

多結晶インフォーマティクス ～光学画像からひも解く結晶の情報～

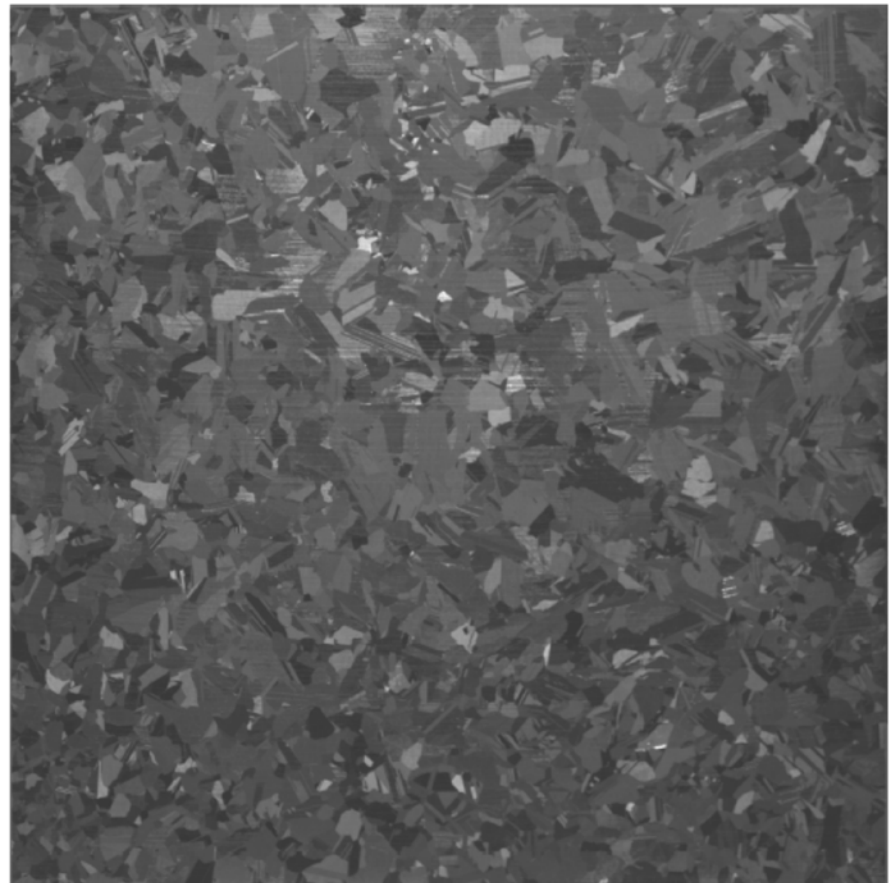
名古屋大学

工学部・工学研究科 物質プロセス工学専攻

教授 宇佐美 徳隆

令和2年9月1日

多結晶材料



156 mm

多くの実用材料は多結晶

多くの結晶粒、結晶粒界から
構成される複雑なシステム

結晶粒界はマクロな
構造パラメータだけでも
5次元の組み合わせ

多結晶材料の普遍的な高性能化指針を明らかにしたい

[革新材料開発]平成29年度採択課題

| 宇佐美 徳隆

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

| 研究代表者

宇佐美 徳隆 

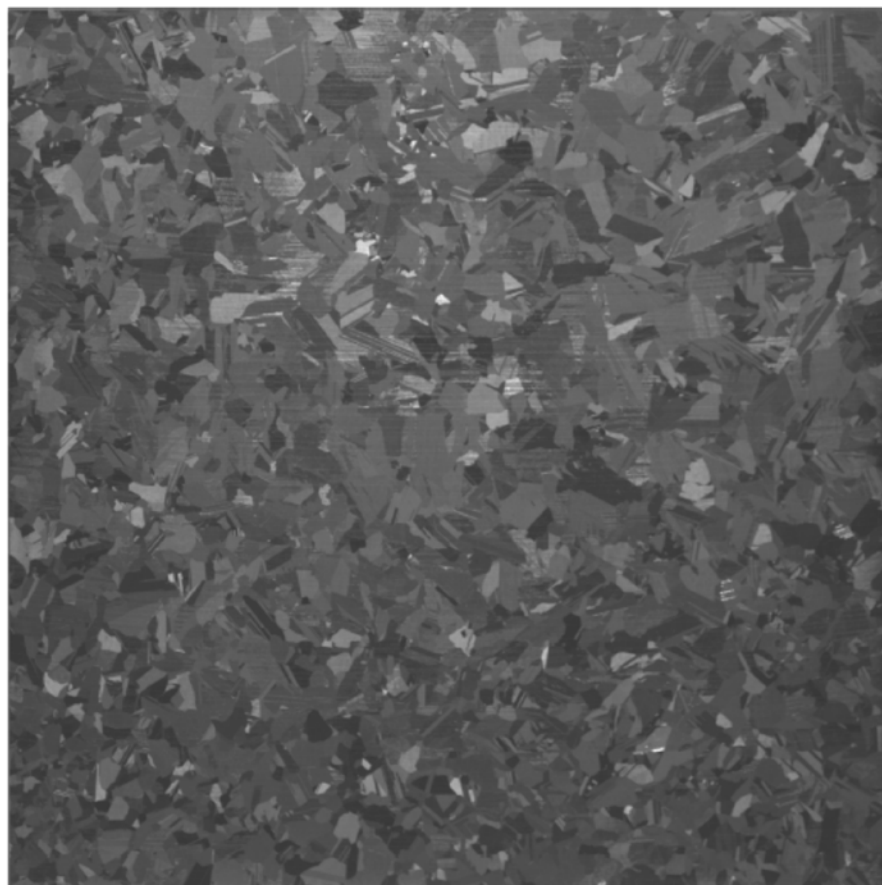
名古屋大学 大学院工学研究科 物質プロセス工学専攻 物質創成工学
(兼)名古屋大学 未来材料・システム研究所 附属未来エレクトロニクス集積研究センター 教授

