非対称粒界の粒界構造を網羅する人工粒界形成と キャリア再結合速度への影響解明

Growth of artificial asymmetric grain boundaries with controlled grain boundary structures and their impact on carrier recombination velocity 名大院工¹, 理研 AIP², 名大院情報³, 東北大金研⁴

福田 祐介¹, °沓掛 健太朗², 小島 拓人³, 大野 裕⁴, 宇佐美 徳隆¹

Grad. Eng., Nagoya Univ.¹, AIP, RIKEN², Grad. Info., Nagoya Univ.³, IMR, Tohoku Univ.⁴ Yusuke Fukuda¹, °Kentaro Kutsukake², Takuto kojima³, Yutaka Ohno⁴, Noritaka Usami¹ E-mail: fukuda.yusuke@d.mbox.nagioya-u.ac.jp, kentaro.kutsukake@riken.jp

【はじめに】多結晶 Si は主要な太陽電池用基板材料であるが、粒界でのキャリア再結合による変換効率の低下が課題の一つである。しかし、これまでに粒界構造とキャリア再結合の関係について調査されているのは、無数の構造のうちごく一部のみである。粒界の種類の大部分を占める非対称粒界では、その特性はほとんど調査されていない。この原因の1つは、自然発生する非対称 粒界は構造が系統的でないことである。そこで我々は、3つの因子で表現される粒界構造空間を 網羅する人工粒界を作製することで、非対称粒界の構造と粒界でのキャリア再結合速度(v_{GB})の関係の系統的な調査を可能とし、これまでに、3つの構造因子がv_{GB}に与える影響の大小関係を報告 した[1]。本発表では各構造因子が及ぼす影響に焦点あてた研究成果を報告する。

【実験方法】<100>配向 CZ 単結晶 Si を組み合わせた複合種結晶と、成長界面の形状制御により 自発的な粒界成長方向変化を利用する独自の成長技術を用いて、非対称傾角粒界を含むインゴッ トを成長した。作製した人工粒界の構造を表す3つの構造因子は、1.相対方位差α、2.非対称角 度β、3.ねじれ成分に対応する配向方向からのズレ角度θである。インゴットの成長方向と平行 に 1mm 厚で切り出したウェハに対し、化学研磨、表面酸化膜除去、表面パッシベーションを行っ た後に、Photoluminescence(PL)イメージを測定した。その後、計算PL プロファイル(二次元キャ リアシミュレーション結果)と計算条件(v_{GB}と粒内のキャリア拡散長)を教師データとして作成 した機械学習モデルに対して、測定したPL プロファイルを入力することでv_{GB}を直接推定した[2]。

【結果と考察】図1に、多様な β を持つ(a) Σ 5 粒界と(b) Σ 13 粒界から成長させた人工粒界に対し て測定した、残留種結晶からの距離と v_{GB} の関係を示す。いずれの Σ 値においても、 v_{GB} は β に依 存しないほぼ一定の下限値(ベースライン)をもつことがわかる。 Σ 5 粒界のベースラインは、 Σ 13 粒界と比較して低い値を取るといえる。図2は、成長過程に伴う θ の変化が(310) Σ 5 粒界の v_{GB} に 与える影響であり、色の違いは、粒界を形成したインゴットが異なることを示している。 v_{GB} は、 θ が12°付近まで徐々に増加し、 θ が12°を超えたあたりから、急激に増加することがわかる。こ れらの結果は、ねじれ成分の導入に伴い、設計した傾角粒界が混合粒界となり、再構成時に3次 元の複雑な緩和構造を形成することに起因すると考える。

【謝辞】本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)の支援のもと行われた。

【参考文献】[1]福田他、第82回応物秋季、2021、口頭発表10p-N104-5

[2] K. Kutsukake, K. Mitamura, T. Kojima, and N. Usami, Appl. Phys. Lett. 119, 032105 (2021).





Fig.1. *v*_{GB} at (a) Σ 5 and (b) Σ 13 GBs with various β predicted using a machine learning model. The red lines indicate third-order polynomial regression curves. It is noted (310) symmetric GBs extracted from different ingots are represented by different colors .

Fig.2. Change in v_{GB} as a function of θ . It is seen that v_{GB} starts to increase drastically when θ exceeds ~12°.