

機械学習によるスパッタリング率の角度依存性の予測

Predicting the angular dependence of sputtering yield by machine learning

小野耀斗,伊庭野健造,上田良夫,リハンテ

Akito Ono, Kenzo Ibane, Yoshio Ueda, Heun Tae Lee

大阪大学大学院工学研究科

Graduate School of Engineering, Osaka University

1.Introduction

現在使われているプラズマプロセスにおいてスパッタリングは最も基本的なプロセスの一つであり、様々な用途が存在する現象である。また、核融合研究では核融合によって生まれるイオンがスパッタリングを起こすことによる炉の劣化が課題となっている。スパッタリング率の予測できると、核融合炉の劣化予測が可能になり、原子炉管理コストの削減が期待できる。また、適切な蒸着膜を形成できるため半導体の製造の効率化も期待できる。

このスパッタリング現象は複雑であり、単純な単元素物質に対する単元素イオンの衝突の場合でも完全な予測は難しく、演繹的な理論式は存在しない。現在の予測式は過去に得られた実験及びシミュレーションから得られたスパッタリング率に関するデータに対し、解析関数をフィットすることで作成されている。

しかし、従来の手法は先行研究からなる歴史的な研究の流れに従って構成されており、式の変数はこれらの先行研究を参考に作成されている。これに対し本研究では、機械学習を使って実験データからモデルを作成する。それによって従来の式には無い変数の重要性を評価することが可能となる。これにより新しい変数を得ることができれば、その変数を使ったより簡単な式の存在を示唆できる。

また、本研究の先行研究に機械学習を使ったスパッタリング率のエネルギー依存性を予測した研究が存在する。しかし、スパッタリング率は垂直入射の場合よりも斜角の方が大きくなる傾向がある。そのため本研究ではスパッタリングをより効率よく起こすために角度依存性を含めたモデルを作成した。本研究では機械学習を使ってスパッタリング率を予測することで、本手法の予測性能と予測のために重要となる記述子の知見を得ることを目的とした。

2.Experiment

本研究は過去に得られた実験データ[1]を使用して行われた。本研究は以下の流れで進めた。まず、予測に使用する記述子候補をリストアップし、ピアソンの相関係数を基準にグループ化を行っ

た。その後、記述子グループを使って4つの回帰方法を検証することで最適な方法を調べた。使用した回帰方法は線形リッジ回帰、カーネルリッジ回帰、サポートベクター回帰、ガウス過程回帰であった。次に、調べた回帰方法を使い、記述子グループのそれぞれの重要性を分析した。最後に、グラフを使い、精度を確認した。

3.Results

ガウス過程回帰を使用することでスパッタリング率を0.98という精度が得られた。また、現在使われている予測式には無い変数のうち、新しく照射イオンのファンデルワールス半径が重要であるという結果を得ることができた。これにより、ファンデルワールス半径を加えたより正確な式の存在を示唆できた。この結果は、スパッタリングの原子レベルの機構では照射イオンなどの大きさが深くかかわっていると考察できる。

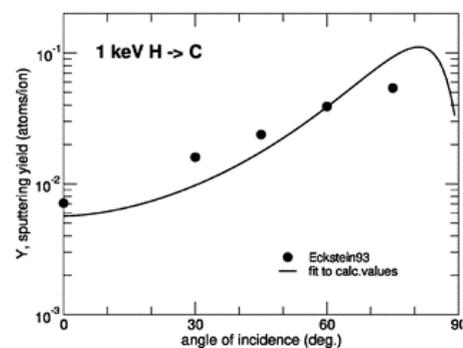


Figure 1 実験データ [1]

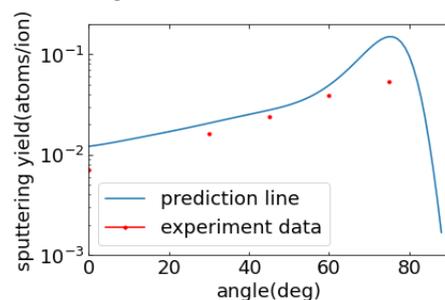


Figure 2 解析結果

[1]Rainer Behrisch, Wolfgang Eckstein "Sputtering by Particle Bombardment" pp.103-124 2007