

## 炭素偏析シリコン粒界のための人工ニューラルネットワーク 原子間ポテンシャルの開発

### Development of Artificial Neural-Network Interatomic Potentials

#### for Silicon Grain Boundaries with Carbon Segregation

名大工<sup>1</sup>, JFCC<sup>2</sup> ◯野田 祐輔<sup>1</sup>, 横井 達矢<sup>1</sup>, 中村 篤智<sup>1</sup>, 松永 克志<sup>1,2</sup>

Department of Materials Physics, Nagoya University<sup>1</sup>, Japan Fine Ceramics Center<sup>2</sup>

◯Yusuke Noda<sup>1</sup>, Tatsuya Yokoi<sup>1</sup>, Atsutomo Nakamura<sup>1</sup>, Katsuyuki Matsunaga<sup>1,2</sup>

E-mail: noda@mp.pse.nagoya-u.ac.jp

エネルギー問題や環境問題を抱える現代社会において、太陽光発電はこれらの問題を解決し得る有力な方法の一つである。この太陽光発電を普及させるためには、更なるコスト削減や変換効率の向上が必要不可欠である。近年、多結晶シリコン結晶は太陽電池材料として広く使われているが、多結晶シリコンの内部では酸素・炭素などの点欠陥が電子・正孔の再結合を誘引し、変換効率を低下させるという欠点がある[1]。したがって、シリコン粒界における不純物偏析挙動を理解するためには、原子スケールの研究から変換効率向上のアプローチを提案する事が重要である。

本研究では、シリコン粒界中の不純物欠陥として知られる炭素偏析に焦点を当てる。近年、第一原理計算によって、特定のシリコン粒界における炭素偏析挙動が明らかになっている[2,3]。しかし、数百～数千個の原子を含む粒界構造の第一原理計算は膨大な計算コストを必要とするため、様々な面方位を有する粒界構造における不純物偏析挙動を、第一原理計算によって一つずつ検証する事は非常に困難である。そこで我々はこの問題点を解決するために、第一原理計算から得られる全エネルギー・各原子にかかる力を予測するシリコン・炭素 2 元系の人工ニューラルネットワーク (ANN) 原子間ポテンシャル[4]の構築を試みた。炭素偏析を含むシリコン粒界構造について、ANN 原子間ポテンシャルによってエネルギー的安定性や各原子の力を高精度に予測でき、従来の経験的原子間ポテンシャルと比べて予測精度が優れている事を確認した。本研究の成果の詳細は、当日の発表にて紹介する。

### 謝辞

本研究は、JST-CREST「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」(グラント番号: JPMJCR17J1)の支援によって行われた。

### 参考文献

- [1] A. Stoffers et al., *Prog. Photovolt: Res. Appl.* **23**, 1742 (2015).
- [2] D. Zhao and Y. Li, *J. Alloy. Compd.* **712**, 599 (2017).
- [3] D. Zhao and Y. Li, *Comput. Mater. Sci.* **143**, 80 (2018).
- [4] J. Behler, *Int. J. Quantum Chem.* **115**, 1032 (2015).