

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

宇佐美 徳隆（名古屋大学大学院工学研究科 教授）

主たる共同研究者

大野 裕（東北大学金属材料研究所 学術研究員）

工藤 博章（名古屋大学大学院情報学研究科 准教授）

横井 達矢（名古屋大学大学院工学研究科 講師）

3. 事後評価結果

○評点（2022年度事後評価時）：

A 優れている

○総合評価コメント：

（以下、2022年度課題事後評価時のコメント）

本プロジェクトは多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立を目的としたもので、太陽電池用の多結晶シリコンを主な研究対象としている。AI技術による3次元の粒界構造解析やニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを利用した大規模計算を取り入れることで、物性と組織との関係を明らかにしている。それらの成果を実験にフィードバックし、製造プロセスの最適化や製品の歩留まりを向上させるプロセスの提案も行っている。また、開発した手法を他チームとの共同研究テーマに展開し、成果に結びつきそうな段階に至っている。論文発表、企業との共同研究も確り行われている。これらの成果は、これまで粒界の存在のため研究の進展が遅れていた多結晶材料の研究のスタイルを刷新する方向を、実例をもって示したものとして高く評価できる。

一方、世界トップレベルのジャーナルでの論文掲載が少なかったこと、研究期間内の対象材料が主としてシリコンに留まったことは残念である。

粒界が多結晶の機能に大きく作用する複雑な材料系はセラミックス等に数多く存在する。本研究で開発した手法をそれらにも適用できるよう注力して、「多結晶材情報学」を確立していただきたい。

（2024年1月追記）

本チームは、これまでに構築した独自の研究手法を活用して多結晶材料中の転位クラスター発生に関する研究を進展させ、多結晶体に固有な粒界の曲がり起因するナノファセットの形成によって転位クラスターが発生するというモデルを提唱するに至っている。これは本プロジェクトらしい成果と評価でき、Advanced Materials誌に掲載された。また、本研究領域の山本チームや関連企業などと連携し、開発した各手法を多様な多結晶材料の解析や製造プロセス開発へ展開するとともに、粒界構造と熱物性の関係の解明など、新規の研究にも着手しており、さらなる展開の足場も築いている。AI関係では人工ニューラルネットワーク原子間相互ポテンシャル（ANNポテンシャル）の更なる予測能力の向上に取り組み、記述子として従来用いられてきた解析関数を2体間および3体間のANNに置き換え、さらにANNの出力を原子間ポテンシャル部分に対応する別のANNの入力にして3つのANNを同時に学習させることで、最適な記述子および原子間ポテンシャルを構築、精度の向上に成功している。

以上の成果は、本チームが標榜する「多結晶材料情報学」の構築に資するところが大きく、研究延長の顕著な効果であると評価する。