ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

УДК 620.184.3, 004.932.2, 004.032.26

МЕТОД БЫСТРОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАРАМЕТРОВ ОРИЕНТАЦИИ МУЛЬТИКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КРЕМНИЯ

© С. М. Пещерова¹, Е. А. Осипова², А. Г. Чуешова¹, С. С. Колесников², М. Ю. Рыбьяков¹, А. А. Кузнецов², В. Л. Аршинский²

¹Институт геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН, 664033, г. Иркутск, ул. Фаворского, 1a ²Иркутский национальный исследовательский технический университет, 664074, г. Иркутск, ул. Лермонтова, 83 E-mail: spescherova@mail.ru

В данной работе продемонстрировано, что цифровые технологии могут быть успешно применены для анализа изображений и прогнозирования свойств функциональных материалов на примере нового метода быстрой идентификации параметров кристаллографической ориентации мультикристаллического кремния. Предлагаемый метод основывается на технологиях машинного обучения. Анализ текстурированных пластин мультикристаллического кремния осуществляется с помощью оригинального алгоритма кластеризации монокристаллических зёрен, а идентификация параметров кристаллографической ориентации производится посредством модели нейронной сети. Принцип идентификации базируется на корреляции контраста отображения макроструктуры, связанного с отражательными особенностями зёрен и параметрами их ориентации. Архитектура нейронной сети многослойный персептрон — выбрана с учётом ограничений по количеству входных данных. Однако в совокупности с алгоритмом оптимальное количество обучающих данных удовлетворяет требованиям процесса обучения нейронной сети и обеспечивает высокую эффективность идентификации параметров ориентации на сканированных изображениях текстурированных пластин мультикристаллического кремния.

Ключевые слова: мультикристаллический кремний, параметры ориентации зёрен, нейронные сети, машинное обучение, алгоритм SiView, дифракция обратнорассеянных электронов.

DOI: 10.15372/AUT20220607

Введение. Производство дешёвого поликристаллического кремния (мультикремния), используемого для создания солнечных элементов, является важнейшей составной частью развития зелёной энергетики — мирового тренда, направленного на борьбу с глобальным климатическим потеплением [1]. Повышение эффективности солнечных элементов на основе мультикремния и снижение затрат на их производство — основные задачи современных исследований в этой области. Так, солнечные элементы на основе мультикремния с пассивным излучателем и задним контактом, известные как PERC Solar Cells, сегодня становятся всё более распространёнными и конкурентоспособными по сравнению с аналогами из монокристаллического кремния [2–6]. Эффективность солнечных элементов PERC на данный момент достигает 22,8 % [7], что обусловливается развитием технологий текстурирования — создания ориентационно-чувствительного рельефа поверхности пластин в целях снижения их отражательной способности [8–12]. Однако процессы текстурирования крайне чувствительны к параметрам кристаллографической ориентации монокристалли-

ческих зёрен, составляющих структуру мультикремния, что весьма затрудняет оптимизацию создания эмиттера, а также процессы осаждения частиц SiNx (PECVD) [13]. Так, вследствие текстурирования (анизотропное травление) в зёрнах с различной ориентацией формируется соответствующий рельеф (перевёрнутые нанопирамидоподобные структуры), ответственный за вариации отражательной способности пластины в целом [14]. Поскольку монокристаллические зёрна на поверхности текстурированных пластин имеют различные оттенки серого цвета в соответствии с отражательной способностью и параметрами ориентации и видны невооружённым глазом, по оттенкам зёрен можно судить об их отражательной способности: тёмные оттенки зёрен соответствуют ориентации (100) и проявляют низкую отражательную способность, зёрна (110) умеренного серого цвета – среднюю, а самые светлые зёрна (111) — соответственно высокую отражательную способность [15]. Известны алгоритмы определения отражательной способности зёрен по их параметрам ориентации и морфологии текстурированной поверхности согласно формулам, связывающим угол отражения от граней перевёрнутой пирамиды с ориентацией зерна [16]. Так, основной фокус исследований в данной области направлен на анализ распределения и отражательной способности зёрен в мультикристаллическом кремнии, а также установление корреляций между параметрами структуры мультикремния и их влияния на процессы пассивации, диффузии эмиттера, концентрации и времени жизни неосновных носителей заряда [17]. Методы определения параметров ориентации в пластинах мультикремния играют важную роль в анализе их качества. Преимуществом пользуются методы, не требующие специальной подготовки поверхности и ограничений по размеру исследуемых пластин [18–20]. Методы машинного обучения активно применяются для повышения эффективности данных методов при исследовании поликристаллических материалов. Например, для идентификации параметров ориентации на основе отражательной оптической микроскопии в сталях и сплавах, когда оптические сигналы от многофазных микроструктур этих материалов не поддаются интерпретации с помощью физических моделей, использовали свёрточную нейронную сеть [21]. Принцип свёрточной нейронной сети [22] применяли при создании модели для предсказания параметров ориентации поликристаллического алюминия на основе отражательной поляризованной микроскопии [23].

