

# 局所 C-V マップの機械学習解析に基づく グレイン境界と強誘電ドメイン挙動の相関に関する統計的評価

## Statistical Evaluation of Correlation Between Grain Boundaries and Ferroelectric Domain Behavior Based on Machine Learning Analysis of Local C-V Maps

東北大<sup>1</sup>, 東工大<sup>2</sup> ○平永良臣<sup>1</sup>, 野口雄貴<sup>1</sup>, 三村和仙<sup>2</sup>, 清水荘雄<sup>2</sup>, 舟窪浩<sup>2</sup>, 長康雄<sup>1</sup>  
Tohoku Univ.<sup>1</sup>, Tokyo Tech.<sup>2</sup>, ○Yoshiomi Hiranaga<sup>1</sup>, Yuki Noguchi<sup>1</sup>,  
Takanori Mimura<sup>2</sup>, Takao Shimizu<sup>2</sup>, Hiroshi Funakubo<sup>2</sup>, Yasuo Cho<sup>1</sup>  
E-mail: hiranaga@riec.tohoku.ac.jp

【はじめに】強誘電体材料において分極挙動を微視的に理解することは基礎・応用の双方の観点から重要である。とりわけ、これらの材料が薄膜やセラミックスといった形態をとる場合、分極挙動は複雑な微構造の影響を強く受ける。例えば、グレイン境界が分極挙動に影響を与えるであろうことは、これまでも繰り返して指摘されてきた。しかしながら、その影響の度合いについて定量的な見積もりに基づき議論された例は多くない。そこで本研究では、近年開発された局所 C-V マッピング法<sup>[1]</sup>、およびそのデータ解析における機械学習のアプローチを通じて、グレイン境界と局所的な分極挙動との間の相関を統計的に評価することを試みる。

【解析方法】本研究では、厚さ 17.5nm のランダム配向 HfO<sub>2</sub> 基強誘電体薄膜に対する局所 C-V マップのデータセット (観察エリア: 4μm×2μm, 画素数: 256×128) を解析対象とした。(実験方法の詳細については文献[2]を参照。)このデータセットに対し、混合ガウスモデルによるクラスタ解析を実施した。一方、同時に取得された表面形状像より、ラプランアンフィルタ処理および watershed アルゴリズムを用いてグレイン境界の抽出を行った。このようにして得られた局所 C-V マップのクラスタ解析結果及びグレイン境界パターンについての相関解析を行った。

【解析結果】Fig.1 に本データセットのクラスタ解析結果 (クラスタ数 N<sub>c</sub>=12) を示す。Fig.1(a) に示す 2次元マップ表示より、局所 C-V カーブの類似の度合いに基づく各クラスタ (c1 ~ c12) が、面内にどのように分布しているかを視覚的に捉えることができる。これらの各クラスタの C-V カーブには、Fig.1(b) のように比較的対称的なものに加え、Fig.1(c) のような非対称性の強いものが含まれている。非対称な C-V カーブを引き起こす一つの要因としては、ドメインピンニングによる非対称的な分極スイッチングが考えられる。

続いて、これらのクラスタリング結果とグレイン境界との関係を明らかにするために、表面形状像 [Fig.2(a)] から抽出されたグレイン境界パターン [Fig.2(b)] との相関解析を行った。これに関する観測度数および期待度数についてのクロス表を Table I および Table II に示す。両者が一致していればグレイン境界の存在と C-V 特性は無関係であり、逆に両者の隔たりが大きければグレイン境界が C-V 特性に影響を与えていると考えることができる。今回の結果からは、「クラスタリング結果とグレイン境界との間に相関が認められない」という帰無仮説に対する p 値が  $6.2 \times 10^{-7}$  と算出された。これは、一般的な有意基準である 0.05 よりもはるかに小さい。したがって、その意味においては、グレイン境界の存在がもたらす

非対称 C-V カーブ出現頻度の差異は、統計的に有意なものであると示すことができる。実際、c6, c8, c9, c10 はグレイン境界における出現率が相対的に高いことが Table I と Table II の比較から分かるが、これらは非対称性の顕著な C-V カーブを示すクラスタ群でもあった。つまり、グレイン境界の存在が、分極反転特性の非対称性を生む原因の一つに確かになっていると言える。

しかしながら一方で、p 値が極めて小さいことが、これらの関係性が強いことを示すことにはならない。関係性の強さは p 値ではなく、効果量と呼ばれる量によって評価される。この観点から言うと、グレイン境界と C-V カーブ形状との間には、確かに統計的に有意な関係性があると認められる一方、その相関の度合いは非常に小さいといった解析結果が得られている。この点についての詳細は講演当日に議論したい。

【謝辞】本研究の一部は科学研究費補助金 (21K18887)、および、村田学術振興財団の助成のもとに行われた。

- [1] Y. Hiranaga et al., J. Appl. Phys. **128**, 244105 (2020).  
[2] Y. Hiranaga et al., Jpn. J. Appl. Phys. **60**, SFFB09 (2021).

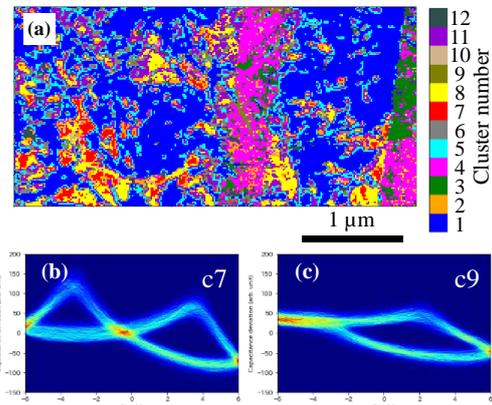


Fig. 1 (a) Cluster map for local C-V dataset obtained with a randomly-oriented HfO<sub>2</sub>-based ferroelectric film. (b), (c) local C-V curves observed in clusters (b) c7 and (c) c9.

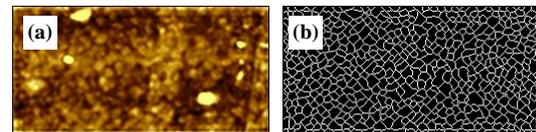


Fig. 2 (a) Topography image and (b) grain boundary pattern observed with the HfO<sub>2</sub> film.

Table I Cross table on observed frequency

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7	c8	c9	c10	c11	c12	total
inside grain	10106	1012	862	2409	2909	1905	634	1754	512	366	3243	612	26324
grain boundary	2325	212	196	539	748	537	145	511	149	117	827	138	6444
total	12431	1224	1058	2948	3657	2442	779	2265	661	483	4070	750	32768

Table II Cross table on expected frequency

	c1	c2	c3	c4	c5	c6	c7	c8	c9	c10	c11	c12	total
inside grain	9986	983	850	2368	2938	1962	626	1820	531	388	3270	603	26324
grain boundary	2445	241	208	580	719	480	153	445	130	95	800	147	6444
total	12431	1224	1058	2948	3657	2442	779	2265	661	483	4070	750	32768