

08

Построение прогнозных моделей для роста тонких пленок SiC/Si с использованием методов машинного обучения

© А.В. Редьков¹, Д.В. Роженцев¹, А.С. Гращенко¹, А.В. Осипов², С.А. Кукушкин¹

¹ Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: avredkov@gmail.com

Поступило в Редакцию 14 июля 2025 г.

В окончательной редакции 14 августа 2025 г.

Принято к публикации 14 августа 2025 г.

Продemonстрировано применение методов машинного обучения для прогнозирования свойств эпитаксиальных структур в многопараметрических технологических процессах, характеризующихся сложными нелинейными зависимостями. В качестве модельной системы исследован синтез тонких пленок карбида кремния на кремниевых подложках методом замещения атомов. Разработана нейросетевая модель, способная предсказывать ключевые характеристики получаемых пленок SiC на основе технологических параметров синтеза, включающих давление, температуру, тип подложки и иные условия. Выполнена комплексная оптимизация структуры модели и проведена валидация точности прогнозирования.

Ключевые слова: машинное обучение, нейросетевая модель, эпитаксиальный рост, SiC, Si, метод замещения атомов.

DOI: 10.61011/PJTF.2025.22.61581.20441

Методы машинного обучения (ML) и искусственного интеллекта, получившие бурное развитие в последние годы, все чаще используются для решения научных и научно-технологических задач, связанных с ростом кристаллов и эпитаксиальных тонких пленок [1,2]: от управления параметрами роста в реальном времени и оптимизации процессов синтеза [2,3] до анализа дефектности растущих образцов, RHEED-изображений и XRD-спектров [4–6]. Помимо этого методы машинного обучения все шире применяются для оптимизации и прогнозирования характеристик растущих тонких пленок на основе большого объема экспериментальных данных [7,8]. Это направление представляется крайне актуальным, поскольку в полупроводниковой индустрии используются все более сложные материалы и процессы, такие, например, как металлоорганическая или хлорид-гидридная эпитаксия нитридов галлия и алюминия [9]. Аналитическое описание подобных ростовых процессов в многокомпонентных системах с химическими реакциями, на результат которых влияют как термо- и газодинамика в объеме реактора, так и кинетика поверхностных процессов [10–13], зачастую невозможно или крайне неточно ввиду неполного знания всех материальных констант. В свою очередь методы машинного обучения, применяемые к экспериментальным данным непосредственно с ростовой установки, позволяют преодолеть эту проблему, выделить ключевые зависимости и построить прогнозных ML-модели без дополнительных допущений, свойственных теоретическим моделям, и без необходимости предварительного измерения материальных констант. Это делает методы машинного обучения

еще одним мощным инструментом для повышения описательной точности процессов синтеза.

Настоящая работа посвящена дальнейшему развитию этих методов и построению прогнозных ML-модели для описания роста тонких пленок карбида кремния (SiC) на Si методом замещения атомов, детально рассмотренным в обзоре [14]. Рост пленки в этом методе происходит вследствие реакции газа монооксида углерода (CO) непосредственно с материалом кремниевой подложки. Ключевыми параметрами роста являются температура, давление в камере реактора, потоки компонентов (силана, SiH₄ и CO), время синтеза. На процесс также влияют тип проводимости кремниевой подложки, ее удельная проводимость, кристаллографическая ориентация и ряд других факторов. Экспериментально показано, что в результате процесса на поверхности из материала подложки формируется тонкая пленка SiC, под которой находится подслон кремния, содержащий поры. Полученное методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) изображение скола типичного образца представлено на рис. 1, а.