Целью данной работы является определение параметров ориентаций в крупногабаритных пластинах мультикремния с применением технологий компьютерного зрения для задач кластеризации зёрен на сканированных изображениях текстурированных пластин и нейронных сетей для идентификации параметров ориентаций. Принципиальным отличием данного подхода от существующих моделей машинного обучения является его автономность от экспериментальных методов исследования. Для его реализации необходимо иметь сканированные оптические изображения текстурированных пластин мультикремния.

Материалы и методы исследования. Продольные и поперечные пластины различных слитков мультикремния (*p*- и *n*-типа проводимости) подвергались шлифовке абразивными порошками (2–5 мк), щелочному травлению в 10 %-ном водном растворе КОН при температуре 80° в течение 15–40 мин для формирования ориентационно-чувствительного рельефа поверхности и сканированию обычным офисным сканером EPSON PERFECTION V10 при 1200 DPI (рис. 1). Время травления пластин варьировалось в целях получения рельефа различной степени глубины, что предполагает универсальность модели при идентификации параметров ориентации и её независимость от конкретных условий травления.

Для создания обучающего и тестового наборов данных на реальных пластинах был сделан анализ дифракции обратнорассеянных электронов (EBSD — Electron Backscattered Diffraction) — карт IPF (Inverse Pole Figure). Данные EBSD получали на сканирующем электронном микроскопе JEOL JIB Z-4500, оснащённом детектором фирмы Oxford (США), а их анализ проводился в Иркутском национальном исследовательском техническом университете. Для того чтобы обучающие данные полностью описывали все семейства ори-



Puc. 1. Сканированные изображения пластин мультикремния: *a* — продольной *n*-типа; *b* — продольной *p*-типа; *c* — поперечной *n*-типа; *d* — поперечной *p*-типа

ентаций в мультикремнии, был разработан алгоритм SiView, позволяющий определять наиболее репрезентативные области с максимальным количеством кластеров (монокристаллических зёрен разных оттенков), размер которых соответствует площади сканирования EBSD (рис. 2, *b*, *c*). В качестве платформы для разработки алгоритма был выбран язык Python и среда программирования Jupyter Notebook. Перед использованием алгоритма изображения были выровнены по горизонтали и вертикали, обрезаны до прямоугольной формы и переведены в оттенки серого. Для устранения механических дефектов, возникших при полировке или текстурировании, применяли алгоритм экспоненциального сглаживания. Каждая строка пикселей обрабатываемого изображения в оттенках серого представлялась как одномерный массив данных, к элементам которого применяли следующую формулу:

$$gray_t = a^2 gray_t^2 + (agray_t - a^2 gray_t)gray_{t-1} + (1 - a^2)gray_{t-1}gray_{t+1},$$
(1)

где $gray_t$ — значение массива с индексом t; a — коэффициент памяти, определяющий степень влияния предыдущего значения на текущее. Экспериментально установлено, что оптимальное значение коэффициента памяти a составляет 0,2.

