

# A3-16

## 窒化ケイ素の材料探索時間を大幅に削減する AI 技術の開発

○福島学・古嶋亮一・丸山豊・中島佑樹（産総研）

自動車や鉄道のモーター駆動制御、太陽光発電など、電力の変換と制御を高効率で行うことが求められるパワーモジュール基板には、放熱や電氣的絶縁性に優れた窒化ケイ素が有望と考えられている。要求される機械的特性、熱伝導率、電気絶縁性を実現すべく、原料や焼結助剤の選択と混合比、成形や焼結条件を調整しながら最適な条件を探索することになるが、近年の窒化ケイ素の需要拡大に対応し材料開発を加速するためには、時間とノウハウを要する物性評価を迅速化し、専門家の経験や勘に頼らず無数の製造条件に指針を与える技術が必要である。今回、評価を迅速化する手法として、窒化ケイ素の微構造画像から深層学習を活用して強度と破壊靭性を同時に回帰予測した結果について紹介する。

窒化ケイ素は粉末を焼き固めただけでは緻密化せず、焼結助剤と呼称される添加物と混合して高温で焼結させる必要がある。今回は焼結助剤として  $Y_2O_3$ 、 $La_2O_3$ 、 $CeO_2$ 、 $Sm_2O_3$ 、 $Eu_2O_3$ 、 $Gd_2O_3$ 、 $Tm_2O_3$ 、 $Yb_2O_3$ 、 $Lu_2O_3$  のいずれか希土類酸化物と  $MgO$  および  $Si$  を混合して窒化反応を経て焼結し、窒化ケイ素焼結体を得た。微細組織の SEM 画像を畳み込みニューラルネットワーク(CNN)に入力し、破壊靭性と 4 点曲げ強度、二つの平均二乗誤差の和を回帰の損失関数として学習させた。104 種類のサンプル（破壊靭性は  $5.9\sim 10.2\text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ 、曲げ強度は  $164\sim 893\text{ MPa}$ ）と 330 枚の SEM 像を準備した。SEM 像 1 枚から 2000 枚の小画像を切り出し学習用画像とし、学習と検証用のデータが 8 : 2 になるように分割した。

学習データを用いたとき、破壊靭性と曲げ強度の決定係数(予測精度を表す指標の一つ) $R^2$ は 0.97 と 0.98 であったため精度良いモデルを構築できたことが伺える。未学習の検証用画像データを用いて破壊靭性と曲げ強度を学習した CNN モデルに予測させた結果を図 1 に示す。横軸は破壊靭性・強度の実測値、縦軸はそれらの予測値であり、中央の線は実測値と予測値が完全に一致することを意味する。検証結果での  $R^2$ は 0.85 と 0.92 でいずれも高い値を示した。強度に比べ破壊靭性は若干低い値であったが、これは破壊靭性が組織情報に含まれない粒界特性の影響を受けるためである。一方、セラミックス材の強度は焼結体に残存する気孔のサイズと深く関係する。AI 着目部位可視化技術(grad-CAM)を用いたところ、学習した CNN モデルは気孔が強度に関係すること意識して予測していることを確認した。

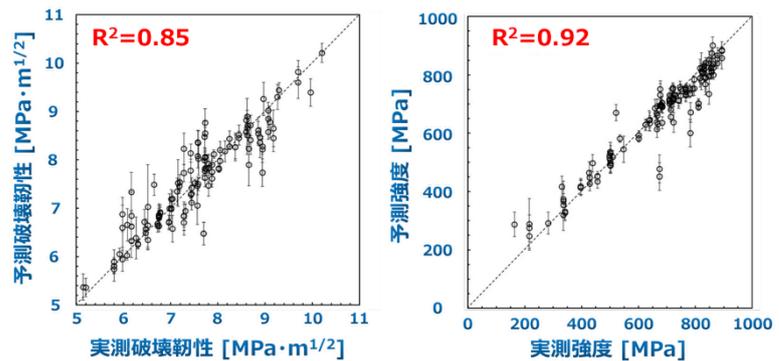


図 1 破壊靭性と曲げ強度の予測結果

- 1) R. Furushima, et al., J. Am. Ceram. Soc., 106, 817-821 (2023).
- 2) R. Furushima, et al., J. Am. Ceram. Soc., 106, 4944-4954 (2023).

### PROFILE

福島学（産業技術総合研究所 マルチマテリアル研究部門 研究グループ長）

- ①2004 年東京工業大学総合理工学研究科博士後期課程修了、2004 年産業技術総合研究所特別研究員
- ②専門分野：セラミックス多孔体、現在の研究内容：AI を活用した窒化ケイ素セラミックスの高性能化
- ③受賞歴：米国セラミックス学会 Richard M. Fulrath 賞、第 53 回市村地球環境学術賞 貢献賞
- ④著書：Environmentally Friendly Processing of Macroporous Materials、Elsevier (2015)等
- ⑤その他：技術相談のご連絡お待ちしております [manabu-fukushima@aist.go.jp](mailto:manabu-fukushima@aist.go.jp)