

機械学習による発光強度プロファイルからの粒界再結合速度の推定

Prediction of carrier recombination velocity of grain boundaries from photoluminescence intensity 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

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

E-mail: kentaro.kutsukake@riken.jp

【緒言】観測したプロファイルやスペクトルから物理シミュレーションを介して物性パラメータ値を求めることは広く行われている。例えば、半導体の欠陥周囲の発光強度分布から欠陥でのキャリア再結合速度を求める場合、シミュレーションでは、キャリアの再結合速度・拡散長・拡散係数などの物性パラメータは境界条件や支配方程式の係数として反映され、特定の値の組合せでのキャリア密度分布が計算される。一方、測定される発光強度プロファイルは、キャリア密度分布を反映した量であるため、シミュレーションの出力に対応する。したがって、実際の測定結果からシミュレーションを用いて物性パラメータ値を求める作業は、測定結果に一致する出力を与える入力組合せを求めること（いわゆるフィッティング）を意味し、多くの計算コストを要する。そこで我々は、機械学習を応用し、発光強度プロファイルから直接、再結合速度を推定することを検討している[1]。本発表では、粒界傾斜角度の情報を加えることによる推定精度の向上と粒界に沿った再結合速度分布の取得を報告する。

【方法】有限差分法を用いて PL イメージ測定条件下での結晶粒界周囲のキャリア密度分布を求め、さらに測定の光学系を考慮した積分計算によって PL 強度プロファイルを計算した[2]。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、ランダムな組合せについて 1800 通りのプロファイル进行計算し、教師データとした。機械学習にはニューラルネットワークを用い、入力を PL プロファイル、出力を上記 4 パラメータとした場合と、粒界傾斜角度を入力に加えた場合（図 1(b)）について学習を行った。

【結果と考察】学習に用いていないテストデータに対するキャリア再結合速度 (V_{GB}) の推定精度 (10^x cm/s の x に対する平均二乗誤差) は、粒界傾斜角度を入力に加えた場合が 0.245、加えない場合が 0.284 であった。したがって、粒界傾斜角度を入力パラメータとして明示的に加えることで、推定精度が大きく向上した。得られた機械学習モデルを用いて、粒界に沿って連続的に抽出したプロファイルに対して再結合速度を求めた（図 1(c)）。粒界に沿ったキャリア再結合速度の分布が可視化され、局所的な変化がとらえられた。このような連続的な評価は、従来のフィッティングでは長時間を要するが、機械学習モデルを用いることで大幅な時間短縮が得られた。謝辞：本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1) の支援を受けたものです。

[1] 沓掛他, 2019 秋季応物, 21a-B01-2. [2] K. Mitamura *et al.*, J. Appl. Phys. **128**, 125103 (2020).

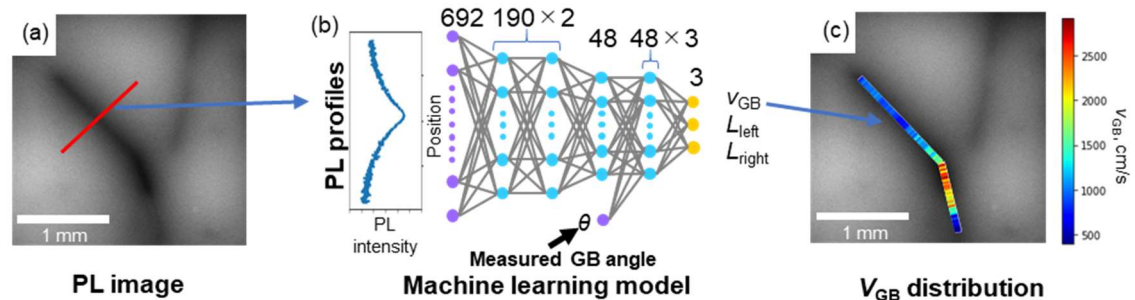


Figure 1 A scheme to evaluate V_{GB} . (a) PL image. (b) Machine learning model. (c) V_{GB} distribution.