| 研究概要

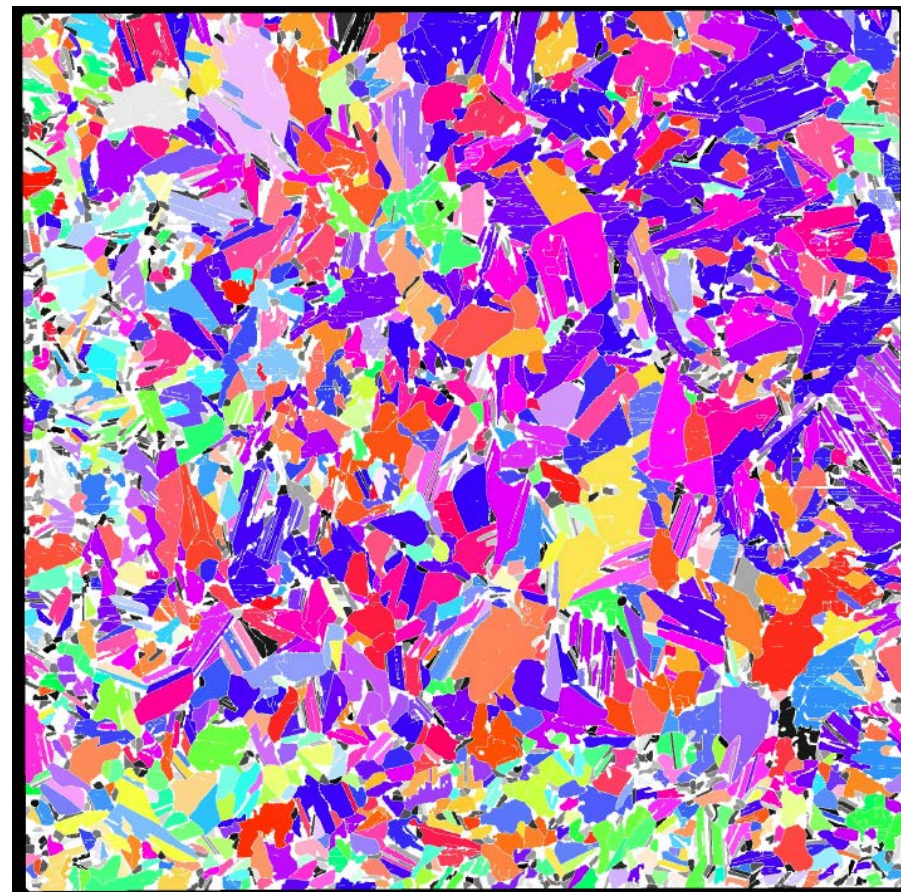
多結晶材料は、組織の複雑さと粒界の多様性により、普遍的な高性能化指針が不明確でした。本研究では、大量の実用多結晶ウェーハに対するデータ収集・機械学習・理論計算の連携により、一般粒界の構造・物性の理論構築を行う多結晶材料情報学を開拓します。その有用性を、データ科学によって設計され、理論に裏付けされた多結晶組織を有し、優れた特性を示す太陽電池用スマートシリコンインゴットの創製により実証します。

