

結晶の写真から AI により結晶粒方位分布を予測 ～多結晶材料の簡便かつ高速な組織解析に応用可能～

【本研究のポイント】

- ・多結晶^{注1)}材料の光学写真から機械学習モデルにより結晶粒方位分布を予測。
- ・大気中でデータ収集が可能で電子顕微鏡などの高価な設備は不要。
- ・実用太陽電池用多結晶シリコンなど大面積試料に適用可能。
- ・社会に広く普及している多様な多結晶材料への展開が可能。

【研究概要】

国立大学法人東海国立大学機構 名古屋大学大学院工学研究科の原 京花 博士前期課程学生、宇佐美 徳隆 教授、情報学研究科の小島 拓人 研究員、工藤 博章 准教授は、理化学研究所 革新知能統合研究センターの沓掛 健太郎 研究員との共同研究で、多結晶材料の光学写真から機械学習モデルにより結晶方位分布を精度よく予測することに成功しました。本研究成果は、さまざまな多結晶材料の簡便かつ高速な組織解析に応用できます。

本研究では、多結晶材料の表面を溶液で処理した後にさまざまな方向から照明をあてて撮影した光学写真に対して機械学習モデルを適用することで、結晶粒方位分布を高い精度で予測することに成功しました。この手法を用いることで、15センチ角の太陽電池用多結晶シリコン基板の方位分布など、従来手法では不可能であった大面積材料の測定が可能となりました。

本研究成果は、2023年5月24日午後11時(日本時間)付アメリカの American Institute of Physics が発行する自然科学誌「APL Machine Learning」に掲載されました。

【研究背景と内容】

金属、セラミックス、半導体など身近な材料の多くは多結晶であり、社会に広く普及しています。多結晶は、多くの結晶粒から構成される複雑な組織をしており、その性質は微視的な結晶粒の方位分布によって大きく変化します。例えば構造材料の強度や耐腐食性、多結晶材料を光吸収層とする太陽電池のエネルギー変換効率などは、結晶粒の方位や、結晶と結晶の境界である粒界の特性などによって変化します。そのため、優れた特性の多結晶材料を得るには結晶粒方位分布の制御が求められ、結晶粒方位分布の測定は材料開発において極めて重要です。

一般的に結晶粒方位分布の測定は、走査型電子顕微鏡を用いて電子線を走査しながら回折パターンを解析するEBSD(電子線後方散乱回折)法^{注2)}により測定されます。この手法では、電子線を用いることから空間分解能には優れていますが、高価な設備が必要であることや、大面積試料の測定に長い時間がかかることが課題でした。エックス線による測定も可能ですが、さらに装置が特殊であり、同様に測定時間に課題があります。

そこで本研究では、多結晶材料の表面を溶液で処理した後に、さまざまな方向から照明をあてて撮影した光学写真に対して機械学習モデルを適用することで、結晶方位を予測することを試みました。対象とした試料は、実用太陽電池に用いられている約15センチ角の多結晶シリコン基板です。まず、多結晶シリコン基板をアルカリ溶液に浸漬することで異方性エッチング^{注3)}を行い、可視光に対する反射率が結晶粒方位に依存するような表面状態を形成しました。その後、白色照明をさまざまな角度から照射して光学写真を撮影しました。図1に典型的な光学写真を示します。

複数の基板の結晶粒方位分布を、特殊なエックス線装置により100時間以上かけて収集し、機械学習モデルの教師データとして利用しました。機械学習モデルは、光学写真の各ピクセルの光強度プロファイルを入力とし、結晶粒方位を表すベクトルを出力とするLSTM(超・短期記憶)ネットワーク^{注4)}としました(図2)。さらに、入力の光強度プロファイルをデータの的に回転させるデータ増強^{注5)}を用いることで、予測精度誤差の中央値が3°以内と高い精度を得ることに成功しました。図3に結晶粒方位分布の予測結果の一例を示します。今回の測定に要した時間は、光学写真の撮影、機械学習モデルの訓練、方位の予測を全て合わせても1.5時間程度であり、従来技術よりも遥かに高速となりました。

【成果の意義】

多結晶材料は社会に広く普及しており、多結晶の高性能化が社会を変革していくともいえます。多結晶の高性能化の鍵となる結晶粒方位分布の測定は、材料設計・開発の根幹的な基盤技術であり、大面積の多結晶材料に対して簡便かつ高速・高精度な測定が希求されていました。本研究の成果は、原理的には多様な多結晶材料の結晶粒方位分布予測への展開が可能であり、材料開発を革新する技術といえます。

