

宇佐美 徳隆

名古屋大学大学院工学研究科  
教授

多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立と  
スマートシリコンインゴットの創製

## § 1. 研究実施体制

### (1) 宇佐美グループ

- ① 研究代表者:宇佐美 徳隆 (名古屋大学大学院工学研究科 教授)
- ② 研究項目
  - ・多結晶からのデータ収集方法とデータ処理方法の開発
  - ・ナノ領域の精密評価
  - ・シリコン溶融凝固炉の熱流体シミュレーション

### (2) 工藤グループ

- ① 主たる共同研究者:工藤 博章 (名古屋大学大学院情報学研究科 准教授)
- ② 研究項目
  - ・多結晶からのデータ収集方法とデータ処理方法の開発
  - ・データ蓄積および処理のための環境の構築

### (3) 横井グループ

- ① 主たる共同研究者:横井 達矢 (名古屋大学大学院工学研究科 助教)
- ② 研究項目
  - ・理論計算による粒界構造の予測
  - ・実験・理論の連携による粒界構造の決定(理論的アプローチ)
  - ・理論計算による粒界偏析駆動力の解析

(4)大野グループ

① 主たる共同研究者:大野 裕 (東北大学金属材料研究所 准教授)

② 研究項目

- ・ナノ領域の精密評価のための試料作製手法の開発
- ・実験・理論の連携による粒界構造の決定(実験的アプローチ)
- ・一般粒界の構造・不純物偏析能・キャリア再結合速度の評価

## § 2. 研究実施の概要

本研究では、組織の複雑さと粒界の多様性により、普遍的な高性能化指針が不明確であった多結晶材料を対象とし、大量の実用多結晶ウェーハに対するデータ収集・機械学習・理論計算の連携により、一般粒界の構造・物性の理論構築を行う多結晶材料情報学を開拓する。

本年度は、①多結晶組織とその動的変化からの特徴抽出、②一般粒界における粒界構造と物性の解明、③ 高機能粒界を実装したスマートシリコンインゴットの創製の各研究項目に対して、研究計画の実施に必要な各グループの基盤技術の開発とグループ間の連携を進めた。

宇佐美グループと工藤グループは、データ収集と情報処理技術を随時フィードバックさせ、多結晶組織の動的変化の痕跡である多結晶シリコンインゴットの複雑な組織と欠陥分布から太陽電池特性に影響を与える特徴を抽出する手法の開発を進めた。その過程において、実用多結晶シリコンウェーハの蛍光イメージングに画像処理を適用することで、多結晶組織と欠陥分布を可視化し、さらに2次元画像の積層により多結晶シリコンインゴット中の組織と転位クラスターの3次元分布を可視化する技術を開発した。転位クラスターの抽出では、特徴の候補として係数を非負値に限定する手法の有用性を明らかにした。これらの手法により、複雑な多結晶組織から転位クラスターの発生点などの特徴領域を効率的に抽出することが可能となった。

大野グループでは、宇佐美グループ・工藤グループが抽出した特徴領域に対し、その原子構造を解明するための試料作製手法を開発し、粒界構造、不純物偏析能の評価を進めている。横井グループでは、多結晶シリコンインゴット中に高頻度で含まれる対応粒界を対象として、安定な粒界構造および粒界物性の予測のための計算手法・条件について検討を行った。高分解能走査透過電子顕微鏡(STEM)観察像のある粒界を対象に、原子間ポテンシャルおよび密度汎関数タイトバインディング法による焼きなまし法を検討した結果、正確な粒界構造が得られない場合があることが明らかとなった。この問題を踏まえ、大野グループの実験結果との対応に重点をおき、STEM観察像から粒界モデルを作成して第一原理計算により原子配列や粒界エネルギーの妥当性を評価することとした。大野グループ・横井グループの連携により、粒界の構造安定性と形成過程の解明や、粒界構造と不純物偏析能の相関に関する理論構築が進んでいる。

インゴット創製に向けては、結晶成長炉内の各種計測データとの連携による炉内環境の高精度シミュレーションのための環境整備として、結晶成長解析用ソフトウェアと電子計算機を導入し、温度場・流れ場に与える各種パラメータの依存性について、メッシュサイズや収束判定基準など、妥当な計算結果を短時間で得るための基本条件の探索を進めた。

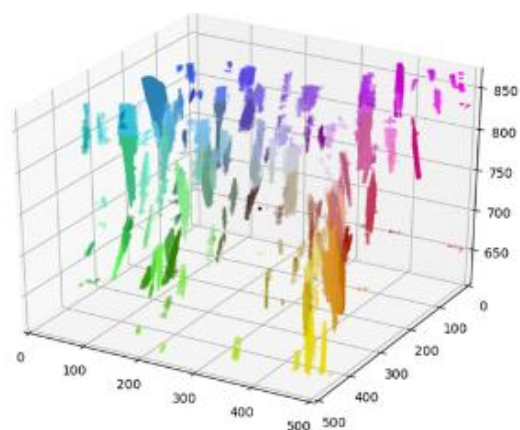


図 多結晶シリコンインゴット中の転位クラスターの3次元分布(個々のクラスターを異なる色で表示、底面が156mm角のブロックに対応)