Толщина монокристаллического слоя SiC, как было показано в [14], имеет крайне немонотонную зависимость от условий и обычно не превышает 200 nm, поскольку пленка формируется внутри подложки в результате проникновения в нее газа CO, и, если не применять дополнительные методики [15], после определенного момента формирования прекращается. Так, максимальная толщина SiC достигается при определенном давлении, тогда как дальнейшее его увеличение приводит к снижению толщины [14]. Толщина пористого слоя при фиксированных условиях имеет кор-

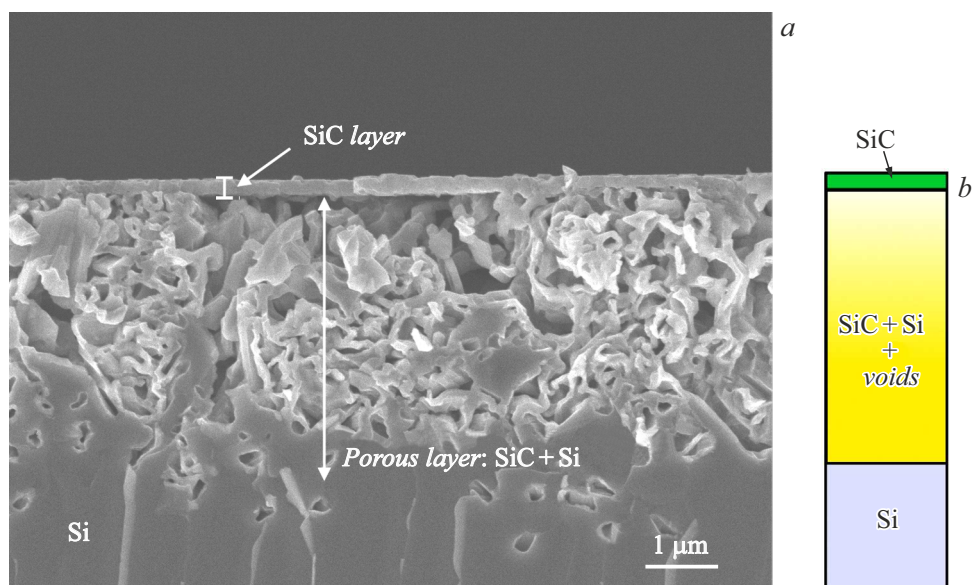


Рис. 1. *a* — СЭМ-изображение типичного скола образца SiC/Si, выращенного методом замещения атомов; *b* — схема эллипсометрической модели [14], с помощью которой измерялась толщина монокристаллического (верхнего) слоя SiC.

невую зависимость от времени, причем по характеру эта зависимость отличается от обычной диффузионной. Подробное описание механизмов и причин возникновения пористого слоя, а также модель его формирования представлены в обзоре [14] и работе [16]. Нахождение аналитической формулы, дающей точное предсказание толщины, кристаллического совершенства, плотности пор или иных характеристик в зависимости от условий синтеза для любого произвольного сочетания ростовых условий, представляется чрезвычайно сложной (если не невозможной) задачей. Вместе с тем, как было обозначено выше, использование методов машинного обучения позволяет эффективно решать подобные регрессионные многомерные задачи и находить скрытые зависимости $R(\mathbf{X})$ в массивах экспериментальных данных об эпитаксиальном процессе (R — интересующее исследователя свойство, например толщина пленки, ее дефектность, пористость или любое другое, которое может быть измерено в результате исследования образца после процесса роста, а $\mathbf{X}$ — вектор, описывающий условия синтеза, свойства подложки или иные важные факторы, которые могут повлиять на искомое свойство).

Необходимым условием получения адекватной прогнозной модели является достаточное количество данных. За время разработки метода замещения атомов [14] была накоплена обширная экспериментальная база данных о росте, включающая более 1000 экспериментов при различных сочетаниях ростовых параметров. Для каждого эксперимента с помощью эллипсометра J.A. Woollam M-2000 были определены свойства образца, включая толщину монокристаллического слоя SiC, согласно модели, представленной на рис. 1, *b*. Из них были выделены эксперименты (451 эксперимент), для которых, согласно эллипсометрической модели, толщина SiC была опреде-

