

太陽電池用シリコン多結晶組織の $\Sigma 3^n$ ネットワーク解析

$\Sigma 3^n$ network analysis on multicrystalline silicon for photovoltaics

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

Grad. Info. Nagoya Univ.¹, Grad. Eng. Nagoya Univ.²

○Takuto Kojima¹, Kazuya Tajima², Tetsuya Matsumoto¹, Hiroaki Kudo¹, Noritaka Usami²

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

太陽電池用多結晶シリコンインゴットの結晶成長において転位クラスターの抑制は最も重要な課題のひとつである。転位クラスターの伝播を制限する粒界を導入するため多結晶組織を細粒化する手法は、劣化領域を制限することで平均的な品質向上に寄与している一方で、粒界は転位クラスターの発生源としても働くことが知られている[1]。転位クラスターと粒界の相互作用は複雑であり、その物理は十分に解明されていない。

結晶シリコン中において主要な粒界には、成長核が異なる結晶粒間の界面であるランダム粒界と、結晶粒内の双晶形成界面である $\Sigma 3$ 粒界、連続的な双晶の形成によって生じる方位差をもった結晶粒間の界面である $\Sigma 3^n$ 粒界があり、成長核起因と双晶起因に大別できる。双晶起因の多結晶組織について、逐次的な双晶形成による方位関係を示す回転四元数に対して結晶方位情報を参照することにより、その発生関係を解析する手法の開発を進めている[2,3]。

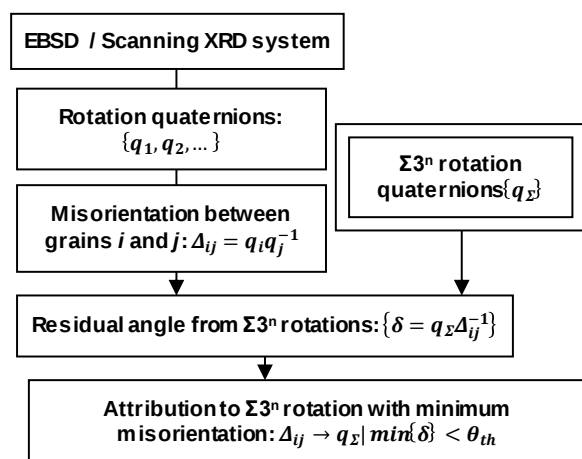


Fig. 1: Analysis flow for twin-originated misorientations between grains in multicrystallized region.

Python を用いて半自動化した解析手順を Fig.1 に示す。(1) EBSD 法あるいは XRD 走査測定によって取得した結晶粒ごとの結晶方位を回転四元数 $\{q_1, q_2, \dots\}$ によって表現する。(2) 結晶粒 i およ

び j の粒間の方位関係 Δ_{ij} を双晶関係に対応する回転四元数の組み合わせによる $\Sigma 3^n$ 回転四元数集合 $\{q_\Sigma\}$ に参照する。(3) Δ_{ij} との方位関係 δ の角度差が閾値 θ_{th} 未満である場合、粒間の関係を角度差が最小である $\Sigma 3^n$ 回転四元数に帰着する。条件を満たす $\Sigma 3^n$ 回転四元数が存在しない場合、成長核起因のランダムな関係と判定する。

この手法を多結晶組織に対して適用し、 $0 \leq n \leq 3$ の 53 個の $\Sigma 3^n$ 回転四元数へ粒間の方位差を帰着した。EBSD 測定により取得した多結晶組織の結晶方位マッピング上に本手法による帰着した $\Sigma 3^n$ ネットワーク図を重畳した結果を Fig.2 に示す。生成核を同一とする結晶粒は同一のネットワークに結合されることから、本手法により成長核起因によるランダム粒界を判別できることを示した。

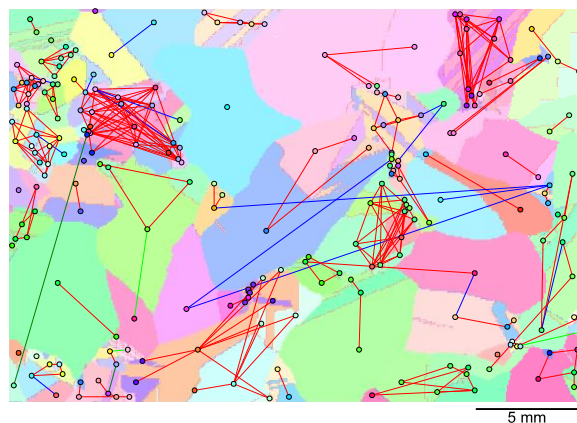


Fig. 2: $\Sigma 3^n$ network graph superimposed on crystal orientation color mapping. Red, blue, lime, and green edges represent $\Sigma 3$, $\Sigma 9$, $\Sigma 27a$, and $\Sigma 27b$, respectively.

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

参考文献

- [1] D. Oriwol et al., Acta Materialia **61**, 6903 (2013).
- [2] 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.
- [3] 小島拓人 他, 第 80 回応用物理学会秋季学術講演会, 20a-E314-4, 2019.