

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

2021 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

多結晶シリコンの蛍光画像を利用した転位クラスターの 3 次元分布から抽出した転位クラスター発生点を含む領域において、多次元光学画像を利用した結晶粒のセグメンテーションと機械学習モデルによる方位予測を統合し、実データに基づく現実的な多結晶 3 次元モデルを作成した。さらに、結晶成長シミュレーションにより得られた温度分布と内部応力を参照して応力解析を行った。解析と透過型電子顕微鏡観察の結果から、最も大きな応力がかかった主すべり系に沿って転位が発生したことが分かった。また、主すべり系と結晶粒界の位置関係によって転位が発生・増殖する結晶粒としない結晶粒が存在することを明らかにした。並行して、光学画像から蛍光画像への画像変換を転位発生の結晶学的なメカニズム解明に利用する基礎検討を行った。多結晶組織の方位関係を逐次的な双晶形成によるネットワークグラフとして記述する解析手法では、数千個の結晶粒を扱う大規模化や正方晶への展開を進めた。

一般粒界における粒界構造と物性の解明に向け、人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを利用した高速・高精度計算の適用範囲を点欠陥クラスターの形成挙動や化合物半導体の粒界構造に拡張した。原子スケールの構造解析により、転位発生や不純物集積能を特徴づけるナノ構造を同定した。

高品質インゴットの実現に向け、人工粒界を含むインゴットを独自に成長し、非対称粒界の粒界構造と粒界成長方向についての系統的な調査を行った。その結果、粒界エネルギーとその安定性により半定量的に実験結果を説明できることを示した。また、結晶成長シミュレーションの代理モデルを作成し、成長条件がインゴットの残留応力や転位密度に与える影響の高速予測を可能とした。代理モデルと最適化アルゴリズムを組み合わせることで、転位密度を低減する成長プロセスを設計し、その有用性を実証した。

## § 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

##### 1) 多結晶組織とその動的変化からの特徴抽出

- ・機械学習による結晶方位推定における訓練データ最適化と誤差分析  
(工藤グループと連携)
- ・多結晶シリコン組織の3次元再構築と応力計算による転位クラスター解析  
(工藤グループ、大野グループと連携)
- ・光学画像から蛍光画像への変換による転位クラスター生成要因の自動抽出  
(工藤グループと連携)

##### 2) 一般粒界における粒界構造と物性の解明

- ・転位発生を特徴づけるナノ構造の解析(工藤グループ、大野グループと連携)

##### 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

- ・シリコン融液成長過程において粒界構造が粒界の成長方向に与える影響の解明  
(工藤グループ、大野グループと連携)
- ・結晶成長シミュレーションの代理モデル作成と高品質結晶成長プロセス設計

### (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

##### 1) 多結晶組織とその動的変化からの特徴抽出

- ・機械学習による結晶方位推定における訓練データ最適化と誤差分析  
(宇佐美グループと連携)
- ・多結晶シリコン組織の3次元再構築と応力計算による転位クラスター解析  
(宇佐美グループ、大野グループと連携)
- ・光学画像から蛍光画像への変換による転位クラスター生成要因の自動抽出  
(宇佐美グループと連携)
- ・多結晶組織のネットワーク解析の拡張(研究加速若手、小島、山本チームと連携)
- ・結晶方位推定のためのラインスキャン型反射特性測定装置の開発(研究加速若手、小島)

##### 2) 一般粒界における粒界構造と物性の解明

- ・転位発生を特徴づけるナノ構造の解析(宇佐美グループ、大野グループと連携)

##### 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

- ・シリコン融液成長過程において粒界構造が粒界の成長方向に与える影響の解明  
(宇佐美グループ、大野グループと連携)

### (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 講師)

② 研究項目

2) 一般粒界における粒界構造と物性の解明

- ANN ポテンシャルによるシリコン対称傾角粒界の原子構造の予測(大野グループと連携)
- ANN ポテンシャルと第一原理計算によるシリコン中の点欠陥クラスターの形成挙動の解析
- ANN ポテンシャルによる化合物半導体粒界の安定構造の予測(研究加速若手、横井)
- 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(大野グループと連携)

(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

1) 多結晶組織とその動的変化からの特徴抽出

- 多結晶シリコン組織の3次元再構築と応力計算による転位クラスター解析  
(宇佐美グループ、工藤グループと連携)

2) 一般粒界における粒界構造と物性の解明

- ANN ポテンシャルによるシリコン対称傾角粒界の原子構造の予測(横井グループと連携)
- 粒界構造と物性の解明
- 転位発生を特徴づけるナノ構造の解析(宇佐美グループ、工藤グループと連携)
- 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  
(横井グループ、山本チームと連携)

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

- シリコン融液成長過程において粒界構造が粒界の成長方向に与える影響の解明  
(宇佐美グループ、工藤グループと連携)

#### 【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Ushiro, T. Yokoi, Y. Noda, E. Kamiyama, M. Ohbitsu, H. Nagakura, K. Sueoka, K. Matsunaga, "Preferential Growth Mode of Large-Sized Vacancy Clusters in Silicon: A Neural-Network Potential and First-Principles Study," *J. Phys. Chem. C*, vol. 125, no. 48, pp. 26869-26882, 2021, doi: 10.1021/acs.jpcc.1c07973.
- 2) T. Yokoi, K. Adachi, S. Iwase, and K. Matsunaga, "Accurate prediction of grain boundary structures and energetics in CdTe: A machine-learning potential approach," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 24, no. 3, pp. 1620-1629, 2022, doi: 10.1039/d1cp04329c.
- 3) Y. Ohno, T. Yokoi, Y. Shimizu, J. Ren, K. Inoue, Y. Nagai, K. Kutsukake, K. Fujiwara, A. Nakamura, K. Matsunaga, and H. Yoshida, "Segregation mechanism of arsenic dopants at grain boundaries in silicon," *Sci. Technol. Adv. Mater. Methods*, vol. 1, no. 1, pp. 169-180, 2021, doi: 10.1080/27660400.2021.1969701.

- 4) Y. Fukuda, K. Kutsukake, T. Kojima, and N. Usami, “Effects of grain boundary structure and shape of the solid-liquid interface on the growth direction of the grain boundaries in multicrystalline silicon,” *CrystEngComm*, vol. 24, no. 10, pp. 1948-1954, 2022, doi: 10.1039/d1ce01573g.
- 5) X. Liu, Y. Dang, H. Tanaka, Y. Fukuda, K. Kutsukake, T. Kojima, T. Ujihara, N.Usami, “Data-Driven Optimization and Experimental Validation for the Lab-Scale Mono-Like Silicon Ingot Growth by Directional Solidification,” *ACS Omega*, vol. 7, no. 8, pp. 6665-6673, 2022, doi: 10.1021/acsomega.1c06018.