

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

2019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

本研究では、実用材料として広く社会に普及している多結晶材料の普遍的な高性能化指針の確立に向け、太陽電池の主要材料で結晶構造もシンプルなシリコンをモデルとして、実験・理論・計算・データ科学の融合による新たな材料開発手法の構築を目指している。

宇佐美グループ・工藤グループでは、複雑な組織を有する多結晶シリコンウェーハから多次元光学イメージを収集し、機械学習による識別も含めた画像処理プロセスを適用することで、結晶粒界の抽出を可能とした。結晶欠陥の情報を含む蛍光イメージと併せて検討することで、多結晶材料の性能に大きな影響を及ぼす転位クラスター発生点の網羅的な抽出や、幾何学的な特徴の調査を行った。特徴の抽出にあたっては、画像識別を行う学習済みニューラルネットワークの転移学習を適用することについても検討を進めた。これらの結果、転位クラスターの発生点は、任意に抽出した点と比較して粒界三重点に近い位置に分布する傾向が見られた。そのメカニズム解明に向けては、結晶学的な情報を重畳させることが不可欠であり、工藤グループが中心となり、多次元光学イメージから機械学習により結晶粒方位を高精度に予測する手法の開発を進め、特許出願を行った。これまでに、数 1,000 個の結晶粒に対する教師データを用いて、中央値に対する推定誤差が 6.2° 程度の学習が実施できた。

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、一般粒界の電気的特性として、粒界の傾斜角の効果を取り入れた光照射時の粒界近傍のキャリアシミュレーションと蛍光強度プロファイルにより、粒界のキャリア再結合速度の定量評価を行った。また、工藤グループ・宇佐美グループは、多結晶組織の発生関係を解析する手法をハイパフォーマンス多結晶に適用し、ランダム粒界と高次対応粒界の識別を可能とした。横井グループは、シリコンの一般粒界に対して汎用性の高い ANN 原子間ポテンシャルを構築し、最大 10^4 原子以上の小傾角粒界モデルに適用することで、大規模かつ高シグマ値である粒界に対しても妥当な粒界構造を予測できることを示した。また、多元系への拡張により、不純物位置の予測を可能とするとともに、分子シミュレーションに展開するための環境整備として省メモリ化やプログラムの最適化を進めている。大野グループでは、粒界構造や不純物偏析能の精緻な実験を進めるとともに、表面活性化接合法による非対称粒界の形成実験を開始した。

高品質インゴットの実現に向け、宇佐美グループでは、前年度構築した機械学習モデルを発展させ、マルチデータ計測のための最適熱電対位置を決定するとともに、シミュレーション高精度化のためのパラメータ推定を進めている。また、固液界面形状制御のための成長条件探索をシミュレーションにより実施した。ドイツ・フラウンホーファー太陽エネルギー研究所とは、高機能粒界を利用した擬単結晶インゴットの成長に関して連携を継続している。さらに、横井グループ・大野グループで解析を実施するための非対称粒界を含むインゴット成長用の種結晶を設計・作製した。

【代表的な原著論文】

Tatsuya Yokoi, Yusuke Noda, Atsutomo Nakamura, Katsuyuki Matsunaga, “Neural-network interatomic potential for grain boundary structures and their energetics in silicon”, Phys. Rev. Materials, vol. 4, 014605 (15 pages), 2020

Soichiro Kamibeppu, Patricia Krenckel, Theresa Trötschler, Adam Hess, Stephan Riepe and Noritaka Usami, “3D visualization of growth interfaces in cast Si ingot using inclusions distribution”, *Journal of Crystal Growth*, vol. 535, 125535 (5 pages), 2020

Abderahmane Boucetta, Kentaro Kutsukake, Takuto Kojima, Hiroaki Kudo, Tetsuya Matsumoto and Noritaka Usami, “Application of artificial neural network to optimize sensor positions for accurate monitoring: an example with thermocouples in a crystal growth furnace”, *Appl. Phys. Express*, vol. 12, No. 12, 125503 (5 pages), 2019

§ 2. 研究実施体制

(1) 宇佐美グループ(名古屋大学)

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

- ・ 多次元光学イメージからの結晶粒界抽出
- ・ 転位クラスター発生点の特徴についての解析
- ・ 多結晶ウェーハの多次元光学イメージから結晶粒方位の高精度予測
- ・ 多結晶組織の発生関係を解析する手法の開発
- ・ 一般粒界の電気的特性の定量評価法の開発
- ・ マルチデータ計測・シミュレーションの高精度化
- ・ 固液界面形状と結晶品質の関係の検討
- ・ 高品質擬単結晶インゴットの具現化
- ・ 非対称粒界を含むインゴット用の種結晶の設計と作製

(2) 工藤グループ(名古屋大学)

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

- ・ 多次元光学イメージからの結晶粒界抽出
- ・ 転位クラスター発生点の特徴についての解析
- ・ 多結晶ウェーハの多次元光学イメージから結晶粒方位の高精度予測
- ・ 多結晶組織の発生関係を解析する手法の開発

(3) 横井グループ(名古屋大学)

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

- ・ 機械学習型原子間ポテンシャルによる非対称粒界と高シグマ値粒界の原子構造の探索
- ・ 非対称粒界と高シグマ値粒界を対象とした不純物の粒界偏析能の解析
- ・ 一般粒界の解析に向けた大規模分子シミュレーション環境の構築
- ・ 非対称粒界を含むインゴット用の種結晶の設計と作製

(4) 大野グループ(東北大学)

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

- ・ 転位クラスター発生点の特徴についての解析
- ・ 非対称粒界と高シグマ値粒界を対象とした不純物の粒界偏析能の解析