https://www.jst.go.jp/kisoken/crest/project/1111096/1111096_2017.html

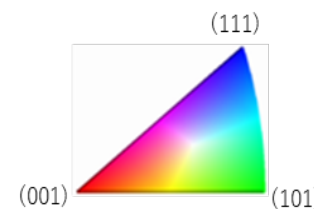
新技術でできること



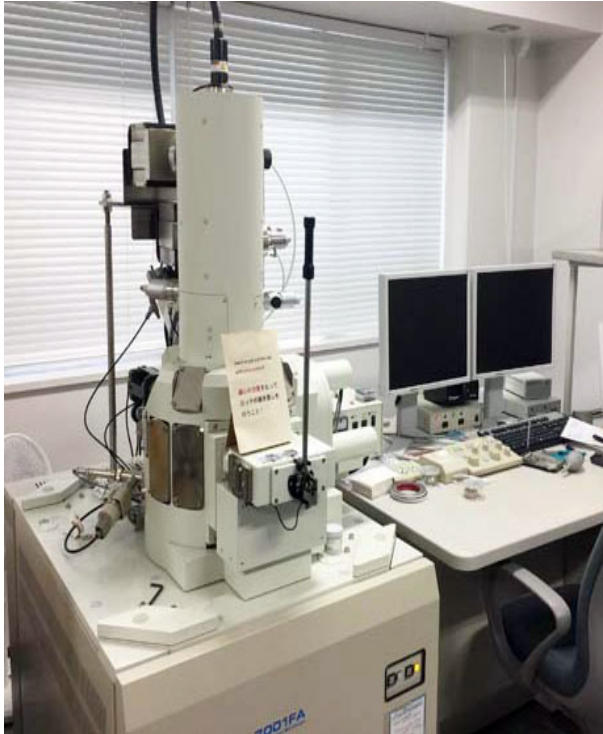
156 mm



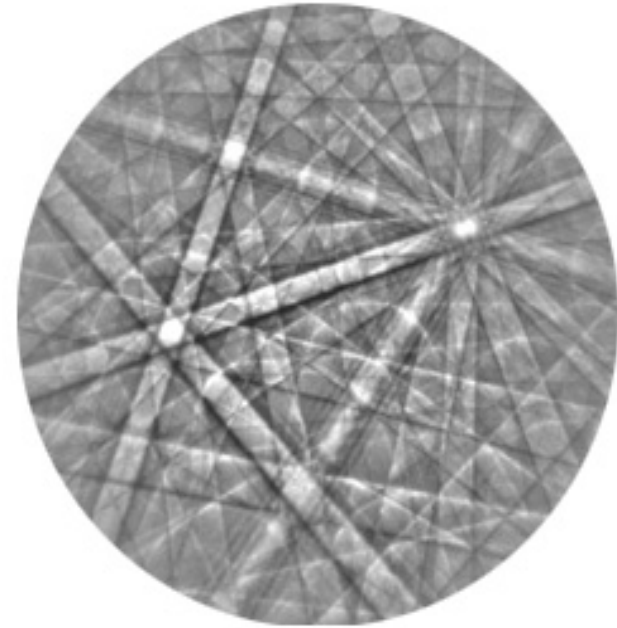
大面積多結晶試料の光学画像から
結晶方位分布を高精度予測



従来技術①: SEM-EBSD法



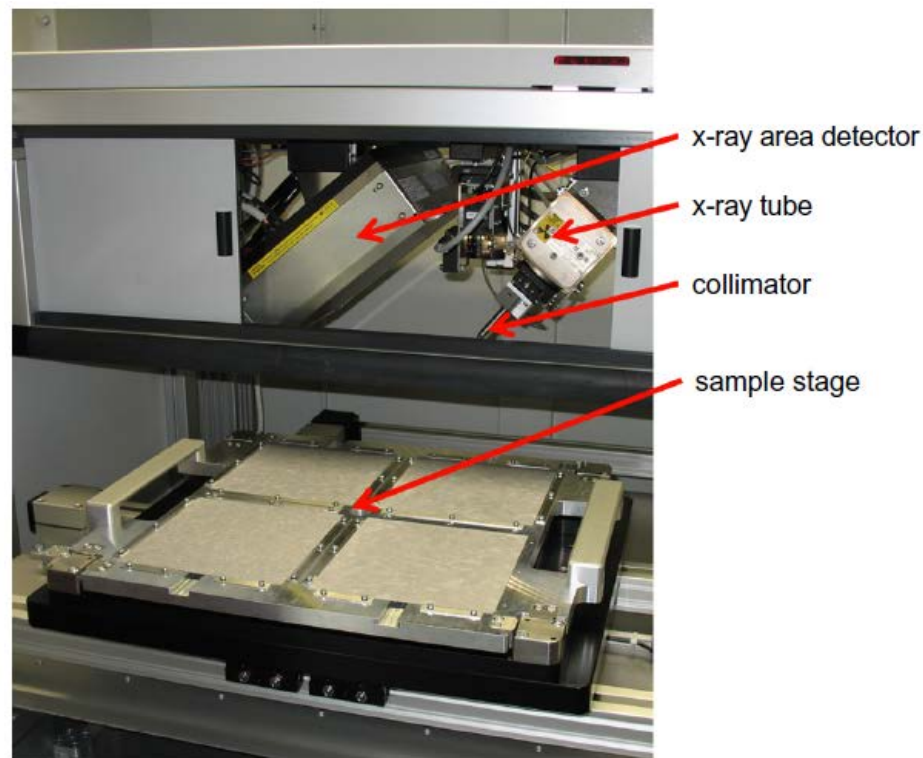
走査型電子顕微鏡



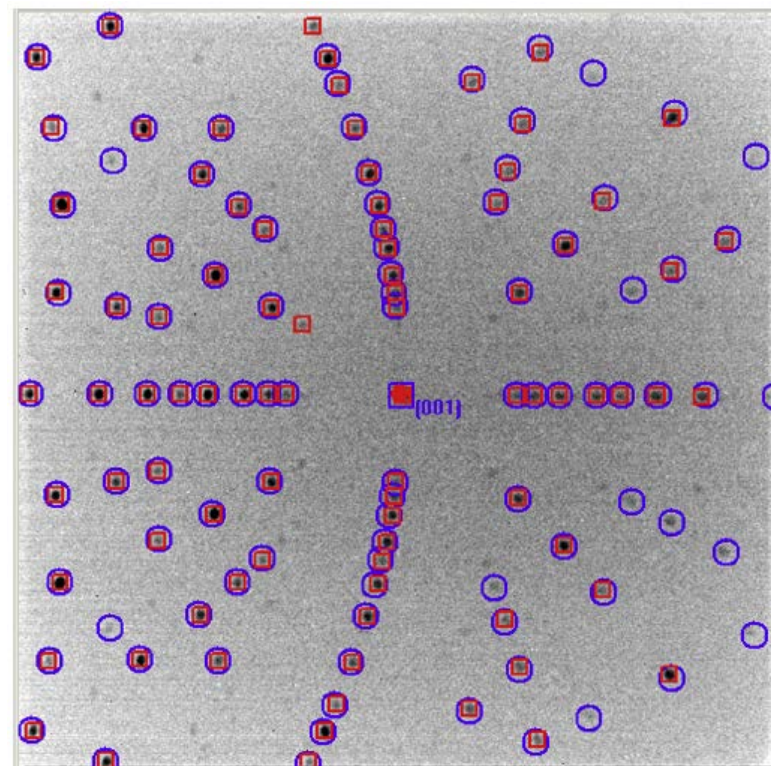
電子線後方散乱回折パターン

走査型電子顕微鏡の中で、
微小領域からの電子線後方散乱により得られる
菊地線回折図形を解析

