# 双晶形成ネットワークグラフによる多結晶インゴットの結晶組織解析

## Twinning network graph analysis on ingot-scale structure of multicrystalline materials

### 名大院情報 <sup>1</sup>, 理研 AIP<sup>2</sup>, 名大院工 <sup>3</sup>

○(P)小島 拓人<sup>1</sup>,沓掛健太朗<sup>2</sup>,松本 哲也<sup>1</sup>,工藤 博章<sup>1</sup>,宇佐美 徳隆<sup>3</sup>

Grad. Info. Nagoya Univ.<sup>1</sup>, RIKEN AIP<sup>2</sup>, Grad. Eng. Nagoya Univ.<sup>3</sup>

°Takuto Kojima<sup>1</sup>, Kentaro Kutsukake<sup>2</sup>, Tetsuya Matsumoto<sup>1</sup>, Hiroaki Kudo<sup>1</sup>, Noritaka Usami<sup>3</sup>

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

多結晶材料は結晶成長装置の大型化が容易で ある一方,大型インゴットは特性の不均一性が問 題となる.そのためインゴットスケールでの多結 晶組織の特徴抽出が重要となってくる.一方向凝 固法による多結晶組織はルツボ底部の生成核か ら柱状に成長し,柱状構造の内部では連続的な双 晶形成による多様な粒界を含む. 個々の生成核間 の方位関係はランダムである一方, 双晶形成によ る方位関係は結晶学的に決定されるため結晶粒 の発生関係に関する情報を含んでいる.我々はこ れまでに太陽電池用多結晶シリコン基板を対象 に,電子後方散乱回折法によって取得した高々 30×40 mm<sup>2</sup>の試料での双晶形成による方位関係 をネットワークグラフに帰着させ、分析する手法 の開発を行なってきた[1-3].本研究では、同一の 多結晶シリコンインゴットからスライスした複 数の 156×156 mm<sup>2</sup>の基板について, Laue スキャ ナー法[4]によって取得した結晶方位についてネ ットワーク解析を行ない,インゴットスケールの 多結晶組織の特徴抽出を試みた.ネットワーク解 析は Python パッケージの NetworkX [5]を用いた コーディングによって行った.

成長方向に対してインゴット下部,中央,上部 からそれぞれ 1918, 1490, 1390の結晶粒(重心位 置)の結晶方位を取得し(Fig.1 (a)-(c)),粒間の方 位関係を最小の残差角度  $\theta$ を与える n 次( $0 \le n \le 3$ ) の双晶形成関係( $\Sigma 3^n$ )に帰着した.粒間の距離  $d \ge$  $\theta$ について閾値 $\theta_{th} = 2^\circ$ ,  $d_{th} = 40 \text{ mmを選び}$ ,

 $f(\theta, d) = \theta/\theta_{th} + d/d_{th} \le 1$  (1) を満たす双晶関係をエッジ $e \in E$ とするグラフ *G* を生成した. *G* に含まれる連結サブグラフ $g \in G$ のうち,4 点以上のノードを含むものを光学像か ら抽出した粒界マッピング上にプロットしたも のを Fig.1 に示す.同一の*g* に含まれる結晶粒は 同一の生成核から成長したと考えられる.結晶成 長が進むにつれて,*g* はノード数が大きくなり, 多数のノードを持つ*g* が基板中を占める面積も 大きくなる傾向が見られた.ネットワークグラフ を用いた解析によって,インゴットスケールの多 結晶組織の特徴抽出が可能となった.

**謝辞** 本研究は, JST CREST (JP MJCR17J1)によ るものである.

#### 参考文献

- [1] 小島他, 第 66 回応物春季, 9a-W611-3, 2019.
- [2] 小島他, 第80回応物秋季, 20a-E314-4, 2019.
- [3] 小島他, 第 67 回応物春季, 14a-A205-3, 2020.
- [4] T. Lehman et al., Acta Materialia 69, 1 (2014).

[5] A. A. Hagberg et al., Proc. SciPy2008, pp. 11-15.



Fig. 1. The subgraphs containing  $\geq 4$  nodes superimposed on the GB line image from the (a) ingot bottom, (b) middle, and (c) top part. The gray, red, blue, lime, and green lines represent edges of  $\Sigma 1$ ,  $\Sigma 3$ ,  $\Sigma 9$ ,  $\Sigma 27a$ , and  $\Sigma 27b$ , respectively. The colors of nodes represent crystal plane to the normal direction keyed by color map. The linewidth of edges is proportional to  $1 - f(\theta, d)$ , meaning that edges with long distance and/or large residual angle are thin.