yoshikawa, T., Kusunoki, K., Kamei, K., Daikoku, H., Sakamoto, H.: Thermodynamic evaluation of the C-Cr-Si, C-Ti-Si, and C-Fe-Si systems for rapid solution growth of SiC. *J. Cryst. Growth*, 408, pp.25-31, 2014.
- [3] Wellmann, P. J., Bickermann, M., Hofmann, D., Kadinski, L., Selder, M., Straubinger, T. L., Winnacker, A.: In situ visualization and analysis of silicon carbide physical vapor transport growth using digital X-ray imaging. *J. Cryst. Growth*, 216, pp.263-272, 2000.
- [4] 酒井武信, 加渡幹尚, 大黒寛典, 原田俊太, 宇治原徹: X線透過法による溶液法 SiC 結晶成長のその場観察, 第 77 回応用物理学会秋季学術講演会 講演予稿集, 15a-C302-1, 2016.
- [5] Yamamoto, T., Okano, Y., Ujihara, T., Dost, S.: Global simulation of the induction heating TSSG process of SiC for the effects of Marangoni convection, free surface deformation and seed rotation. *J. Cryst. Growth*, 470, pp.75-88, 2017.
- [6] Mukaiyama, Y., Iizuka, M., Vorob'ev, A., Kalaev, V.: Numerical investigation of the effect of shape change iJ. *Cryst. Growth*, 475, pp.178-185, 2017.
- [7] 角岡 洋介, 小久保 信彦, 原田 俊太, 田川 美穂, 宇治原 徹: SiC 溶液成長における最適条件高速探索手法の提案, 第 64 回応用物理学会春季学術講演会 講演予稿集, 15p-MH-4, 2017.
- [8] CGSim package for analysis and optimization of semiconductor and optical crystal growth from the melt and solution, <http://www.str-soft.co.jp/product/cgsim.html>.
- [9] Tensorflow <https://www.tensorflow.org>.