

インフォマティクスを活用した材料評価

名古屋大学未来材料・システム研究所 沓掛健太郎

情報科学（インフォマティクス）を活用した研究開発が様々な分野で活発に行われている。材料科学分野では、材料探索へ応用したマテリアルズインフォマティクス、材料プロセスへ応用したプロセスインフォマティクス、材料評価を含む計測へ応用した計測インフォマティクスなど、情報科学技術のシンプルな転用からそれぞれの分野の課題に合わせた技術開発へと深化が続いている。

本講演ではまず、学会や論文の状況を見ながらインフォマティクス応用研究の盛り上がりを確認し、また各インフォマティクス応用分野の概要と代表的な研究トピックを概観する。次いで材料評価への著者らの取り組みとして、1)放射光 μ ビーム X 線回折パターン的高速解析と効率的なマッピング、2)PL イメージからの粒界キャリア再結合速度の高速予測を紹介する。

近年、計測技術の発展により取得される計測データの量が増大している。例えば、本研究で対象とする X 線回折パターンでは、放射光の強力ビームによる空間分解測定や 2 次元検出器による高速パターン取得などによって、試料表面各位置での 2 次元の回折パターン画像を得ることができる。従来のピークフィッティングでは、このような大量の計測データの解析に時間を要してしまうため、放射光施設では測定だけを行い、解析は研究室に帰ってからというケースがほとんどであった。しかし、測定データをオンサイトで解析し、その解析結果に基づいて次の測定を行うことができれば、マシンタイムを有効利用しながら、より詳細な計測を行うことができる。そこで本研究では、同一試料表面内での組成と方位が微小に異なる X 線回折パターン画像を、教師なし学習（具体的には、非負値行列因子分解（NMF））を用いて解析した[1]。その試料の特徴を表す基底パターンを取得し、その基底パターンに対する係数を利用する（図 1）ことで、試料表面内の組成と方位の揺らぎを短時間で可視化した。オンサイトで高速にこの解析ができることで、この結果に基づいて特定された特徴的な領域に X 線ビームを移動させ、別の長時間測定を行うことができる。さらにこの方法を、空間マッピング測定およびベイズ最適化と組み合わせることで、少ない測定回数で組成や方位が大きい（小さい）領域を特定する方法へと拡張した。以上の方法は、X 線回折パターン解析のみならず、同様の計測パターン（プロファイル）が大量に得られる計測に広く応用可能な方法であり、解析の高速化、共通特徴の抽出、特徴箇所の高速特定といった恩恵が期待される。

多くの計測では、計測結果に対して理論式もしくはシミュレーション結果をフィッティングして、物性値を得ることが目的となる。例えば、本研究で対象とする Si 結晶中の結晶粒界のキャリア再結合速度の定量では、粒界を横切る PL プロファイルに対して、キャリアシミュレーション結果をフィッティングする[2]。しかし、このフィッティングにはシミュレーションを何度も繰り返す必要があり、長時間を要していた。そこで本研究では、大量のシミュレーション結果を教師データとして、計測で得られるプロファイルからキャリア再

結合速度を直接予測する機械学習モデルを構築した（図 2）[3]。これによって、従来のフィッティングと比較して大幅な時間短縮が図られ、粒界に沿った連続的なキャリア再結合速度の解析が可能となった。この方法は、PL プロファイルに限定されるものではなく、理論式もしくはシミュレーションによるフィッティングを行う方法に共通して適用可能であり、解析の大幅な高速化が期待される。

以上のように、情報科学技術を活用することで、材料評価の高速化が図られ、より材料の本質に迫ることが可能となる。

- [1] K. Kutsukake, T. Kamioka, K. Matsui, I. Takeuchi, T. Segi, T. Sasaki, S. Fujikawa, M. Takahasi, “Feature extraction and spatial imaging of synchrotron radiation X-ray diffraction patterns using unsupervised machine learning”, Sci. Technol. Adv. Mater.: Methods 4, 2336402-1-12 (2024).
- [2] K. Mitamura, K. Kutsukake, T. Kojima, and N. Usami, “Determination of carrier recombination velocity at inclined grain boundaries in multicrystalline silicon through photoluminescence imaging and carrier simulation”, J. Appl. Phys. 128(12), 125103-1-9 (2020).
- [3] K. Kutsukake, K. Mitamura, N. Usami, and T. Kojima, “Direct prediction of electrical properties of grain boundaries from photoluminescence profiles using machine learning”, Appl. Phys. Lett. 119(3) 032105-1-6 (2021).

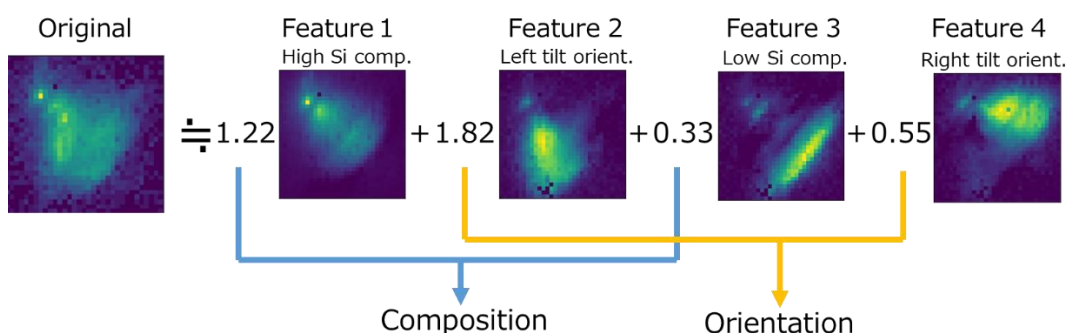


図 1 X 線回折パターンに対する基底パターンとその係数の線形和による近似の例

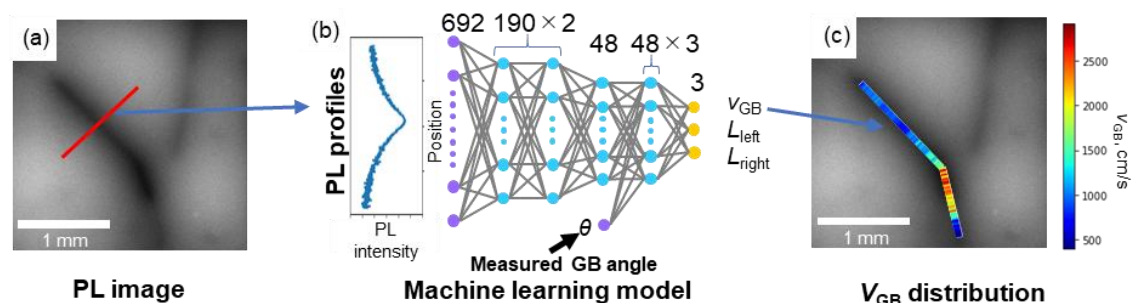


図 2 PL イメージから取得した PL プロファイルを用いて粒界キャリア再結合を直接予測するフローの模式図