従来技術②: X線ラウエ法



ラウエスキャナー

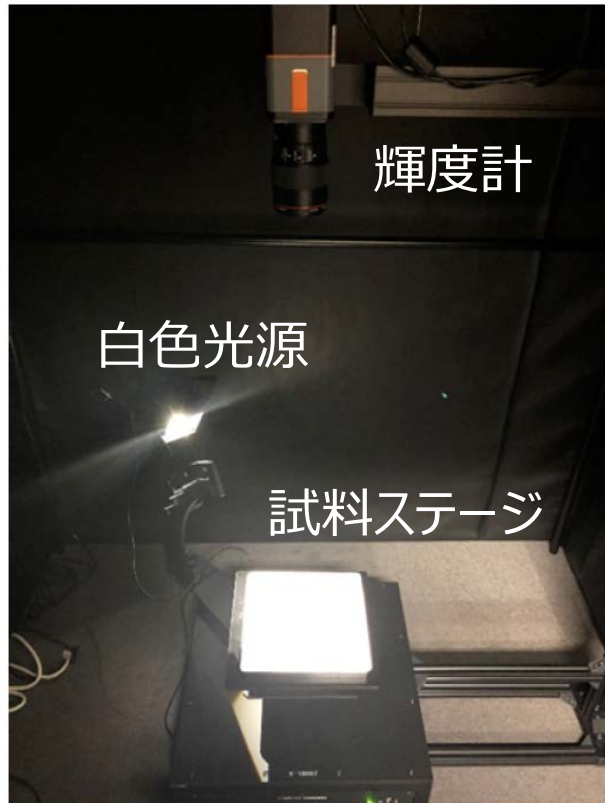


ラウエパターン

Lehman *et al.*, Acta Materialia **69**, 1 (2014).

微小領域からのラウエパターンを解析

新技術の測定装置とデータ例



照明の入射角度を変化させて反射像を取得し
各結晶粒の輝度変化パターンを解析

各技術比較： 空間分解能と測定時間

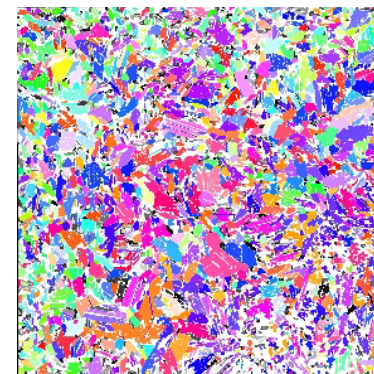
	空間分解能	測定時間／点	測定時間／156mm角
SEM-EBSD	< 10 nm	< 0.02 sec	～ 10 hr 0.1 mm 間隔で測定した場合
X線ラウエ法	< 1 mm	～ 15 sec	～ 100 hr 1 mm間隔で測定した場合
新技術	< 0.5 mm	—	～ 30 sec ～1 sec／1画像で測定した場合

