

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

2020 年度 年次報告書

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

研究開発項目①多結晶組織とその動的変化からの特徴抽出では、多結晶シリコンウェーハから収集したデータ駆動による研究基盤の高度化と複合化を進めた。多次元光学イメージから結晶方位を推定する機械学習モデルでは、実験的及びデータ手法的なデータ増強により、推定精度を大幅に向上させた。また、粒界を抽出して作成した多結晶モデルと、蛍光イメージから抽出した転位クラスターの発生点を併せて解析を行い、転位クラスター発生点を含む結晶粒の形状は円形度が小さい傾向にあることを見出した。さらに、学習済みニューラルネットワークの転移学習により転位クラスターの発生確率の空間分布を予測可能とした。

研究開発項目②一般粒界における粒界構造と物性の解明では、粒界でのキャリア再結合速度の定量評価手法を構築し、計算や精密実験との連携への見通しを得た。また、転位クラスター発生点や様々な非対称粒界のマルチスケール構造解析により、粒界3重点と相互作用するシグマ3粒界からの転位発生や界面構造のモデルを構築した。さらに、不純物分布の精密評価を進め、集積源となるナノ構造のモデル化を進めた。人工ニューラルネットワーク原子間相互作用ポテンシャル(ANN ポテンシャル)を利用した原子構造計算では、多様な対称傾角粒界について原子構造を得るとともに、予測能力を向上させる学習データの収集方法を提案した。現実的な計算時間で、数万原子の小傾角粒界モデルの安定な転位構造の予測を可能とし、さらに、化合物半導体や酸化物の粒界を対象に学習データを収集、ANN ポテンシャルの横展開を進めた。

研究開発項目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では、さまざまな非対称粒界を含む結晶の成長実験を進めるとともに、実測した固液界面形状や温度を再現するようにシミュレーションモデルの改良を進めた。

§ 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

- ・機械学習モデルによる多次元光学イメージを利用した結晶方位推定
- ・機械学習による転位クラスター発生領域の空間分布予測手法の開発
- ・多次元光学イメージを利用した多結晶3次元モデルの作成と統計解析
- ・一般粒界の電気的特性の定量評価法の開発
- ・転位発生を特徴づけるナノ構造の同定
- ・粒界構造を制御したモデル結晶成長
- ・マルチデータ計測を利用した熱流体シミュレーションの高精度化

(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

- ・機械学習モデルによる多次元光学イメージを利用した結晶方位推定
- ・機械学習による転位クラスター発生領域の空間分布予測手法の開発
- ・ネットワークグラフを用いた多結晶組織の発生関係の解析
- ・多次元光学イメージを利用した多結晶3次元モデルの作成と統計解析
- ・転位発生を特徴づけるナノ構造の同定

(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

- ・非対称粒界の構造と不純物集積能を特徴づけるナノ構造の解析
- ・ANN ポテンシャルとDFT 計算による多様な粒界の原子・電子構造の解析
- ・ANN ポテンシャルと組合せ最適化手法による不純物偏析サイトを決定する手法の構築
- ・シリコン多結晶の大規模計算を想定した予備検討
- ・化合物半導体および酸化物粒界を対象とした ANN ポテンシャルの横展開
- ・粒界構造を制御したモデル結晶成長

(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

- ・多次元光学イメージを利用した多結晶3次元モデルの作成と統計解析
- ・転位発生を特徴づけるナノ構造の同定
- ・非対称粒界の構造と不純物集積能を特徴づけるナノ構造の同定

【代表的な原著論文情報】

- [1] K. Mitamura, K. Kutsukake, T. Kojima, and N. Usami, "Determination of carrier recombination velocity at inclined grain boundaries in multicrystalline silicon through photoluminescence imaging and carrier simulation," *J. Appl. Phys.*, vol. 128, no. 12, 2020, doi: 10.1063/5.0017823.
- [2] Y. Ohno, K. Tajima, K. Kutsukake, and N. Usami, "Generation of dislocation clusters at triple junctions of random angle grain boundaries during cast growth of silicon ingots," *Appl. Phys. Express*, vol. 13, no. 10, 2020, doi: 10.35848/1882-0786/abbb1c.
- [3] Y. Ohno *et al.*, "Insight into segregation sites for oxygen impurities at grain boundaries in silicon," *Appl. Phys. Express*, vol. 14, no. 4, 2021, doi: 10.35848/1882-0786/abe80d.