

キャスト成長シリコンにおける $\Sigma 3$ 粒界からの転位発生の微視的描像

Insight into dislocation generation at $\Sigma 3$ grain boundaries in cast-grown silicon ingots

東北大金研¹, 阪大産研², 名大院工³ [○]大野裕¹, 吉田秀人², 横井達矢³, 松永克志³,
井上耕治¹, 永井康介¹, 宇佐美德隆³

IMR, Tohoku Univ.¹, SANKEN, Osaka Univ.², GSE, Nagoya Univ.³, [○]Yutaka Ohno¹, Hideto Yoshida²,
Tatsuya Yokoi³, Katsuyuki Matsunaga³, Koji Inoue², Yasuyoshi Nagai², and Noritaka Usami²

E-mail: yutaka.ohno.e6@tohoku.ac.jp

太陽電池用のキャスト成長シリコンインゴットでは成長中に粒界から高密度に発生する転位が太陽電池特性に悪影響を与えるが、結晶方位や粒界特性・構造の多様性に起因し発生プロセスの解明が進んでいない。そこで、実用インゴットから収集するデータ駆動による現実的モデル結晶と人工粒界を利用した独自のモデル結晶による体系化を併用して、マルチスケールの実験・機械学習・第一原理計算・シミュレーションを連携させ、普遍的な転位発生原理の解明を進めている。これまでに、キャスト法で成長したハイパフォーマンス多結晶[1]や擬単結晶[2]のインゴットにおいて、熱応力が粒界に集中して大きなせん断応力が働くすべり系で転位クラスターが発生することが示された。本研究では、その過程で見出された、最も普遍的な粒界である $\Sigma 3$ 粒界からの転位発生を精査し、特徴的な粒界構造に起因する転位発生の微視的描像を得たので報告する。

ハイパフォーマンス多結晶シリコンインゴットから転位発生源として働く $\Sigma 3$ 粒界を抽出し[1]、その微細構造を走査透過電子顕微鏡法などで評価した。粒界の大部分は $\Sigma 3\{111\}/\{111\}$ および $\Sigma 3\{112\}/\{112\}$ 対称粒界セグメントで構成されるミクروسケールの階段状ファセット構造(図1)であった。ファセットの交線から優先的に転位が放出されて小傾角粒界を形成するのが観測され、その転位のバーガースベクトルが交線と平行であることが分かった。応力解析により、熱応力はファセットの交線近傍に集中する傾向があると示された。また、第一原理計算より交線に沿った局所的引っ張りひずみ(格子の膨張)が予測された。転位の発生に必要な応力は剛性率の 10^{-3} 倍程度と考えられているが[3]、剛性率は格子定数の -5 乗に比例するため[4]、転位発生に必要な熱応力はファセットの交線に沿って減少することとなる。

このファセットの交線における応力集中と剛性率の低下が高密度な転位の発生に寄与すると考えられる。

本研究は JST CREST “多結晶材料情報学による一般粒界物性理論の確立とスマートシリコンインゴットの創製”(Project No. JP-MJCR17J1, H29-R5) による。

[1] K.Yamakoshi, *et al.*, 2021 MRS Fall meeting, DS03.13.02.

[2] K.Yamakoshi, *et al.*, 69th JSAP Meeting, 26a-E104-10.

[3] R.A. Varin & K. Tangri, *Mat. Sci. Eng.* **72** (1985) 177.

[4] I. Yonenaga, *et al.*, *AIP Adv.* **5** (2015) 077131.

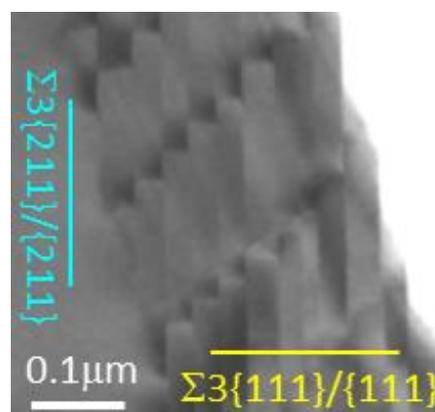


Fig.1 $\Sigma 3$ GB acting as dislocation source.