二国間交流事業 共同研究報告書

令和5年6月1日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関·部局] 東海国立大学機構名古屋大学·大学院工学研究科 [職·氏名] 教授·宇佐美 徳隆 [課題番号] JPJSBP 120217706

1. 事	茶	Þ.	相手国: インド	(振興会対応機関:	DCT)との共同研究
1. 爭	来	石	相干国: イノト	(振興完刈)が機関:	DST)との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 実験、計算科学、機械学習の融合による高品質多結晶シリコンの成長プロセスの開発

(英文) Development of growth process of high quality multicrystalline silicon by experiments, computational simulation and machine learning

3. 共同研究実施期間 2021年6月1日 ~ 2023年5月31日 (2年0ヶ月)

【延長前】 <u>年 月 日 ~ 年 月 日 (</u>年<u></u>ヶ月<u>)</u>

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

SSN College of Engineering · Dean · Perumalsamy Ramasamy

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業に	より執行した委託費総額	1,950,000	円
12	1年度目執行経費	700,000	円
	2年度目執行経費	950,000	円
	3年度目執行経費	300,000	円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	11 名
相手国側参加者等	17 名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、 全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣·受入実績

	派	亚丁	
	相手国	第三国	受入
1年度目			
2年度目	2		3(3)
3年度目			2(2)

^{*} 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。 受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

本研究は、シリコンインゴットの結晶成長を研究対象として、日本側の宇佐美グループが保有する機械学習に関する知見と、インド側の Ramasamy グループの保有するシミュレーションに関する知見を融合することで、実験、計算科学、機械学習を高度に融合した新規な方法論による高品質結晶の成長プロセスを開発する研究基盤と将来にわたる協力関係を構築することを目的として実施した。また、インド側の若手研究者を日本に受け入れて、日本側の若手教員・大学院生との共同研究の機会を設け、研究推進に必要なコミュニケーション能力、目標達成のための課題設定・解決能力、協調性を養うことで若手研究者養成へ貢献することも目指した。

2021 年度は、Ramasamy グループで保有しているシリコンインゴット成長装置を対象として、熱流体シミュレーション実施用の計算モデルの改善を進めた。宇佐美グループでは、光学イメージから結晶方位分布を予測する機械学習モデルの高性能化を進めた。具体的には、モデルの訓練用に収集した光学イメージに対し、データ的に回転・反転する操作によるデータ増強を実施して学習を進めることで機械学習モデルの精度を向上させた。新型コロナ感染症の感染拡大の影響のため、インド側研究者の日本への渡航、日本側研究者のインドへの渡航はいずれも中止した。そのため、旅費として計上した経費を遠隔会議の実施に必要な機器購入費等に利用することで、円滑なコミュニケーションをはかり、計画の遂行に支障が出ないように共同研究を推進した。共同研究の成果発信の場として、当初の予定にはなかったが、2022 年 1 月に Indo-Japan Workshop on "Silicon Crystal Growth for Photovoltaic Applications"をオンライン開催し、800 人を超える登録者を集めて実施した。

2022 年度は、Ramasamy グループより、シリコンインゴット成長装置の構造データと装置運転データ、ならびに熱流体シミュレーション用モデルの提供を受け、共同でその改良を進めた。融液内の温度差が極めて少ないことや、融液部分の計算温度がシリコンの融点よりも低くなる場合があるなど複数の課題が明らかとなっていたが、計算用のモデルのジオメトリや物性パラメータを修正することで、実測データと熱流体シミュレーション結果の誤差を少なくするように改善した。改善した計算モデルをベースとして、成長装置内の坩堝台の形状を変化させることで、シリコンインゴットの成長時の熱流を変化させ、応力を低減することで結晶品質を改善できることを示した。Ramasamy グループは、シリコンインゴットを多様な条件で成長し、得られたインゴットをウェーハ状にスライスした試料を持参して、2022 年 11 月に宇佐美グループを訪問した。宇佐美グループは、ウェーハの光学写真から結晶方位分布や結晶欠陥分布を予測する独自の機械学習モデルの作成を進めており、そのためのデータを Ramasamy グループの試料から収集した。その後、共同で解析を行い、宇佐美、沓掛が 2023 年 3 月にインドを訪問して、解析結果について意見交換を行った。

2023年度は、2ヶ月間のみの研究期間であったが、Ramasamy グループから2名の若手研究者を受け入れて、共同研究の成果を共著論文に取りまとめた。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

本研究交流では、日本とインドの研究グループが協力し、機械学習、計算科学、実験を融合させた新規な方法論を開発した。この学際的なアプローチは、結晶成長プロセスの理解と制御に新たな洞察を提供した。具体的には、Ramasamy グループと宇佐美グループは、シリコンインゴット成長装置の構造や運転データを共有し、熱流体シミュレーションの改善を行った。これにより、実測データとシミュレーション結果の誤差を低減し、シリコンインゴットの成長プロセスをより正確にモデル化することを可能とした。また、宇佐美グル

ープは、光学イメージから結晶方位分布を予測する機械学習モデルの精度を改善させ、訓練データに含まれていない Ramasamy グループが作製した試料の評価に適用し、モデルのロバスト性についての知見を得ることができた。これらの取り組みは、シリコンインゴットの成長プロセスに関する理解を深めただけでなく、多様な材料の結晶成長プロセスに応用され技術革新を促進する可能性がある。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

日本とインドの研究者が共同で研究を行うことで、新たな知見を創出し、共著論文の発表に象徴される学術的な価値を得たことに加え、若手研究者も含め研究者間の交流が促進され、知識の共有と連携が深まった。また、インドと日本の二国間ワークショップを 2 度にわたり開催したことから、このプロジェクトに参画していないインドの研究者とのネットワーク構築にもつながった。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

本共同研究は、太陽電池用のインゴットを研究対象としていた。インドでは、太陽光発電の大規模普及が促進され、自国での生産が開始されつつある。共同研究の成果による結晶成長プロセスや装置の改良は、太陽電池の製造効率や品質の向上につながる。これによって、インドの太陽電池企業は国際市場で競争力を獲得し、成長を加速させることができる。その結果、インド国内での太陽電池の普及が促進され、再生可能エネルギーのシェアの拡大が期待される。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

本事業で来日したインド側の若手研究者と日本側の若手研究者が共同研究を実施した結果、得られた成果を学術論文に取りまとめて筆頭著者として発表するなど、若手研究者の研究力強化に貢献することができた。また、若手研究者の国際的な交流と共同研究経験は、インドの太陽電池産業の人材資源を豊かにし、技術革新の原動力となるといえる。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どの様な発展の可能性が認められるか)

共同研究によって形成された両国間の国際的な人的ネットワークは、新たな国際共同研究や教育プロジェクトの構築に発展する可能性がある。実際に、2024 年 2 月にはインド政府の国際学術交流促進プロジェクト SPARC (Scheme for Promotion of Academic and Research Collaboration) に提案を行った。また、得られた成果に基づき、国際的な産学連携や技術移転が促進され、将来にわたり産業エコシステム全体の発展に寄与することが期待される。

(7)その他(上記(2)~(6)以外に得られた成果があれば記載してください)