лена максимально точно (со среднеквадратичной ошибкой MSE менее 0.5). Таким образом, итоговый набор данных, использованный для тренировки ML-модели, состоял из 451 строки, включающих 11 числовых и категориальных параметров процесса синтеза, в том числе тип кремниевой подложки (p -тип или n -тип); ее ориентацию (100), (110), (111); удельную проводимость ($3.5\text{--}10\,000\ \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$); время предварительного отжига в отсутствие газа (0–30 min); время синтеза (0–40 min); температуру (900–1330 °C); давление (0.05–8 Torr); расходы газов: общий (5–20 sccm), CO (5–20 sccm) и SiH₄ (0–1 sccm); температуру подачи газа CO (25–1200 °C), а также определенную методом эллипсометрии толщину пленки SiC на выросшем при данных условиях образце. К данным применялась нормализация для обеспечения устойчивости последующего процесса обучения нейросетевой ML-модели. Перед тренировкой данные были разбиты на тренировочную и тестовую выборки в пропорции 90/10 %.

Для построения модели использовались язык Python и библиотека PyTorch [17]. Схема модели представлена на рис. 2. Нахождение оптимальных гиперпараметров проводилось с помощью алгоритма TPE [18]. Оптимизации были подвергнуты как архитектура нейросети, так и параметры обучения, такие как количество скрытых слоев N нейросети (в диапазоне 2–5), число нейронов в скрытых слоях (32–512 нейронов), коэффициенты отсева (0.1–0.5), функции активации (ReLU, Tanh), скорости обучения (от 10^{-5} до 10^{-2}) и коэффициенты затухания весов нейронов (от 10^{-6} до 10^{-2}) [19]. После нахождения оптимальной комбинации гиперпараметров модель была обучена с ними до достижения минимума функции ошибки на тестовой выборке.

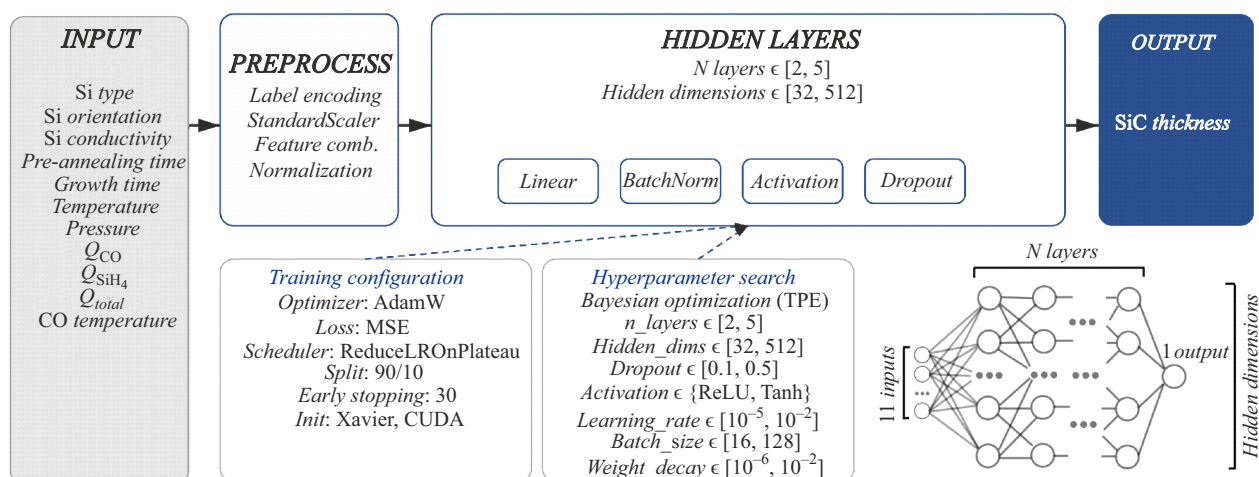


Рис. 2. Схема используемой нейросетевой модели для описания эпитаксиального процесса SiC/Si и ее тренировки: преобразование и масштабирование данных, подбор оптимальных гиперпараметров для наиболее точного описания, финальное обучение модели и оценка точности.

