

格子欠陥特性の理解に向けた 機械学習ポテンシャルの構築とその応用

SATテクノロジー・ショーケース2026

■ はじめに

私たちの身近にある半導体や金属などの材料特性の多くは、点欠陥や結晶粒界、界面といった「格子欠陥」によって決定づけられる。したがって、これらの格子欠陥の電子・原子レベル構造の解明が最新の材料科学では必須となっている。そのための研究手法として、理論的には第一原理計算が有効であるが、現実的な格子欠陥の構造は複雑であることが多く、計算コストの高い第一原理計算の適用も限界がある。これまでの研究では、第一原理計算データを学習させた機械学習原子間ポテンシャルを構築し、第一原理計算と同精度で複雑な格子欠陥の原子レベル構造を解明する手法開発を行ってきた。

■ 活動内容

1. 高精度機械学習ポテンシャルの開発

格子欠陥特性の高精度・高速予測に向けて、DFT計算データを学習させた人工ニューラルネットワーク(ANN)原子間ポテンシャル(NNP)が近年盛んに構築されている。しかし現在のNNPは、様々な格子欠陥を同時に学習させると予測誤差が大きくなる問題がある。その一因は、通常の構造記述子は比較的単純な既知の解析関数をもとに構築されており、多様な原子環境に対する近似能力が限定されるためである。これに対し、我々の先行研究ではANNに基づく学習可能な記述子(ANN記述子)を構築し[1]、Siの点欠陥、表面、対称傾角粒界に対して、従来の記述子よりも高い予測精度があることを示した。

2. 上記手法を用いたSi非対称傾角粒界の原子構造解析

多結晶Siでは、非対称で秩序度の低い粒界が不純物偏析や少数キャリア再結合を通じてデバイス特性(特に太陽電池効率)を大きく左右するため、その原子構造の解明は粒界設計と高効率化に直結する。開発したANN記述子に基づくNNPによるシミュレーションによって得られた成果は以下のとおりである。

- NNPに基づく焼きなまし法(Simulated annealing)により、 $\Sigma 9(111)[115][\bar{1}10]$ の非対称傾角粒界の低エネルギー原子構造を同定することに成功し、電子顕微鏡観察像とも一致していた(図a)。これにより、同じ手法を適用することで、電子顕微鏡像による観察が難しい他の非対称傾角粒界の妥当な原子構造を特定することが可能となった。

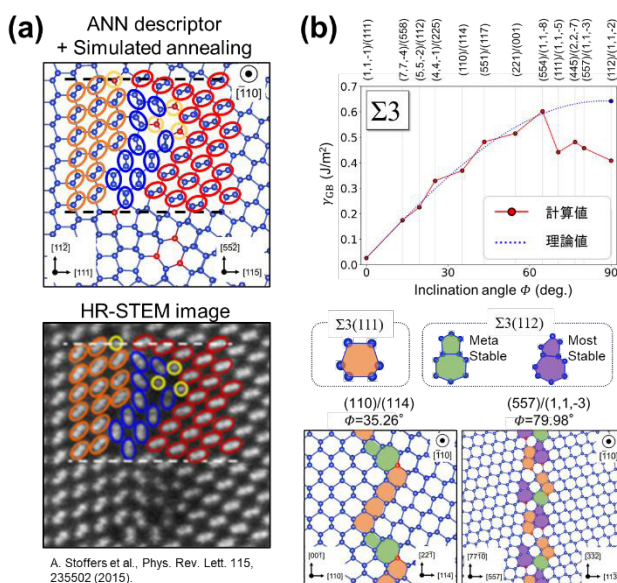
- $\Sigma 3$ 非対称傾角粒界では、粒界エネルギー γ_{GB} が結晶学的関係から予測される理論値から外れている(図b上部)。これは傾斜角 ϕ に依存して含まれる構造ユニットが、準安定 $\Sigma 3(112)$ ($0^\circ \sim 70^\circ$)から最安定 $\Sigma 3(112)$ ($70^\circ \sim 90^\circ$)と変化することによる(図b下部)。このような低エネルギー構造を正確に同定できたことで、定量的な電子構造解析が可能となり、バンドギャップ内の欠陥準位が明らかになった。

■ 関連情報等(特許関係、施設)

本研究の一部は大阪大学 D3 Center の SQUID を利用して実施されました。

■ 参考文献

- [1] M. Uchida et al., Phys. Rev. Mater 8, 103805 (2024).



代表発表者 内田 匡美(うちだ まさみ)
所 属 名古屋大学大学院工学研究科
物質科学専攻松永研究室
問合せ先 〒464-8601 名古屋市千種区不老町
TEL:052-789-3367 FAX:052-789-3367
uchida.masami.z6@s.mail.nagoya-u.ac.jp

■キーワード: (1) 格子欠陥
(2) 機械学習ポテンシャル
(3) 第一原理計算

■共同研究者:
(名古屋大学) 横井達矢, 小椋優
(名古屋大学,JFCC) 松永克志