

AI 技術で新素材の合成過程を「丸見え」にする 一次世代省エネ材料の SiC 結晶の開発速度を 10~100 倍高速に一

この度、名古屋大学未来材料・システム研究所附属 未来エレクトロニクス集積研究センター（センター長：天野 浩）の宇治原 徹（うじはら とおる）教授らは、次世代半導体として注目されている新素材（SiC（シリコンカーバイド））開発期間を圧倒的に短縮するため、材料を合成する装置内部の現象を瞬時に予測し、可視化するシステムを開発しました。これにより、新素材の合成条件を従来の 10 倍から 100 倍のスピードで最適化することができます。また、このシステムに加えて、プロジェクションマッピング技術を用いることで、これまで覗くことのできなかつた装置内部を瞬時に予測し可視化する技術を開発しました。さらに、臨場感のある映像表現を活用することで、あたかも職人のように素材や装置の状態を感じ取りながら、最適条件を見出していくことができます。これらの成果によって、新素材開発における材料合成の最適条件探索の時間を短縮し、省エネ技術の一端を担う SiC の材料開発を効果的に行えるようにしました。この技術は、今後、名古屋大学で天野浩教授を中心に研究開発が進んでいる次世代半導体 GaN（窒化ガリウム）に関するプロジェクトにも応用が期待されます。

【ポイント】

新素材開発期間を圧倒的に短縮するため、装置内部の現象を瞬時に予測するシステムを開発しました。これにより、新素材の合成条件を従来の 10 倍から 100 倍のスピードで最適化することができます。また、このシステムを用いることで、これまで覗くことのできなかった装置内部を可視化することもできます。本システムではプロジェクションマッピング技術を活用することで、従来エンターテイメントやゲームなどに活用されてきた臨場感あふれる映像表現により、職人のように素材や装置の状態を感じ取ることができるようにし、最適条件探索を、さらに効果的に行えるようにしました。

【研究背景】

新素材開発は非常に時間がかかる： 新素材開発は大きく分けて二つの段階があります。一つは、材料設計・探索、つまり、どのような物質が役に立つかを見出す段階、もう一つは、材料プロセス開発、つまり、見出された物質を役に立つ材料として合成する方法を開発する段階です。材料開発には 20 年から 30 年を必要とするときばしば言われますが、その大半がプロセス開発に費やされます。2014 年にノーベル物理学賞の受賞対象となった青色 LED の開発においても、窒化ガリウムという物質が青色に光ることは早く見出されていましたが、高品質な窒化ガリウムを合成することが困難で、受賞者の一人である天野教授も、1500 回の実験を繰り返し、ついに合成に成功したと言っています。それほどプロセス開発は大変なのです。

装置内部の状態を制御するのが難しい： 我々のグループでは、省エネ技術に重要なパワーデバイス用の半導体である SiC の高品質結晶成長技術に関する研究を行ってきました。その結果、高品質化技術は確立したのですが、結晶の大きさが十分ではなく、実用化に向けては、さらなる大型結晶を実現するためのプロセス開発を行う必要があります。しかし、そこには主に二つの困難があります。一つは、合成のためのパラメータが多数あり、その組み合わせは無数にあり、その中から最適条件を見出すことの困難さ、もう一つは、合成装置の内部を直接観察したり、直接制御したりすることの困難さです。実際に、SiC の高品質結晶成長技術では、完全に閉鎖された装置内で、高温液体の温度や流れを制御する必要があります。

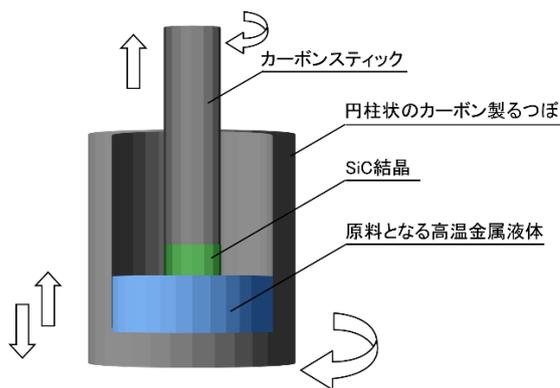


図1:カーボンのるつぼに原料となる高温金属液体を入れて、カーボンスティックの先端から高品質 SiC 結晶を成長する。このときに、るつぼやスティックを回転させたり、位置を制御したり、また液体の量やるつぼのサイズなど、様々な条件を変化させて液体中の温度分布や流れ分布を制御する。(左図)しかし、実際にはこれらの成長は加熱コイルや断熱材などで完全に覆われていて、内部を見ることもできない。(右図)

高品質 SiC 結晶成長も最適条件探索が困難： 高品質 SiC 結晶溶液成長法の概要を図に示します (図 1)。この方法では、るつぼに SiC の原料となる高温金属液体を入れ、そこに専用のスティックを浸漬させ、その先端に高温液体中から結晶を成長させます。このとき、成長温度は約 1800°C に達します。この方法で高品質結晶を作製するためには、高温液体中の温度分布、元素組成分布、液体の流れ分布を綿密に制御する必要があります。これらの分布を制御するためには、るつぼやスティックの位置や回転、るつぼの温度や形状など、さまざまなパラメータを考慮して、最適な条件を見出す必要があります。しかし、装置の内部を見ることはできません。

