多結晶材料情報学による粒界構造の解明と制御に向けて

Towards elucidation and control of grain boundary structures by multicrystalline informatics

名大院工[1]，理研 AIP[2]，名大院情報[3]，東北大金研[4]
○宇佐美 徳隆[1]，沓掛 健太朗[2]，小島 拓人[3]，工藤 博章[3]，横井 達矢[1]，大野 裕[4]
Grad. Eng. Nagoya Univ.[1], RIKEN AIP[2], Grad. Info. Nagoya Univ.[3], IMR Tohoku Univ.[4]
○Noritaka Usami[1], Kentaro Kutsukake[2], Takuto Kojima[3], Hiroaki Kudo[2], Tatsuya Yokoi[1], Yutaka Ohno[4]
E-mail: usa@material.nagoya-u.ac.jp

未来社会において高度化する多様な性能要件に応えうる材料創製には、従来にない革新的な材料開発手法の構築が求められている。我々の研究は、結晶構造と元素構成が極めて単純なシリコン結晶を研究対象としており、そのようなの研究開発戦略とは合致しないと感じられるかもしれない。しかし、単純なシリコン結晶であっても、多結晶を扱うと組織や粒界の多様性により研究対象は飛躍的に複雑化し、多くの未解明の課題に直面する。我々は、大量の実用多結晶ウェーハに対するデータ収集・機械学習・理論計算の連携により、多結晶材料の高性能化に有用な「多結晶材料情報学」の学理を、シリコンをモデル材料として構築し、さらに他材料への横展開を目指して研究を進めている。

これまでに、大量の多結晶ウェーハの蛍光イメージに画像処理を行い、さらに 3 次元再構成を行うことにより、多結晶インゴット中の組織と欠陥の複雑な分布を 3 次元可視化する手法を構築した[1]。また、多結晶ウェーハに対し、白色照明の入射角を変化させて多次元反射イメージを収集し、機械学習による領域識別を含めた画像処理を適用することで結晶粒界の抽出を可能とした[2]。これらを併せることで、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進めており、粒界の重要性が明らかになっている。特徴の抽出にあたっては、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手法についても検討を行っている[3]。その精緻化や物理的な解釈には結晶学的な情報が不可欠と考えており、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も進めている[4]。

マクロ解析から抽出した特徴領域について、ミクロ～原子レベルでの構造や物性解析が可能な新たな方法論を開発・適用し、マクロ特性の起源の解明を目指している。具体的には、シリコンの一般粒界に対して汎用性の高い人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを構築[5]し、大規模かつ高シグマ値の粒界に対しても妥当な粒界構造の予測に成功している。さらに、熱処理条件によって原子構造が変化する粒界において実験と計算の明確な対応が得られている[6]。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、キャリア再結合速度の定量評価を可能とした[7]。

さらに、多結晶成長における核形成[8]や組織形成過程の解析[9]、結晶成長の精密制御のための多点データ計測の最適化[10]、シミュレーション高精度化のためのデータ同化など、粒界制御を含めた多結晶成長制御の高度化についても検討を進めている。

本研究は、JST CREST(JP MJCR17J1)の支援を受けたものである。

1) Hayama *et al.*, Solar Energy Materials & Solar Cells **189**, 239 (2019).
2) 山腰他、第 67 回応用物理学会春季学術講演会 13a-A403-4 (2020).
3) Kudo *et al.*, The 26th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP2019)
4) 加藤他、第 80 回応用物理学会秋季学術講演会 21a-B01-7 (2019).
5) Yokoi *et al.*, Physical Review Materials **4**, 014605 (2020).
6) Ohno *et al.*, Materials Research Society (MRS) 2019 Spring Meeting
7) 三田村他、第 67 回応用物理学会春季学術講演会 14a-A205-1 (2020).
8) Muramatsu *et al.*, J. Cryst. Growth **499**, 62 (2018).
9) 小島他、第 67 回応用物理学会春季学術講演会 14a-A205-3 (2020).
10) Boucetta *et al.*, Appl. Phys. Express **12**, 125503 (2019).

© 2020年 応用物理学会