新技術の概要

試料の表面処理

- 結晶方位に依存して反射率が異なるような表面処理
- シリコンではアルカリ性溶液による異方性エッチング

光学画像取得



教師データ

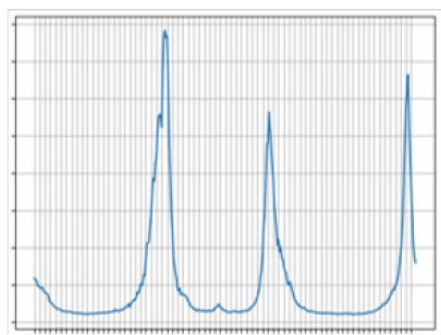
データ補正

- 位置に依存した輝度の補正
- 位置に依存した教師データの結晶方位補正 など

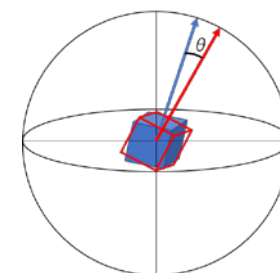
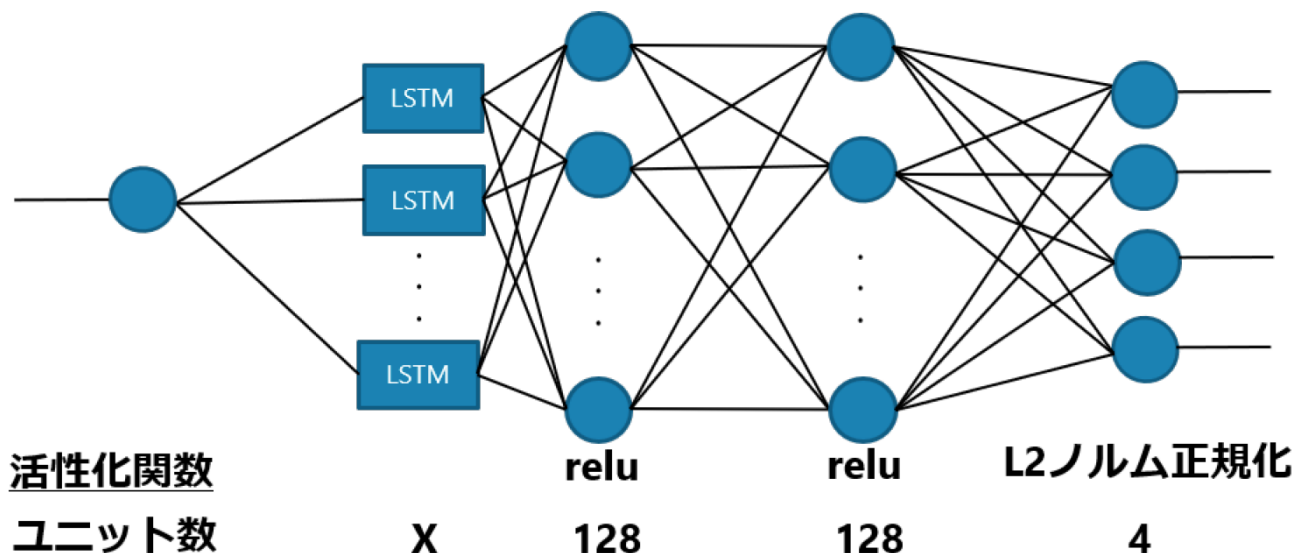
結晶方位推定