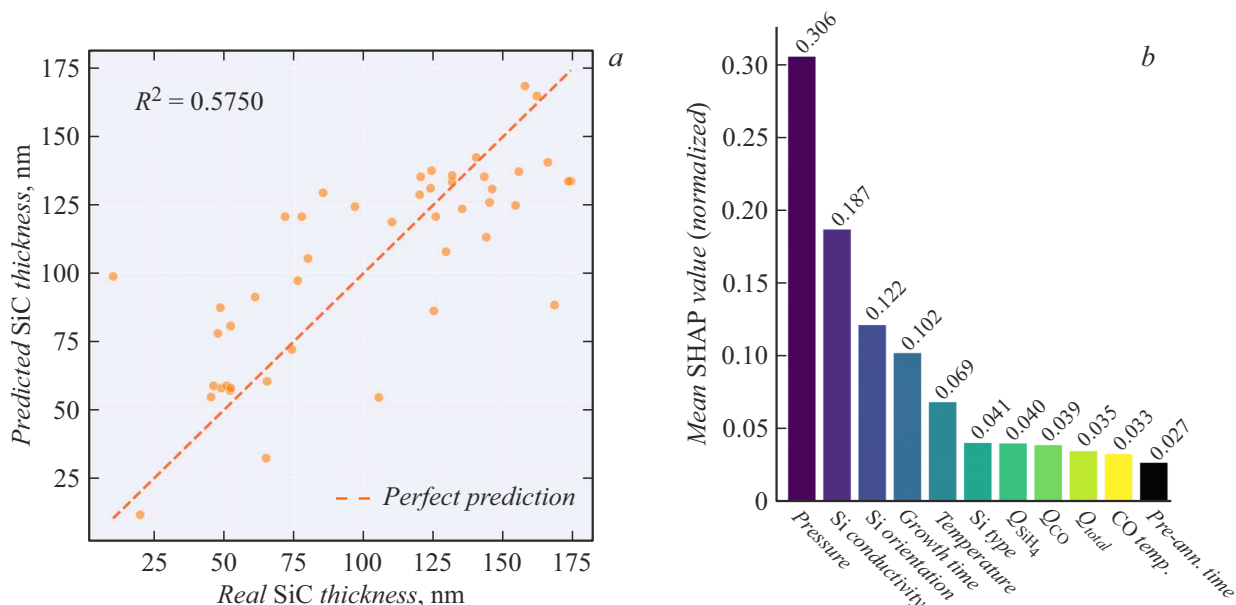


Рис. 3. *a* — сравнение истинных и предсказанных обученной моделью значений для толщины слоя SiC из тестовой части датасета (не использованной при обучении); *b* — оценка влияния параметров процесса синтеза на толщину SiC по методу SHAP [20].

Обученная нейросетевая модель продемонстрировала достаточно хорошую предсказательную силу с коэффициентом $R^2 = 0.57$ на независимом тестовом наборе, т. е. с успехом объясняет 57 % вариации искомой величины. Оставшаяся необъясненной вариация может быть вызвана как наличием шумов в данных (флуктуации и скачки давления, температуры при синтезе и др.), так и неучтенными факторами, такими как различные режимы подготовки пластин перед процессом синтеза. Значение средней абсолютной ошибки предсказания модели (MAE) составило 22 nm, что при общем диапазоне вариации толщины пленки SiC в диапазоне от 0 до ~ 200 nm составляет порядка 10 % от верхнего