【内容】

機械学習により内部状態を高速に予測し最適条件探索が高速化： 本研究では、人工知能技術である機械学習を用いて、装置内部の状態を瞬時に予測するシステムを開発しました。図 2 に予測結果の一例を示します。左図は、SiC 溶液成長における高温液体中の流れ分布と過飽和度分布をシミュレーションにより計算した結果で、右図は予測システムにより予測した結果です (図 2)。両者は非常によく似ており、ほとんど違いがわかりません。つまり、非常に正確に予測できていることがわかります。この場合、予測には 0.1 秒程度しか必要としません。この予測システムを用いると、装置内部の様子を短時間で予測することができ、そこから最適条件を効率よく見出すことができます。実際に、私達はこのシステムを用いて、高品質 SiC 結晶成長条件の探索に応用し、高品質結晶を従来の 10 分の 1 以上の短期間で実現することに成功しています。これにより、プロセス開発のスピードは格段に高速になります。

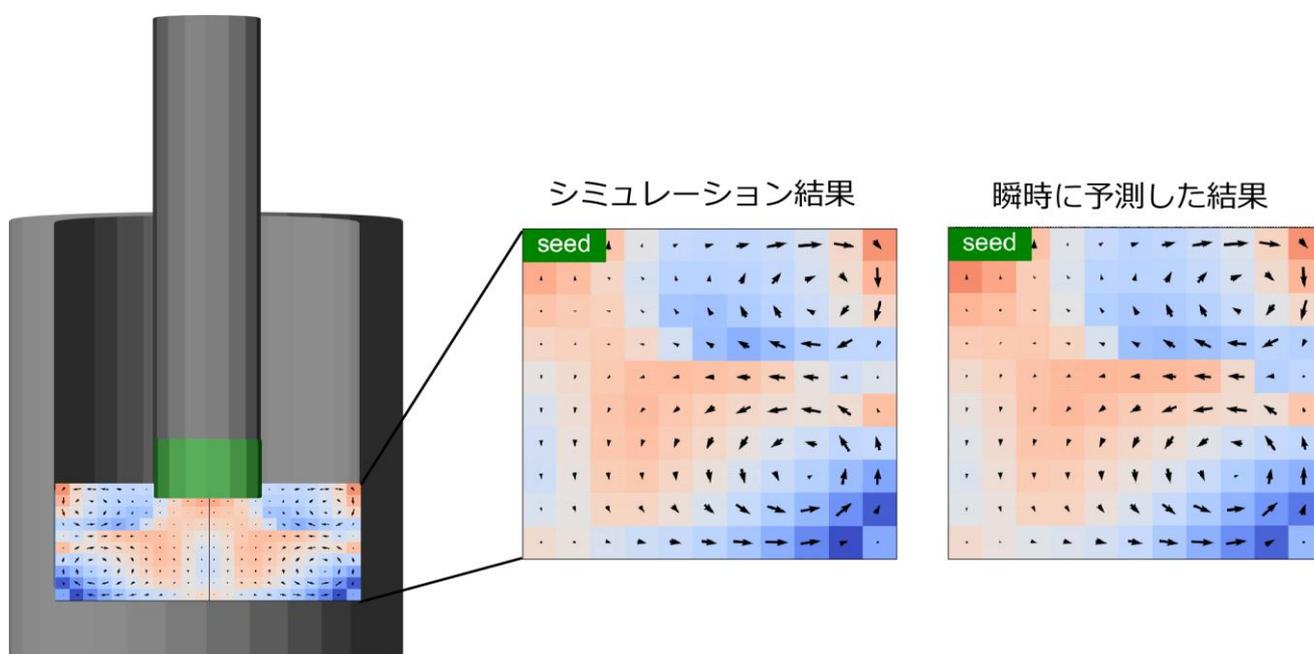


図 2: SiC 結晶成長中の高温液体内部の温度分布や流れ分布を高速に予測することが可能となった。高温液体中の温度分布と流れ分布のシミュレーション結果と予測結果を示す。色のコントラストが温度を示し、矢印が流れの向きと大きさを示す。ここでは、高温液体の右半分だけを計算している。シミュレーション結果と予測結果がほぼ一致しており、予測の精度が極めて高いことがわかる。

装置内部を「見える化」: このシステムを用いると、これまでブラックボックスだった装置の内部や高温液体の状態をリアルタイムに知ることができます。図3に示すのは、装置内部のコンピュータグラフィックのアニメーションです。これらは、実際の装置のパラメータや一部の測定温度などから内部状態を瞬時に予測し、それに基づいて映像が再現されています。さらに、プロジェクションマッピング技術により、この内部映像を装置そのものに投影できます。(図4) これにより、臨場感のある映像を通じて、オペレータは内部状態を即座に知りながら、様々なパラメータを制御することができます。また、これらの映像やプロジェクションマッピングやCGの作成は、だるまジャパン合同会社と共同で作成しました。

