

実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新
2017 年度採択研究代表者

2018 年度 実績報告書

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. 研究成果の概要

複雑な多結晶組織からの特徴抽出では、宇佐美グループと工藤グループが連携し、大量の実用多結晶シリコンウェーハの反射・蛍光イメージから再構成した多結晶シリコンインゴットの組織と欠陥分布の 3 次元構造から、インゴットの高品質化指針の確立に有用な数値情報の取得を試みた。

転位クラスターの伝搬方向や分布の偏りを数値情報として取得し、転位密度との明確な相関を見出した。工藤グループでは、白色 LED 光源と高解像度の 2 次元輝度計により、入射光の方向を変化させながら実用サイズ of 多結晶シリコンウェーハ全体の反射イメージを自動収集できる装置を設計・導入した。入射光の方向に依存した反射率プロファイルと結晶粒方位との相関に着目し、反射率プロファイルから結晶粒方位を予測する手法の実装を進め、精度改善に向けた課題を明確にした。また、蛍光イメージから転位を含む領域を自動抽出する手法について、連続する複数のイメージや転移学習の利用などによる高性能化について検討した。

一般粒界における粒界構造と物性の解明に向け、宇佐美グループでは、ウェーハ表面に対して任意の傾斜角を有する一般粒界に対して適用可能な電気的特性の定量評価法のための基盤を構築した。工藤グループ・宇佐美グループは、結晶方位情報を、逐次的な双晶形成により生じる方位関係を記述する回転四元数に対して参照することで多結晶組織の発生関係を解析する手法の開発を進めた。大野グループ・横井グループの連携により、対応粒界からの傾角や面方位のずれが、粒界構造や粒界物性に与える影響を調査し、粒界近傍の原子構造、粒界エネルギー、不純物偏析能の関係の解明を進めた。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転位発生点近傍の構造評価に着手した。横井グループでは、先行研究で広く用いられてきた経験的原子間ポテンシャルが多結晶シリコンの基本的な粒界を再現できないことから、高精度・高速で粒界構造が予測可能な、機械学習型原子間ポテンシャルを独自に作成した。多数の教師データにより原子間ポテンシャルを学習させ、テストデータに対しても高い予測能力があることを示した。

機能性粒界を実装したスマートシリコンインゴットの実現に向け、宇佐美グループでは、結晶成長炉の改造により多点温度測定を可能とし、温度測定結果と結晶成長装置の情報を収集・管理するシステムを構築した。また、複数のセンサの配置を機械学習により決定する汎用性のある新規手法を考案し、熱電対位置の選定に適用した。さらに、重み付きボロノイ図を利用した核形成サイトの解析手法の開発など結晶成長を精密に制御するための基盤構築を進めた。また、転位クラスター発生点の幾何学的特徴についての知見をベースに、高機能粒界により転位をインゴットの切りしろ部分に局在させて高密度に発生させることで、インゴット内部の転位を低減させる新たな擬単結晶インゴット成長法を考案し、ドイツ・フラウンホーファー太陽エネルギー研究所と連携して実用サイズインゴット成長への適用を試みた。参照用インゴットと比較して、多結晶化の抑制や、少数キャリア寿命を指標とした結晶品質の向上が見られ、高品質インゴット製造技術としての有用性を実証した。

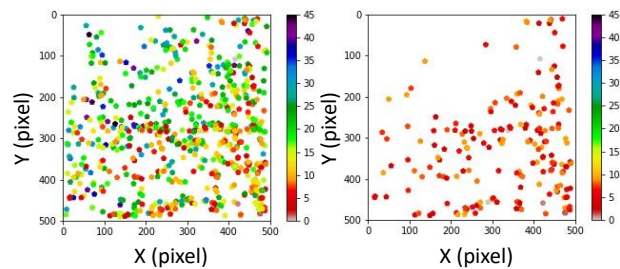


図 1 転位クラスターの傾きと中心座標(x, y)の分布。右図では傾きの小さい転位クラスターを抽出している。

【代表的な原著論文】

Yutaka Ohno, Haruhiko Morito, Kentaro Kutsukake, Ichiro Yonenaga, Tatsuta Yokoi, Atsutomo Nakamura, and Katsuyuki Matsunaga, “Interaction of sodium atoms with stacking faults in silicon with different Fermi levels”, Applied Physics Express, vol. 11, 061303/1-4, 2018

Tetsurou Muramatsu, Yusuke Hayama, Kentaro Kutsukake, Kensaku Maeda, Tetsuya Matsumoto, Hiroaki Kudo, Kozo Fujiwara, and Noritaka Usami, “Applicaiton of weighted Voronoi diagrams to analyze nucleation sites of multicrystalline silicon ingots”, Journal of Crystal Growth, vol. 499, pp. 62-66, 2018

Yusuke Hayama, Tetsuya Matsumoto, Tetsurou Muramatsu, Kentaro Kutsukake, Hiroaki Kudo, and Noritaka Usami, “3D visualization and analysis of dislocation clusters in multicrystalline silicon ingot by approach of data science”, Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 189, pp.239-244, 2019

§ 2. 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

- ・多結晶の組織・欠陥の3次元構造からの数値情報の取得と解析
- ・機械学習による結晶粒方位分布の推定
- ・一般粒界の電気的特性の定量評価法の開発
- ・多結晶組織の発生関係を解析する手法の開発
- ・多結晶シリコン中の転位発生点近傍の構造特性
- ・マルチデータ計測・シミュレーションの高精度化
- ・重み付きボロノイ図を用いた核形成サイトの解析
- ・析出物を利用した3次元固液界面形状の可視化
- ・高品質擬単結晶インゴットの具現化

(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

- ・機械学習による結晶粒方位分布の推定
- ・転位領域の抽出精度向上
- ・多結晶組織の発生関係を解析する手法の開発
- ・多結晶シリコン中の転位発生点近傍の構造特性
- ・重み付きボロノイ図を用いた核形成サイトの解析

(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

- ・多結晶シリコンにおける非対称大傾角粒界の構造と不純物集積能の相関
- ・多結晶シリコンの一般粒界構造および物性の解析に向けた機械学習型原子間ポテンシャル
- ・シリコン粒界の不純物偏析挙動の解析を可能とする多元系原子間ポテンシャル
- ・大規模系シリコン粒界の物性解析に向けたニューラルネットワーク駆動型分子シミュレーション法

(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

- ・FIB-STEM・APT 法を用いた粒界構造評価における FIB 加工温度の影響

- 多結晶シリコンにおける非対称大傾角粒界の構造と不純物集積能の相関
- 多結晶シリコン中の転位発生点近傍の構造特性