

機械学習による発光強度プロファイルからの欠陥の電気特性の推定

Prediction of electrical property of crystal defects from photoluminescence profile using machine learning

○沓掛 健太郎¹, 三田村 和樹², 小島 拓人³, 宇佐美 徳隆²

1.理研 AIP, 2.名大院工, 3.名大院情報

○Kentaro Kutsukake¹, Kazuki Mitamura², Takuto Kojima³, Noritaka Usami²

¹ AIP, RIKEN, ² Grad. Sch. Eng., Nagoya Univ., ³ Grad. Sch. Inf., Nagoya Univ.

E-mail: kentaro.kutsukake@riken.jp

【緒言】多結晶 Si 基板は太陽電池用の主要な基板材料であるが、粒界でのキャリア再結合による太陽電池変換効率の低下が材料課題の一つである。そこで、粒界の電気的特性の正確な測定が重要であり、我々は Photoluminescence(PL)イメージ測定と粒界周囲での有限要素キャリアシミュレーションによる PL プロファイルの計算とを組み合わせることで、傾斜粒界のキャリア再結合速度を定量した (本講演会 16.3 セッションにて報告)。しかし、キャリア再結合速度などをパラメータとした同シミュレーションには 1 回数時間かかり、実験で得られたプロファイルと一致するプロファイルを与えるパラメータの組を探すためには複数回の計算が必要であるため、非常に時間がかかる。そこで本研究では、機械学習を用いることで、PL プロファイルから直接粒界の物性パラメータを推定することを検討した。

【研究方法】粒界でのキャリア再結合速度、粒界両側のキャリア拡散長、粒界傾斜角度の 4 つをパラメータとして、粒界周囲の PL プロファイルを求めるシミュレーションをランダムなパラメータの組合せについて 143 回行い、教師データとした。機械学習には 64 ノード 4 層のニューラルネットワークを用い、入力に PL プロファイル、出力に上記パラメータとして学習を行った。

【結果と考察】図 1 に、実験で得られた PL プロファイルを示す。粒界位置 ($x=0$) で PL が低下している。この粒界の両側 $0.9\mu\text{m}$ での PL 強度値のシミュレーション結果 692 点を入力として機械学習を行った。図 2 に学習に用いていないテストデータに対する機械学習予測値とシミュレーション値の比較を示す。再結合速度を 10^xcm/sec として求めた際の x の誤差として ± 0.15 が得られ、この値は欠陥物性評価としては十分な精度である。このニューラルネットワークによる推定に必要な時間は 1 秒以下であり、シミュレーションのみで再結合速度を求めた場合と比較して 10000 倍以上計算時間が短縮された。また図 1 の実験プロファイルに対して機械学習でパラメータを求めた結果、再結合速度 $6.8 \times 10^3\text{cm/sec}$ 、傾斜角度 90° が得られ、ノイズを含む実験結果に対してもロバストに値が求められることが分かった。

謝辞：本研究は、科研費(16H03856)、JST CREST (JP MJCR17J1)の支援を受けたものです。

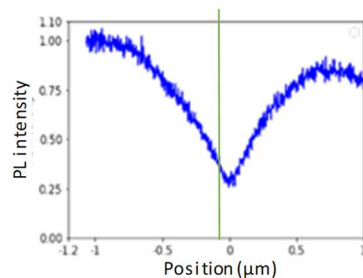


Fig.1 PL profile around a grain boundary.

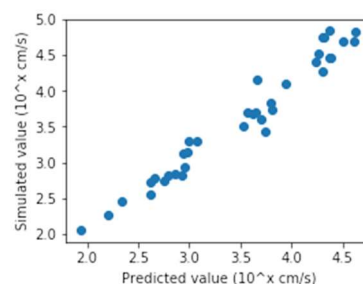


Fig.2 Predicted and simulated carrier recombination velocities.