

実験とデータ科学的手法による 3次元多結晶 Si モデルの作成と有限要素応力解析 3D multicrystalline Si modeling by experiments and data scientific methods and finite element stress analysis

名大院工¹, 理研 AIP², 名大院情報³ ○(M2)山腰 健太¹, 香掛 健太郎², 小島 拓人³, 工藤 博章³, 宇佐美 徳隆¹
Grad. Eng. Nagoya Univ.¹, RIKEN AIP², Grad. Info. Nagoya Univ.³

○Kenta Yamakoshi¹, Kentaro Kutsukake², Takuto Kojima³, Hiroaki Kudo³, Noritaka Usami¹

E-mail: yamakoshi.kenta@i.mbox.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

太陽電池に広く使われる多結晶 Si には結晶欠陥が多く存在し、特に転位クラスターと呼ばれる結晶欠陥は太陽電池特性に悪影響を与えることが知られている。多結晶の成長では、結晶方位や粒界の多様性による複雑さに起因し、結晶欠陥の発生メカニズムの解明が進んでいない。我々は、人工粒界を利用した独自のモデル結晶による体系化や、実際が多結晶から収集するデータ駆動による現実的なモデルを併用し、実験・理論・シミュレーション・機械学習を連携させることで普遍的なメカニズム解明を目指している。本研究では、実際が多結晶から収集した大量の PL 及び光学画像に対する画像処理と機械学習により、転位クラスター発生領域を含む現実的な 3次元多結晶モデルを作成した。さらに、このモデルに対して有限要素応力解析を行い、転位クラスター発生に対する応力の影響を調査した。

2. 実験方法

本研究では、産業用ハイパフォーマンス多結晶 Si を用いた。インゴットは 156 mm×156 mm×180 μm の 729 枚のウエハにスライスされており、インゴット上部の連番のウエハについて、PL 画像を撮影した。PL 画像からは多結晶 Si 中の転位クラスター分布が得られており[1]、ここから 9.18 mm×9.18 mm×3.60 mm のモデル作成領域を決定した(Fig.1)。その後、ウエハをアルカリエッチングし、光学画像を撮影した。ここでは光源の位置を変化させながら撮影することで、画素ごとに結晶方位を反映したベクトルが取得できる。これを利用して、我々が独自に作成した「機械学習を用いた結晶方位予測モデル[2]」による方位予測とミーンシフトク

ラスタリングによる結晶粒の分割を行った。その後、補正を行い連番のウエハを積層させることで、有限要素応力解析のモデルを作成した(Fig.2)。モデルは要素数 48373 の六面体要素で構成されており、各結晶粒には、方位予測により得られた代表点の方位が与えられている。解析の条件として、キャスト法による結晶成長中のインゴット内部を再現するため、各接点に勾配を付けた温度分布を与え、凝固時の膨張と対称性を加味してモデルの z 軸方向に圧縮応力を加え、有限要素応力解析を実行した。

3. 結果と考察

作成した現実的な多結晶 Si モデルでの有限要素応力解析に成功した。解析結果から得られたミーゼス相当応力の分布から粒界や粒界 3 重点への応力の集中が見られた(Fig.3)。一方で、転位クラスター発生点付近での集中は見られず、今後は解析結果から得られた応力テンソルを用いて、転位発生への影響が大きい、すべり面での分解せん断応力を調べ、転位発生への影響について考察する必要がある。

4. 結論

ウエハの光学画像から実際が多結晶 Si 組織を 3次元で再現し応力計算を行った。今後、解析結果を利用して、転位クラスターの発生に有意だと考えられるすべり面上の応力について調査する。

[1] Y. Hayama *et al.*, *Solar Energy Mat. and Solar Cells* **189**, pp. 239-244 (2019).

[2] 小島他, 第 68 回応物春季, 2021, 18a-Z32-9.

本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)の支援を受けたものです。

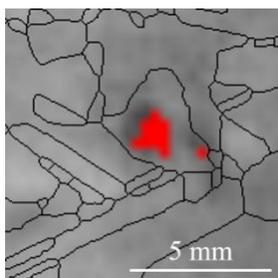


Fig.1 Focused part. Red area shows dislocation cluster and black lines show grain boundaries.

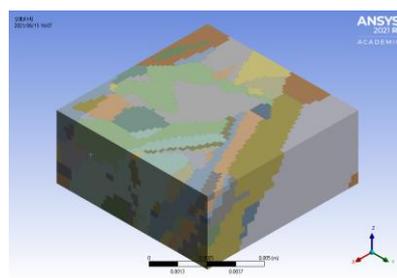


Fig.2 Model for stress simulation. Each color shows other grains

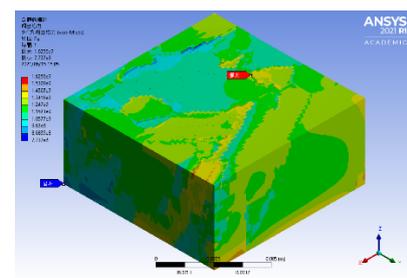


Fig.3 Distribution of Mises equivalent stress. Red is largest and blue is smallest.