Далее изображение фрагментировали на ячейки, каждая из которых содержит информацию о координатах и количестве кластеров — параметр cls (см. рис. 2, *b*). Для сокращения времени на анализ каждой ячейки и достижения требуемой точности определения количества кластеров в ней изображение ячейки «сжимали» в 10 раз (см. рис. 2, *c*). Основным критерием точности в данном случае является регистрируемый невооружённым глазом контраст оттенков серого. В качестве алгоритма кластеризации использовали алгоритм DBSCAN (Density-based spatial clustering of applications with noise) на базе библиотеки sclearn.cluster. Данный алгоритм группирует вместе тесно расположенные точки в заданном пространстве, при этом не учитывает точки одиночные и отдалённые от ближайших соседних.

Расстояние между точками определяли с помощью модифицированной метрики евклидова расстояния. Модификация заключалась в том, что в итоговое расстояние оттенок серого цвета вносит больший вклад, чем координатные расстояния X и Y:

$$\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + 1,1(\operatorname{gray}_1 - \operatorname{gray}_2)^2},$$
(2)



Рис. 2. Процесс обработки фрагмента сканированного изображения с помощью алгоритма SiView: a — оригинальное изображение; b — фрагмент обработанного изображения (выделен на исходном изображении) с помощью алгоритма SiView с сеткой 2×2 мм²; c — изображение «сжатой» в 10 раз ячейки с девятью кластерами; d — карта IPF(Z) EBSD, соответствующая выделенной на сетке ячейке

где x_i — координаты по оси x; y_i — координаты по оси y, верхний предел значений которых определяется размером исследуемой ячейки в пикселях; gray_i — оттенок серого, принимающий значения от 0 до 255.

Алгоритм кластеризации DBSCAN, на основе которого сформирован алгоритм SiView, принимает на вход два параметра: Eps — радиус окрестности, для которой определяется количество соседствующих точек; MinPts — пороговое значение количества точек внутри радиуса Eps, характеризующее минимальную плотность точек в кластере.

Экспериментальные исследования показали, что при определении параметра Eps необходимо учитывать тот факт, что с уменьшением разброса значений оттенков серого в целевой ячейке должно уменьшаться значение Eps, т. е. в ячейках, где разброс оттенков серого меньше, радиус окрестности Eps должен быть меньше, чем в ячейках с большим разбросом оттенков серого. При этом экспериментально выявлены следующие соотношения:

$$Eps = \begin{cases} 4.7 & \text{при} & (gray_{max} - gray_{min}) = 110; \\ 4.2 & \text{при} & (gray_{max} - gray_{min}) = 80. \end{cases}$$

Поэтому в данной работе для вычисления Eps (при решении рассматриваемой задачи) предлагается следующая формула:

$$Eps = \frac{172 + (gray_{max} - gray_{min})}{60},$$
(3)

где gray_{max}, gray_{min} — максимальное и минимальное значения оттенка серого в анализируемой ячейке.



Рис. 3. Блок-схема алгоритма поиска репрезентативных областей SiView: H — высота пластины, L — ширина пластины, n — шаг разбиения пластины на ячейки, который соответствует размеру сканирующего поля EBSD, M — количество ячеек на пластине

Блок-схема алгоритма SiView представлена на рис. 3.

Результаты и их обсуждение. В качестве архитектуры нейронной сети для решения поставленной задачи выбран многослойный персептрон. В связи с тем, что данные EBSD для обучающей выборки связаны с оригинальным алгоритмом цветокодирования программного обеспечения HKL Channel 5 и им должны соответствовать сканированные изображения областей текстурированных пластин. Дополнить обучающую выборку результатами других исследований, доступных в сети Интернет, не представляется возможным. Количественные ограничения по данным в области материаловедения являются весьма распространённым явлением [24]. Поэтому принято использовать так называемые синтетические данные, что принципиально не согласуется в нашем случае с концепцией поставленной задачи: сканированное изображение области пластины мультикремния в оттенках серого должно строго соответствовать ориентационной карте IPF (обратная полюсная фигура) метода EBSD (рис. 4, a, b, c). Кроме того, использование нескольких сканированных изображений текстурированной различными способами одной и той же пластины для увеличения обучающей выборки недопустимо, так как структура мульти-



Рис. 4. Пример данных обучающей выборки: a — ячейка при 0°; b — ячейка при 180°; c — соответствующая ячейке карта EBSD IPF(Z); d — обратная полюсная фигура (треугольник IPF)

кремния меняется в объёме. Для эффективной кластеризации и идентификации параметров ориентации пластины сканировали дважды (с поворотом на 180°), т. е. каждому ключу (карта EBSD IPF(Z)) соответствуют два сканированных изображения.