предела. На рис. 3, *a* представлена визуализация предсказательной силы модели с помощью диаграмм рассеяния прогнозов в сравнении с фактическими значениями. Из рисунка видна сильная линейная корреляция между ними. Отметим, что с учетом сложности, многофакторности и нелинейности процесса роста SiC/Si методом замещения атомов [14], а также того факта, что для обучения модели не использовались никакие константы и априорные знания о процессе или о реакторе (модель работает лишь на основе имеющихся экспериментальных данных), такая точность представляется достаточно хорошей. Вместе с тем остается большое пространство для повышения точности, которого можно

достичь путем увеличения размера обучающего набора данных и учета дополнительных факторов, влияющих на рост. Одним из преимуществ ML-моделей является возможность оценки влияния того или иного входного параметра на результат прогноза. Полученные с помощью метода SHAP [20] оценки влияния входных параметров на толщину слоя SiC приведены на рис. 3, *b*. Высокое среднее значение SHAP для таких входных параметров, как давление, тип подложки, температура и время синтеза, указывает на то, что именно они являются ключевыми факторами в принятии решений моделью и отвечают за основную долю объясненной вариации. Остальные параметры, такие как потоки газов и время предварительного отжига, оказывают меньшее влияние, по крайней мере при их вариации в пределах диапазонов, исследованных в настоящей работе. Отметим, что в оптимизации эпитаксиальных процессов подобные метрики особенно ценны, поскольку они позволяют выявить ключевые параметры на ограниченном наборе дорогостоящих экспериментов, и в дальнейшем нужно исследовать именно их.

Таким образом, предложена и успешно реализована прогнозная нейросетевая модель, позволяющая с высокой точностью оценивать толщину выросшего монокристаллического слоя SiC на основе только лишь ростовых условий. Показано, что применение искусственных нейронных сетей для описания эпитаксиальных процессов имеет ряд преимуществ по сравнению с традиционными аналитическими подходами. Нейросетевые модели позволяют улавливать сложные нелинейные взаимосвязи между параметрами процесса и конечными свойствами пленки и при этом не требуют знания математических выражений, описывающих всю совокупность происходящих в реакторе явлений. Это особенно ценно в процессах эпитаксиального роста, где одновременно имеют место и кинетические процессы на поверхности растущего кристалла, и химические реакции, и газодинамика. Однако необходимо учитывать и ряд ограничений. Модель представляет собой „черный ящик“, что затрудняет ее интерпретируемость, и требует значительного количества экспериментов, что может быть трудоемким для новых материалов. Предсказательная сила определяется репрезентативностью данных и чувствительна к погрешностям измерений, что может привести к „запоминанию“ ложных корреляций вместо фундаментальных физических взаимосвязей. Однако, несмотря на эти ограничения, подход является ценным дополнением к традиционным методам описания эпитаксиальных явлений.

Благодарности

Исследования проводились с использованием оборудования УНУ „Физика, химия и механика кристаллов и тонких пленок“ (ИПМаш РАН, Санкт-Петербург).