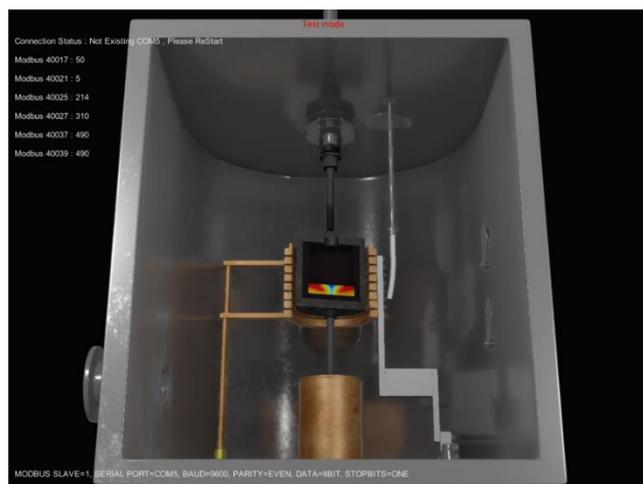


図3: 結晶成長装置の内部を瞬時に予測してアニメーションとして再現している。このアニメーションは実際の装置の状態と完全に同期して変化するようになっている。特に注目すべきは、るつぼ内部の高温液体の温度分布も予測されているところである。(流れ分布や組成分布も表示できる。)

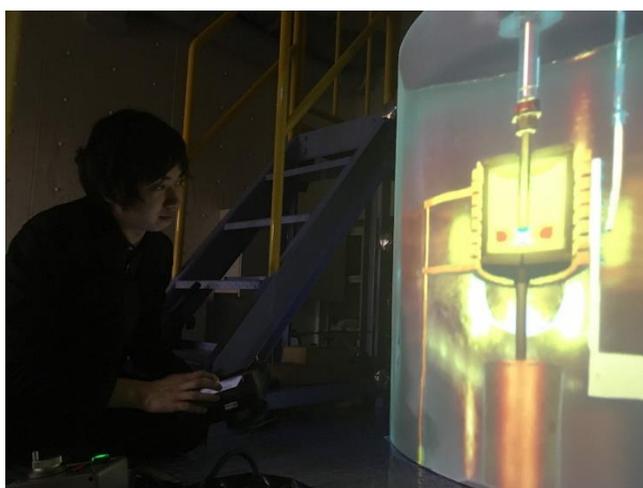


図4: プロジェクションマッピング技術により、結晶成長装置に直接アニメーションを投影する。コンピュータグラフィックスは忠実に再現されているため、非常に高い臨場感を感じることができる。これによりオペレータは、装置や素材の状態をまさしく感じ取ることができ、職人のように装置を制御することができる。

【成果の意義】

素材開発のスピードが向上：本研究により、高品質 SiC の開発が飛躍的にスピードアップします。また、本手法は、SiC だけではなく、現在、名古屋大学を中心に研究開発が進んでいる GaN（窒化ガリウム）に関するプロジェクトにおいても応用ができます。さらに、本手法は液体に限らずガスなどの流体を扱う結晶成長プロセスや、熱拡散を扱う熱処理プロセス、そのほかにも鋳造や金属加工などにも応用が可能です。

職人技の復活：我が国のモノづくりは、数々の職人技によって実現されています。職人技とは、素材や道具の微妙な変化を感覚を駆使して感じ取り、それを手業でフィードバックすることで、信じられない精度でものを仕上げていきます。私達の構築した可視化システムは、ブラックボックスになりがちな最先端の装置において、再び、職人技を取り戻すためのシステムともいえます。つまり、人工知能技術を用いて、オペレータの人間的な能力を取り戻させるシステムにもなります。

【用語説明】

材料プロセス開発：材料を実際に作るには、製造プロセスや装置開発などが必要となります。例えば、鉄鋼の精錬などにおいても、不純物を取り除き、組成を調整し、さらには材料強度などを制御するために、様々な工程を経ます。これらを材料プロセス開発といいます。

パワーデバイス：電圧や電流などをコントロールするための半導体デバイス。

高品質 SiC 結晶：シリコンとカーボンの化合物で、半導体の性質をもちます。パワーデバイスへの応用が期待されており、そのためには欠陥の少ない結晶が必要とされている。

機械学習：人工知能技術の一つです。データから法則性を導き出す手法。

【成果発表】

これらの成果は、以下の国際学会で報告しました。

1. Toru Ujihara, “Trial of Informatics in Crystal Growth -SiC Solution Growth-” 2017 International Conference on Solid State Device and Materials(SSDM2017) 2017.9.19—22 (応用物理学学会主催)
2. Goki Hatasa et al., “Real-Time Visualization System for Temperature and Fluid Flow Distributions in SiC Solution Growth Using Prediction Model” , International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2017 (ICSCRM2017), 2017.9.18-22, (IEEE 主催)