- さまざまなモデル・条件で学習
- 結晶方位推定の精度評価

学習モデル



輝度変化パターン

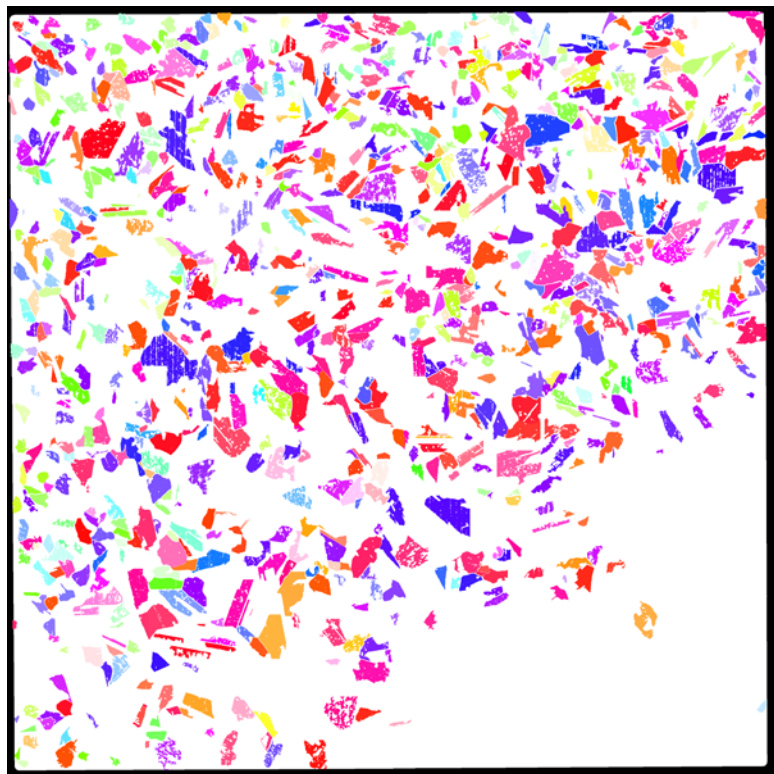


結晶方位を表す
四元数

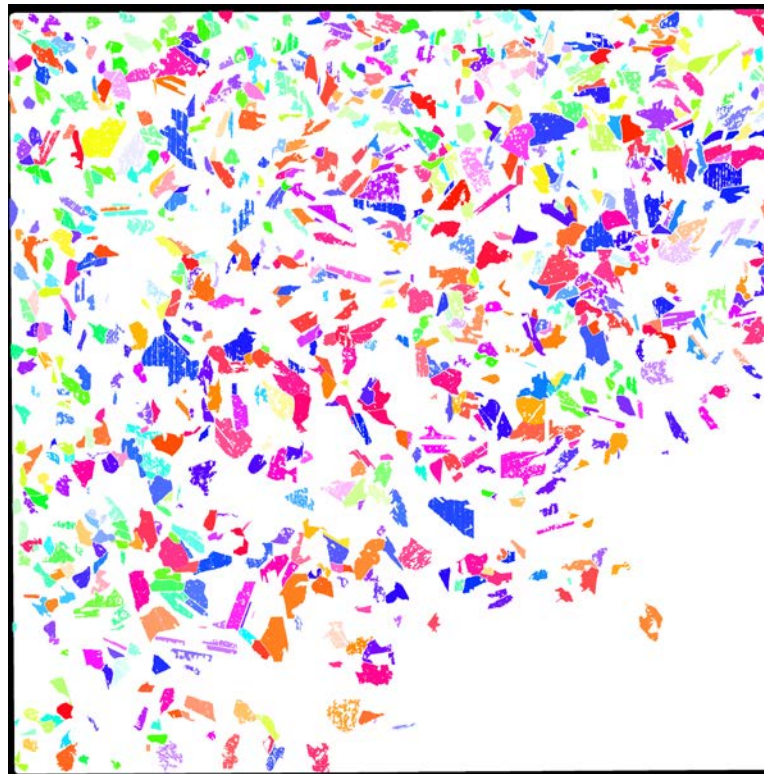
結晶方位 → 輝度変化パターンの写像は連続性をみたす

逆問題の求解を回帰写像学習の問題として
LSTMニューラルネットワークにより学習

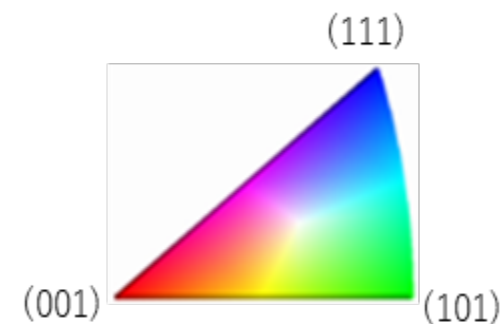
結晶方位の推定実験



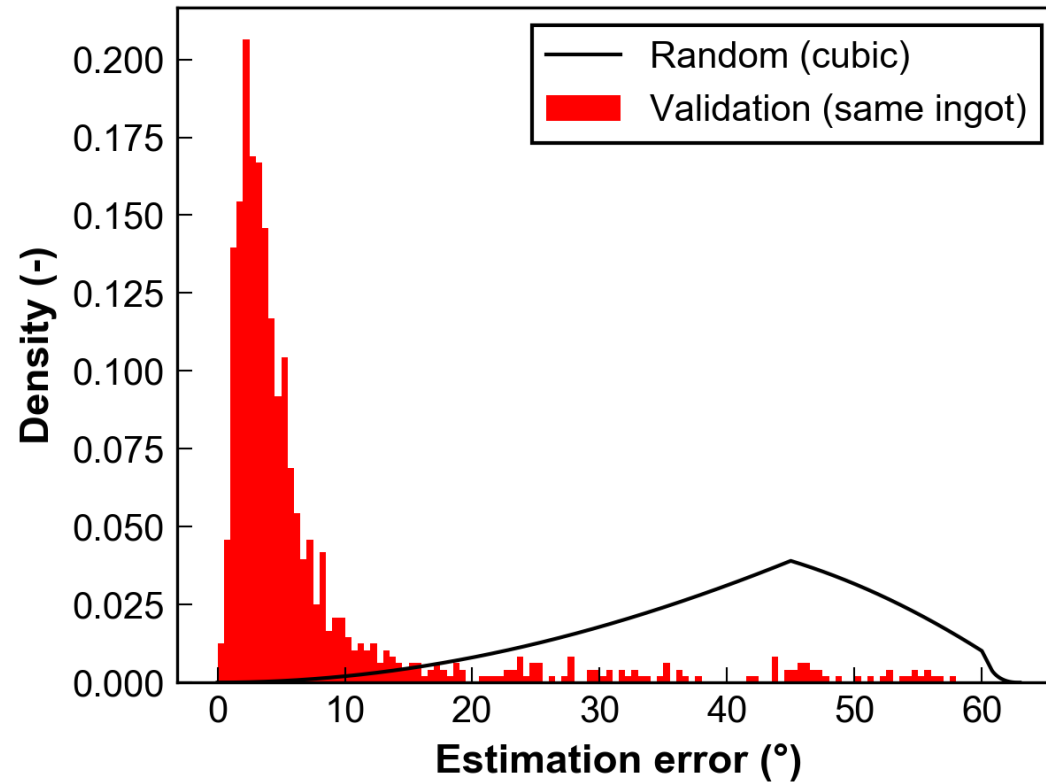