Основной задачей разработки нейронной сети на стадии формирования эффективной обучающей выборки, охватывающей всю обратную полюсную фигуру (треугольник IPF, рис. 4, d), является выбор ячеек и их оптимального количества с помощью алгоритма SiView. При выборе учитывались следующие критерии:

— ячейка должна содержать максимальное количество кластеров;

— кластеры одной ячейки должны существенно различаться по оттенку серого;

— кластеры во всех выбранных ячейках должны существенно различаться по оттенку серого.

Данные, подаваемые на вход нейронной сети, были нормализованы (каждое значение цвета делили на 255) и представляли собой маску (совмещённые в графическом редакторе сканированные изображения ячейки и карты IPF).

В качестве архитектуры нейронной сети выбран многослойный персептрон, а не сверхточная нейронная сеть. Первой причиной этому является то, что, несмотря на свою относительно простую архитектуру, многослойный персептрон успешно применяют для решения достаточно широкого круга разнообразных сложных задач. Вторая причина — проблему малого объёма обучающих данных частично удаётся решить за счёт одновременной подачи на вход нейронной сети информации об отдельных пикселях, а не изображения ячейки целиком, как того требует свёрточная сеть. В экспериментах используется многослойный персептрон с шестью скрытыми слоями, где количество нейронов 400, 300, 200, 100, 50, 25 расположено соответственно в направлении от входа к выходу. Во всех скрытых слоях применяется функция активации ReLU. Входной слой содержит 18 нейронов, поскольку на вход нейронной сети подаются значения оттенков серого цвета целевого пикселя обрабатываемого изображения вместе со значениями оттенков серого цвета окружающих его восьми соседей, точно так же берутся значения оттенков серого цвета 9 пикселей со второго — повёрнутого на 180° при сканировании изображения. Выходной слой содержит 3 нейрона с функцией активации Sigmoid. Количество нейронов в выходном слое соответствует отображению одного пикселя в цветовой модели RGB в строгом соответствии с треугольником IPF.

Для обучения нейронной сети реализован алгоритм Adam, активно используемый на практике последние восемь лет. Известно, что данный алгоритм обучения зачастую не требует настройки, так как рекомендуемые его создателями значения параметров дают удовлетворительные результаты [24]. В рамках данной работы они также хорошо себя показали, поэтому были сохранены. Критерием оптимизации стала такая распространённая



Puc. 5. Результаты тестирования обученной нейронной сети на обучающих данных (каждая пара изображений включает в себя эталонное изображение и результат распознавания нейронной сети)



Рис. 6. Результаты обучения построенной нейронной сети на примере тестовой области: a — эталонное изображение; b — результат обученной нейронной сети; c, d — сканированные изображения тестовой области при повороте на 0 и 180°

функция потерь, как средняя квадратичная ошибка, а оценка точности осуществлялась с помощью метрики accuracy. Результаты обучения построенной нейронной сети показаны на рис. 5. С помощью алгоритма SiView были выбраны восемь ячеек, включающие в себя максимальное количество оттенков серого цвета и соответственно по данным анализа EBSD (карт IPF) максимальное разнообразие цветов треугольника IPF.

В качестве тестовой области была выбрана одна из ячеек, предложенных алгоритмом SiView. Результат обученной нейронной сети на тестовой области представлен на рис. 6. Как видно на изображении (рис. 6, b), лучше всего распознаются ориентации, близкие к (001), и их оттенки (красные, оранжевые, розовые цвета), что обусловливается характерным для этих ориентаций расположением фигур травления: перевёрнутые пирамиды почти перпендикулярны поверхности исследования. На сканированных изображениях зёрна с ориентациями, близкими к (001), имеют наиболее тёмные серые оттенки. Однако при сканировании с поворотом наблюдались изменения оттенков серого для некоторых зёрен, что также связано с расположением фигур травления относительно поверхности сканирования. Ориентации таких зёрен распознаются данной моделью не так точно, как ориентации, близкие к (001). На рис. 6, b видно, что фиолетово-синяя область, ориентация которой близка к (111) на эталонном изображении, идентифицируется как набор цветов (бирюзовый, розовый, жёлтый, зелёный). Возможно, точность идентификации можно по-

высить, используя большее количество обучающих данных, однако эта модель создавалась именно для малой выборки.

