

四元数計算を用いた多結晶シリコンにおける ランダム粒界と $\Sigma 3^n$ 粒界の識別手法

Discrimination between random and $\Sigma 3^n$ grain boundaries in multicrystalline silicon
using quaternion expression

名大院情報¹, 名大院工² ○(P)小島 拓人¹, (M2)田島 和哉², 松本 哲也¹,
工藤 博章¹, 宇佐美 徳隆²

Nagoya Univ.^{1,2}, ○Takuto Kojima¹, Kazuya Tajima², Tetsuya Matsumoto¹,
Hiroaki Kudo¹, Noritaka Usami²

E-mail: tkojima@hi.is.i.nagoya-u.ac.jp

バルク成長多結晶シリコン中に導入される転位クラスターは成長方向に伝搬し、インゴット上部では広範囲に広がる。我々は転位クラスター発生源を PL 像の 3 次元再構成により求める手法を確立し[1]、粒界三重点近傍の粒界から発生した転位クラスターの透過電子顕微鏡像解析を行なっている[2]。本研究では発生源となった粒界の起源に注目した。 $\Sigma 3^n$ 粒界はランダム粒界内部での連続的な双晶 $\Sigma 3$ 粒界の導入によって高次化される。前回、擬単結晶の多結晶化領域の結晶方位を $\Sigma 3$ 回転操作の組み合わせに帰着し、多結晶化領域にランダム粒界が含まれないこと、および、多結晶化の開始点から成長方向から数 cm 以内で $n=5$ まで急速に高次化することを示した[3]。同手法を HP 多結晶シリコンに適用し、特に、転位クラスター発生の起点となった粒界がシードによって導入されたランダム粒界か $\Sigma 3^n$ 粒界であるかに注目し、解析を行なった。

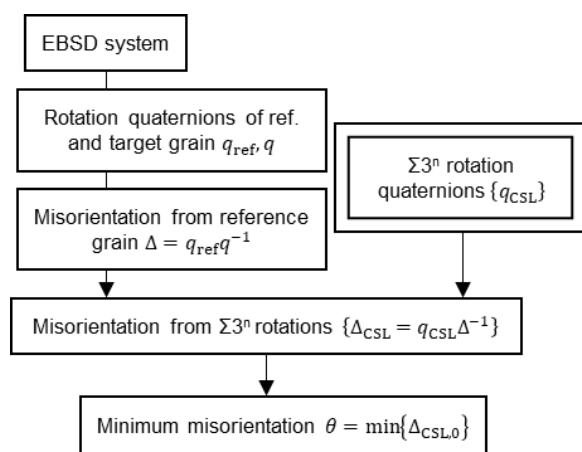


Fig. 1: Procedure of determination of $\Sigma 3^n$ rotations.

半自動化した解析手順を Fig. 1 に示す。転位クラスター発生起点となった粒界近傍の三重点を構成する粒界は本手法によって $n \geq 6$ の $\Sigma 3^n$ 粒界に帰着された。ただし EBSD 測定精度および結晶

歪を考慮した許容誤差 ($\sim 10^\circ$) 中に候補となる $\Sigma 3^n$ 回転操作が複数存在する。完全にランダムに選択された回転操作間の方位差の理論値[4]、および $1 \leq n \leq 9$ の $\Sigma 3^n$ 回転操作によって導入される立方対称性を考慮した方位差の分布を Fig. 2 に示す。高次の $\Sigma 3^n$ 回転操作はランダムの方位差に近い分布をしており、許容誤差を考慮すると区別できないため、周辺の結晶方位から合理性を判断する必要がある。今回対象とした三重点を形成する粒界は、周辺に中間となる結晶方位が存在しないため、ランダム粒界である可能性が大きい。

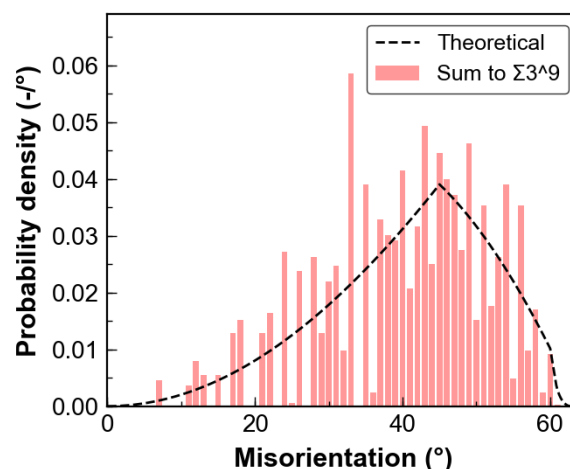


Fig. 2: Misorientation distribution of theoretical random and $\Sigma 3^n$ rotations ($n=1$ to 9).

謝辞 本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)によるものである。

参考文献

- [1] 田島和哉 他, 第 79 回応用物理学会秋季学術講演会, 20a-133-2, 2018.
- [2] 大野裕 他, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 9a-W611-1, 2019.
- [3] 小島拓人 他, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 9a-W611-3, 2019.
- [4] D. C. Handscomb, Can. J. Math. 10, **85** (1958).