機械学習による推定



正解



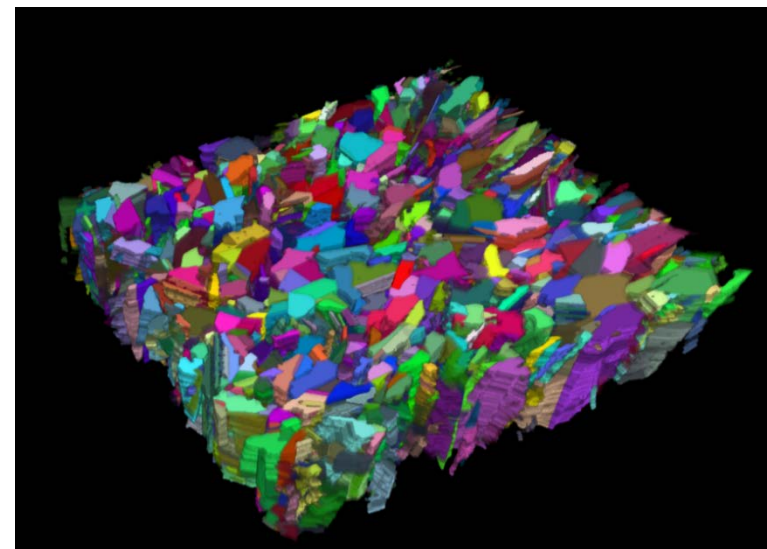
結晶方位の推定精度



	条件①	条件②	条件③	条件④
平均値	7.43	9.49	11.7	10.6
中央値	3.84	6.23	7.91	7.20
第一四分位数	2.37	3.98	4.85	4.57

想定される用途

- 多結晶試料の結晶方位分布の簡易計測（大気中、大面積対応可能）
- 巨視的な3次元結晶粒構造・結晶方位構造の可視化
- 多結晶材料の組織と性能の関係を解明するツールとして高度な材料設計に利用