Заключение. Модель нейронной сети, идентифицирующая параметры ориентации зёрен мультикристаллического кремния, показала хороший результат — уровень точности определения 72 %. Для повышения точности данной модели можно использовать не два сканированных изображения (при повороте на 0 и 180°), а четыре (0, 90, 180 и 270°). Это может существенно повысить эффективность идентификации ориентаций, которые в силу особенностей расположения фигур травления на сканируемой поверхности имеют близкие отражательные характеристики. В этом случае два дополнительных поворота на 90 и 270° исключат ошибки при идентификации. Несмотря на отсутствие чувствительности модели к малоугловым отклонениям и существенную с точки зрения прецизионных измерений погрешность, она безусловно является крайне полезной и перспективной для решения задач материаловедения. Параметры ориентации, с одной стороны, напрямую взаимосвязаны с условиями кристаллизации мультикремния, а с другой — с его структурными и электрофизическими свойствами, ответственными за качество преобразования солнечной энергии в электрическую. Именно поэтому, опираясь на известные физические модели, связывающие параметры ориентации с распределением отражательной способности текстурированных пластин мультикремния, с определённой точностью можно предполагать качество отдельно взятой пластины и её вклад в КПД солнечной панели. Контролируя параметры ориентации на стадии направленной кристаллизации различными методами, с помощью данной модели можно быстро и эффективно производить их диагностику. В перспективе предполагается усовершенствовать и использовать эту модель для анализа и поиска взаимосвязи условий направленной кристаллизации со структурными параметрами слитков мультикремния (кристаллографическими и геометрическими), что обеспечит значительное повышение качества солнечных панелей на основе мультикремния.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания № 0284-2021-0004 «Материалы и технологии для разработки радиационных детекторов, люминофоров и оптических стёкол».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Rabaia M. K. H., Abdelkareem M. A., Sayed E. T. et al. Environmental impacts of solar energy systems: A review // Sci. Total Environ. 2021. 754. 141989.
- Altermatt P. P., Xiong Zh., He Q. X. et al. High-performance p-type multicrystalline silicon (mc-Si): Its characterization and projected performance in PERC solar cells // Solar Energy. 2018. 175. P. 68–74.
- 3. Sio H. C., Phang P. S., Fell A. et al. The electrical properties of high performance multicrystalline silicon and mono-like silicon: Material limitations and cell potential // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2019. 201. 110059.
- 4. Phimu K., Singh K. J., Dhar R. S. Design of PERC Cell using SiO 2, Si 3 N 4, and Al 2 O 3 with the Novel technique for enhanced absorption of silicon selective emitter for solar cell processing // Proc. of the IEEE Int. Conf. on Nanoelectronics, Nanophotonics, Nanomaterials, Nanobioscience & Nanotechnology (5NANO). Ettumanoor, India, 28–29 April, 2022. P. 1–7.
- Tong R., Zhang W., Ke X. et al. Influence of surface structure on the performance of mono-like Si PERC solar cell // Mater. Sci. in Semiconductor Process. 2021. 126. 105662. DOI: 10.1016/j.mssp.2021.105662.
- Sharma R. Investigation and Mitigation of Light and Elevated Temperature Induced Degradation in Multicrystalline Silicon Solar Cells: Ph.D Theses. Singapore: National University of Singapore, 2020.