本成果は、以下の事業・研究領域・研究課題によって得られました。

戦略的創造研究推進事業 CREST

研究領域:「実験と理論・計算・データ科学を融合した材料開発の革新」

(研究総括:細野 秀雄 東京工業大学 科学技術創成研究院 教授)
研究課題:「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」

研究者:宇佐美 徳隆(名古屋大学 大学院工学研究科 教授)
研究実施場所:名古屋大学 大学院工学研究科、大学院情報学研究科
研究期間:2017年10月~2024年3月



図 1 多結晶シリコン基板の光学写真

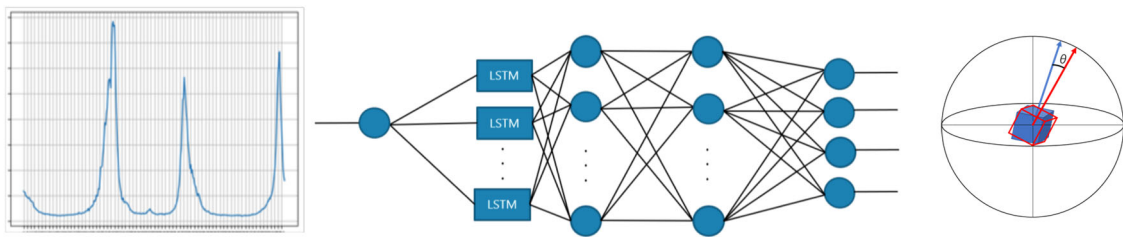


図 2 各ピクセルの光強度プロファイルを入力とし結晶粒方位を出力とする LSTM ネットワーク

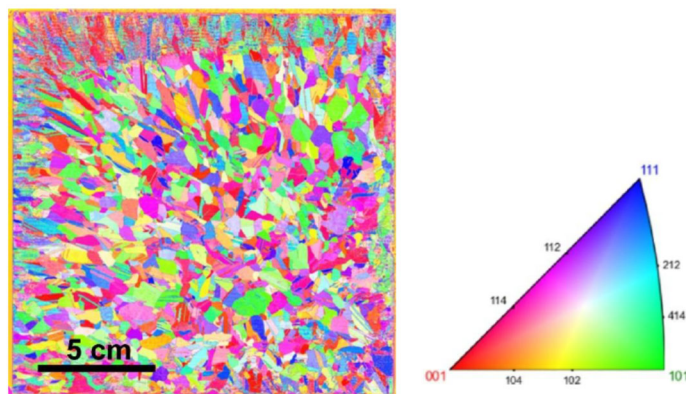


図 3 光学写真から予測した結晶粒方位分布の一例

【用語説明】

注 1)多結晶:

多数の単結晶粒から構成される固体。金属、セラミックス、半導体など多くの材料は多結晶である。

注 2)EBSD 法:

走査型電子顕微鏡と組み合わせて、電子線を試料表面に走査しながら、菊池パターンとよばれる回折パターンを解析することで、微視的な結晶粒方位の分布や、どのような結晶構造の材料であるかを測定する方法。

注 3)異方性エッチング:

結晶のエッチング速度が面方位によって異なること。本研究では、異方性エッチングにより多結晶シリコンの表面状態が各結晶粒の方位によって異なるように処理をすることで、可視光に対する反射率が結晶粒方位の情報を含むようにした。

注 4)LSTM ネットワーク:

深層学習の分野において時系列データの学習が進まなくなることを回避する手法の一つであり、古い記憶を忘れさせたり、新しい情報を更新したりする工夫がなされている。本研究では、光強度プロファイルを時系列データのように取り扱った。

注 5)データ増強:

元のデータに変換を加えてデータを増やすデータ科学の手法。本研究では、光強度プロファイルの回転や反転によりデータを増強した。

【論文情報】

雑誌名: APL Machine Learning

論文タイトル: A machine learning-based prediction of crystal orientations for multicrystalline materials

著者: Kyoka HARA(工学研究科・博士前期課程修了), Takuto KOJIMA(情報学研究科・研究員 現:産業技術総合研究所), Kentaro KUTSUKAKE(理化学研究所・研究員), Hiroaki KUDO(情報学研究科・准教授), Noritaka USAMI(工学研究科・教授)

DOI: 10.1063/5.0138099

URL:

<https://pubs.aip.org/aip/aml/article/1/2/026113/2892282/A-machine-learning-based-prediction-of-crystal>