実用化に向けた課題

- 結晶方位推定精度の改善
 - 学習データ数の増加
 - 輝度データの計測精度の向上
 - 仰角を変更した輝度データの収集と活用

企業への期待

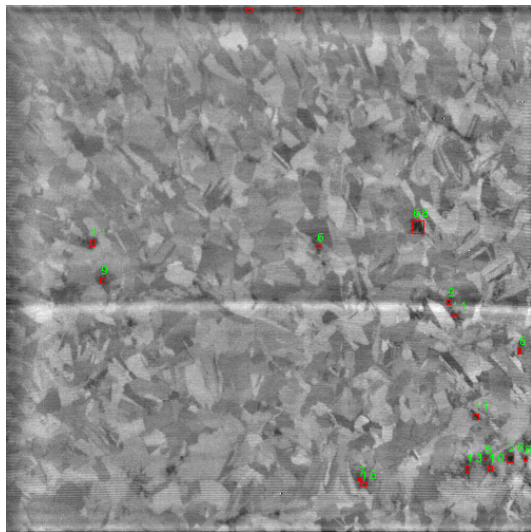
計測装置メーカー

- 測定～結晶方位推定をパッケージにした結晶方位測定装置の開発（据え置き型、ポータブル型） など
- 測定サービスの実施

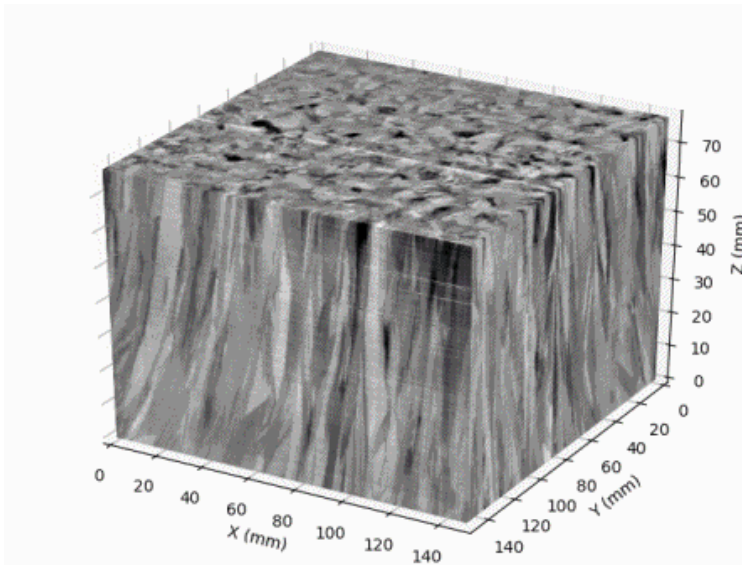
材料メーカー

- さまざまな材料の前処理～計測～結晶方位推定についての共同研究
- 高性能多結晶材料についての共同研究

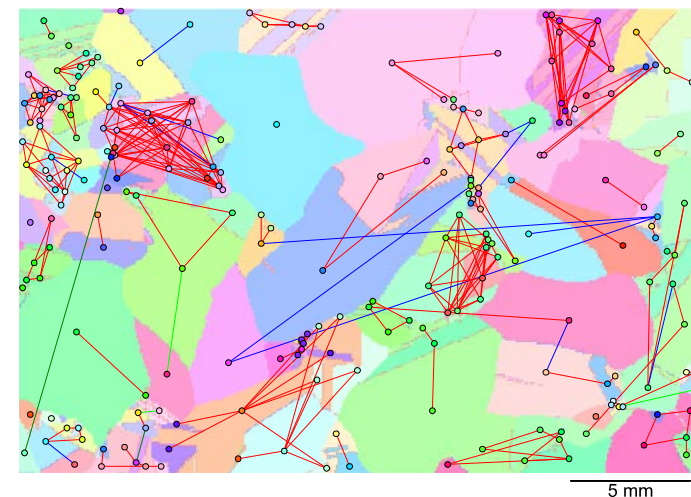
その他：多結晶インフォマティクス研究基盤



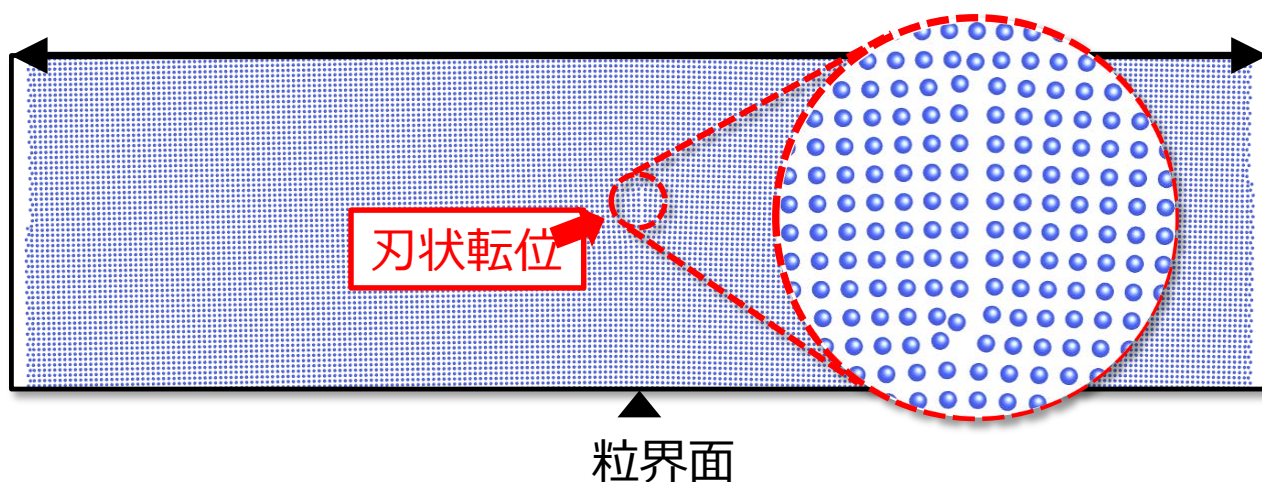
蛍光画像における
結晶欠陥のトラッキング



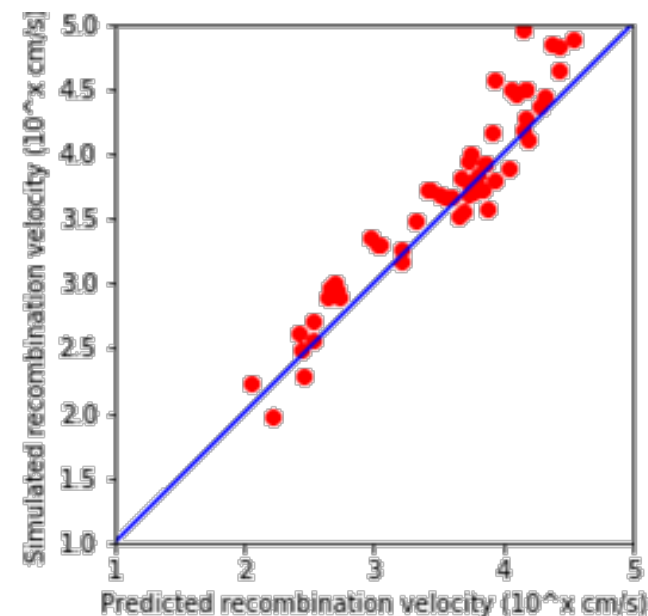
多結晶インゴット中の
転位クラスターの3次元可視化



多結晶組織における
同一生成核結晶粒の推定



大規模粒界系のニューラルネットワーク駆動型シミュレーション



機械学習による粒界物性推定

本技術に関する知的財産権

- 発明の名称 : 結晶方位解析装置、結晶方位解析方法および学習済みモデル生成方法
- 出願番号 : 特願2020-020828
- 出願人 : 名古屋大学、理化学研究所
- 発明者 : 工藤博章、宇佐美德隆、
松本哲也、小島拓人、
加藤光、 上別府颯一郎、
沓掛健太郎

お問い合わせ先

名古屋大学

研究協力部 社会連携課 産学官連携係

T E L 052-789 - 5545

e-mail k-sangakukan@aip.nagoya-u.ac.jp