Финансирование работы

А.С. Гращенко, С.А. Кукушкин и А.В. Редьков выполняли свою часть работы (синтез образцов, построение нейросетевой модели) в рамках государственного задания ИПМаш РАН (№ FFNF-2021-0001). А.В. Осипов выполнял свою часть работы (обработка данных, измерение свойств образцов) при поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания по контракту СПбГУ № 129360164.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] N.G. Orji, M. Badaroglu, B.M. Barnes, C. Beitia, B.D. Bunday, U. Celano, R.J. Kline, M. Neisser, Y. Obeng, A.E. Vadar, *Nat. Electron.*, **1** (10), 532 (2018). DOI: 10.1038/s41928-018-0150-9
- [2] Y.K. Wakabayashi, T. Otsuka, Y. Krockenberger, H. Sawada, Y. Taniyasu, H. Yamamoto, *APL Mater.*, **7** (10), 101114 (2019). DOI: 10.1063/1.5123019
- [3] G. Wu, Y. Wang, Q. Gong, L. Li, X. Wu, *IEEE Access*, **10**, 9848 (2022). DOI: 10.1109/ACCESS.2022.3143811
- [4] H. Shi, Z. Jin, W. Tang, J. Wang, K. Jiang, M. Xu, W. Xia, X. Xu, *Knowledge-Based Syst.*, **280**, 110994 (2023). DOI: 10.1016/j.knosys.2023.110994
- [5] T.C. Kaspar, S. Akers, H.W. Sprueill, A.H. Ter-Petrosyan, J.A. Bilbrey, D. Hopkins, A. Harilal, J. Christudasjustus, P. Gemperline, R.B. Comes, J. Vac. Sci. Technol. A, **43** (3), 032702 (2025). DOI: 10.1116/6.0004493
- [6] R.K. Vasudevan, A. Tselev, A.P. Baddorf, S.V. Kalinin, *ACS Nano*, **8** (10), 10899 (2014). DOI: 10.1021/nn504730n
- [7] I. Ohkubo, Z. Hou, J.N. Lee, T. Aizawa, M. Lippmaa, T. Chikyow, K. Tsuda, T. Mori, *Mater. Today Phys.*, **16**, 100296 (2021). DOI: 10.1016/j.mtphys.2020.100296
- [8] A.V. Redkov, *Acta Mater.*, **287**, 120762 (2025). DOI: 10.1016/j.actamat.2025.120762
- [9] V.N. Bessolov, D.V. Karpov, E.V. Konenkova, A.A. Lipovskii, A.V. Osipov, A.V. Redkov, I.P. Soshnikov, S.A. Kukushkin, *Thin Solid Films*, **606**, 74 (2016). DOI: 10.1016/j.tsf.2016.03.034
- [10] A.V. Redkov, S.A. Kukushkin, *Cryst. Growth Des.*, **20** (4), 2590 (2020). DOI: 10.1021/acs.cgd.9b01721
- [11] A. Redkov, *Front. Chem.*, **11**, 1189729 (2023). DOI: 10.3389/fchem.2023.1189729
- [12] A. Redkov, S. Kukushkin, *Faraday Discuss.*, **235**, 362 (2022). DOI: 10.1039/D1FD00083G
- [13] A. Redkov, *Crystals*, **14** (1), 25 (2023). DOI: 10.3390/cryst14010025
- [14] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, *J. Phys. D*, **47**, 313001 (2014). DOI: 10.1088/0022-3727/47/31/313001
- [15] A.S. Grashchenko, S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, A.V. Redkov, *Catal. Today*, **397**, 375 (2022). DOI: 10.1016/j.cattod.2021.08.012
- [16] А.В. Редьков, А.С. Гращенко, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, К.П. Котляр, А.И. Лихачев, А.В. Нашекин, И.П. Сошников, *ФТТ*, **61** (3), 433 (2019). DOI: 10.21883/FTT.2019.03.47232.265 [A.V. Redkov, A.S. Grashchenko, S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, K.P. Kotlyar, A.I. Likhachev, A.V. Nashchekin, I.P. Soshnikov, *Phys. Solid State*, **61**, 299 (2019). DOI: 10.1134/S1063783419030272].

- [17] A. Paszke, arXiv:1912.01703 (2019).
- [18] T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta, M. Koyama, in *Proc. of the 25th ACM SIGKDD Int.Conf. on Knowledge Discovery & Data Mining* (Anchorage, USA, 2019), p. 2623–2631. DOI: 10.1145/3292500.3330701
- [19] M. Feurer, F. Hutter, in *Automated machine learning*, ed. by F. Hutter, L. Kotthoff, J. Vanschoren (Springer, Cham, 2019), p. 3–33. DOI: 10.1007/978-3-030-05318-5_1
- [20] W.E. Marcilio, D.M. Eler, in *2020 33rd SIBGRAPI Conf. on Graphics, Patterns and Images (SIBGRAPI)* (IEEE, 2020), p. 340–347. DOI: 10.1109/SIBGRAPI51738.2020.00053