

インフォマティクスを活用したシリコン粒界中の炭素偏析サイトの探索

Informatics-Aided Investigation of Carbon Segregation Sites

in Silicon Grain Boundaries

名大工¹, JFCC² ○野田 祐輔¹, 横井 達矢¹, 中村 篤智¹, 松永 克志^{1,2}

Department of Materials Physics, Nagoya University¹, Japan Fine Ceramics Center²

○Yusuke Noda¹, Tatsuya Yokoi¹, Atsutomu Nakamura¹, Katsuyuki Matsunaga^{1,2}

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

安価で大量生産が可能な太陽電池材料として多結晶シリコンが注目されているが、多結晶シリコンのインゴット内部では酸素・炭素・金属元素などの微少量の点欠陥が電子・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]。この問題点を克服するためには、シリコン粒界における不純物偏析挙動を原子スケールで理解することが重要である。

本研究では、シリコン粒界中の不純物点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[3,4]。先行研究では、200 個程度の原子を含むシリコン粒界構造ユニットセルにおいて、1 個の炭素原子の偏析挙動について調べられているが、複数個の炭素原子が同時に偏析する場合の計算研究は行われておらず、シリコン粒界における炭素偏析挙動の理解が不十分である。そこで我々は、人工ニューラルネットワーク原子間ポテンシャル[4]によるエネルギー計算と遺伝的アルゴリズム[5]を連携させ、エネルギー的に最安定なシリコン粒界中の炭素原子の配置を、高速かつ効率的に探索した。 $\Sigma 27\{552\}$ シリコン粒界における 4 個の炭素原子の同時偏析の例 (図 1) では、約 8820 万通りの偏析パターンの候補の中から、少ない検証回数でエネルギー的最安定構造の特定に成功した。本研究の成果の詳細は、当日の発表にて紹介する。

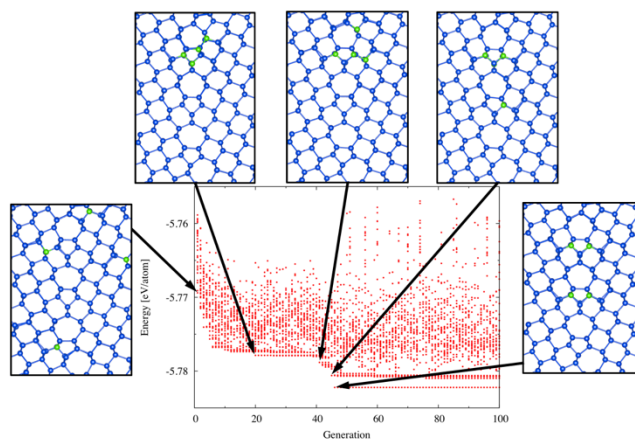


図 1. $\Sigma 27\{552\}$ シリコン粒界における炭素偏析サイト探索

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). [5] E. E. Jay et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 178 (2015).