- Kashyap S., Madan J., Pandey R., Ramanujam J. 22.8 % efficient ion implanted PERC solar cell with a roadmap to achieve 23.5 % efficiency: A process and device simulation study // Opt. Mater. 2022. 128. 112399.
- Sreejith K. P., Sharma A. K., Basu P. K., Kottantharayil A. Etching methods for texturing industrial multi-crystalline silicon wafers: A comprehensive review // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2022. 238. P. 111531. DOI: 10.1016/j.solmat.2021.111531.
- Wu C., Zou S., Zhu J. et al. Forming submicron in micron texture on the diamond-wiresawn mc-Si wafer by introducing artificial defects // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. 2020. 28, N 8. P. 788–797.
- Ullattil S., Kakkarath S., Viswambharanunnithan V., Ramannair S. P. Investigations on the influence of surface textures on optical reflectance of multi-crystalline silicone (MC-Si) crystal surfaces-simulations and experiments // Int. Journ. Renewable Energy Development. 2022. 11, N 2. DOI: 10.14710/ijred.2022.38538.
- Ding J., Shuai Z., Choi J., Cui J. A laser texturing study on multi-crystalline silicon solar cells // Solar Energy Materials and Solar Cells. 2020. 214, N 22. 110587.
- Jung Y., Bae S., Lee H. et al. Novel double acidic texturing process for saw-damage-free kerfless multicrystalline silicon wafers // IEEE Journ. Photovoltaics. 2020. 10, N 6. P. 1545–1551.
- Kafle B., Ridoy A., Saint-Cast P., Clochard L. High-efficiency diamond wire-sawn MC-Sibased perc solar cells textured by atmospheric pressure dry etching // Proc. of the 35th Europ. Photovoltaic Solar Energy Conf. and Exhibition EU PVSEC // Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems // Division Photovoltaics Heidenhofstrasse Freiburg Germany. Brussels, Belgium, Sept. 24-28, 2018. P. 839–842.
- Balamurugan N., Karuppasamy P., Ramasamy P. Investigation on different crystal grains from the multi-crystalline silicon (mc-Si) wafer // Silicon. 2022. P. 1–10. DOI: 10.1007/s12633-022-02091-x.
- 15. Zou S., Ye X., Wu C. et al. Complementary etching behavior of alkali, metal-catalyzed chemical, and post-etching of multicrystalline silicon wafers // Progress in Photovoltaics: Research and Applications. 2019. 27, N 6. P. 511–519.
- Wu J., Liu Y., Chen Q., Chen W. The orientation and optical properties of invertedpyramid-like structures on multi-crystalline silicon textured by Cu-assisted chemical etching // Solar Energy. 2018. 171. P. 675–680.
- 17. Ridoy A. I., Kafle B., Saint-Cast P., Lohmüller S. Emitter formation and passivation dependence on crystal grain orientations after atmospheric pressure dry nanotexturing // Proc. of the 35th European Photovoltaic Solar Energy Conference and Exhibition EU PVSEC// Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems// Division Photovoltaics Heidenhofstrasse Freiburg Germany. 2018.
- Lehmann T., Trempa M., Meissner E. et al. Laue scanner: A new method for determination of grain orientations and grain boundary types of multicrystalline silicon on a full wafer scale // Acta Materialia. 2014. 69. P. 1–8.
- Wang X., Gao S., Ekta J. et al. Measuring crystal orientation from etched surfaces via directional reflectance microscopy // Journ. Mater. Sci. 2020. 55, N 25. P. 11669–11678.
- Speidel A., Su R., Mitchell-Smith J., Dryburgh P. Crystallographic texture can be rapidly determined by electrochemical surface analytics // Acta Materialia. 2018. 159. P. 89–101.
- Wittwer M., Seita M. A machine learning approach to map crystal orientation by optical microscopy // npj Computational Materials. 2022. 8, N 1. P. 1–9.

- 22. Xiaogang W., Sibo Y., Seita M. Combining polarized light microscopy with machine learning to map crystallographic textures on cubic metals // Mater. Characterization. 2022. 190. 112082.
- Kudrov M., Bukharov K., Zakharov E. et al. Classification of wafer maps defect based on deep learning methods with small amount of data // Proc. of the Int. Conf. on Engineering and Telecommunication (EnT). Moscow, Russia, 20-21 Nov., 2019. P. 1–5.
- 24. Kingma D. P., Ba J. Adam: A method for stochastic optimization // arXiv preprint arXiv: 1412.6980. 2014.

Поступила в редакцию 23.09.2022 После доработки 20.10.2022 Принята к публикации 21.10.2022