

多結晶シリコンの光反射特性による結晶方位推定モデル

Crystal orientation estimation model based on light reflection profile for multicrystalline silicon

名大院情報¹, 名大院工², 理研 AIP³

○(P)小島 拓人¹, 原 京花², 杵掛健太郎³, 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, RIKEN AIP³

°Takuto Kojima¹, Kyoka Hara², Kentaro Kutsukake³, Tetsuya Matsumoto¹, Hiroaki Kudo¹, Noritaka Usami²

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

多結晶シリコンの一方方向凝固成長における欠陥の導入には、微視的な原子配置や巨視的な応力分布など多様なスケールの現象が関与していることが予想される。結晶方位は粒界周辺の応力分布や双晶導入などに関与するが、インゴットスケールのデータ取得は従来の回折現象を活用した手法では困難である。大径試料に対して低コストで結晶方位推定を行なうため、異方性エッチングによってテクスチャ構造を形成し、光反射特性から、X線回折による結晶方位分布を教師データとした機械学習モデルによって結晶方位を推定する手法の開発を行ない、平均推定誤差 $\sim 10^\circ$ の推定モデルを得ている(表 I, x1) [1,2]。本研究では訓練データに対してデータ拡張を行なうことで、推定精度を向上した。

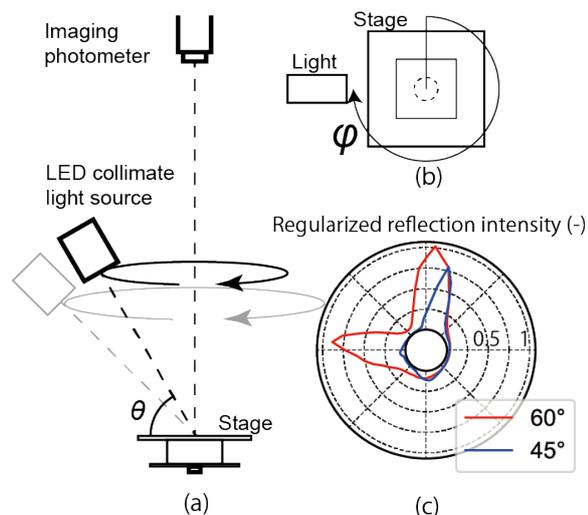


Fig. 1: Schematic images of (a) front and (b) top view of the light reflection measurement equipment. (c) An example of reflection intensity profile.

光反射特性を取得した装置の概略を図 1(a), (b)に示す。仰角 $\theta = 45^\circ, 60^\circ$ で LED コリメート光源から白色光を照射し、2次元輝度計により反射光の輝度像を取得した。光源をステージ中央垂直軸で 5° ステップで 360° 回転させ、 72×2 枚の輝度像を取得する。結晶粒ごとの代表点から照度値を取得し、 72×2 チャンネルの入力データとした(例: 図 1(c))。Laue スキャナー法[3]によって取得した結晶方位 4,795 点を教師データとし、1,552 点をテストデータとした。結晶方位の表現法にはシリコンの立方晶対称性を考慮した四元数を採用し、推定の出力とし

た。訓練時の損失関数には、回転表現空間での角度差を表す測地線距離を用いた。推定モデルは LSTM 層と全結合層で構成し、学習パラメータ数は 100,612 個である。

TABLE I: Quartiles and mean values of estimation error of test data. Each estimation model was trained without augmentation, and with x3 and x72 augmentation.

	x1	x3	x72
1st quartile	3.23°	2.49°	1.88°
Median	5.09°	4.25°	3.04°
3rd quartile	9.02°	7.68°	5.62°
Mean	9.96°	6.54°	5.92°

訓練データの照度値プロファイルと四元数をそれぞれデータの的に回転させることでデータ拡張を行なった。データ数を N 倍に拡張するとき、照度値プロファイル x_0 を n ステップ ($n \in \{72i/N | i = 0, \dots, N-1\}$) シフトした $\{x_n\}$ と、 $(0,0,1)$ 軸について $5 \times n$ 回転する四元数 $\{q_n\}$ を結晶方位四元数 q_0 に対して施した $\{q_n q_0\}$ の組 $\{x_n, q_n q_0\}$ を新たな訓練データとした。教師データの 2 割を検証データとし、 $N=1$ (拡張なし), 3 (120° ステップ回転), 72 (5° ステップ回転) の $4,795 \times 0.8 \times N$ 点の訓練データでモデルを学習し、1,552 点のテストデータでの推定誤差を表 I に示す。推定誤差の第 1-3 四分位数がデータ拡張によって 6 割程度に減少した。平均値も同程度減少しており、これは光源仰角を増やすことで実験的にデータ点数を増やした際に四分位数が 7 割程度減少したのに対して平均値の減少が 9 割程度に留まった結果[2]と対照的である。これは推定に失敗した結晶粒数が大きく減少したことを示唆している。

データ拡張によって約 75% の入力データに対し、 6° 以下の推定誤差を得られる機械学習モデルを取得した。これによってモデルの精度程度の大域的な結晶方位分布の統計情報を得ることが期待できる。

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

参考文献

- [1] 加藤他, 第 80 回応物秋季, 2019, 20a-B01-7.
- [2] 小島他, 第 17 回「次世代の太陽光発電システム」シンポジウム, 2020, PB-25.
- [3] T. Lehman et al., Acta Materialia **69**, 1 (2014).