

量子分子動力学法による Si 薄膜太陽電池の結晶成長シミュレーション

○桑原卓哉、尾澤伸樹、島崎智実、久保百司

東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 宮城県仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-703)

1. 緒言

薄膜 Si の成膜法としては、プラズマ化学気相成長 (PECVD) 法が幅広く用いられている。PECVD 法では、成長表面で反射、拡散、吸着、脱離などの複雑な化学反応を起こしながら Si の積層が起こる[1]。

そこで本研究では、Si 薄膜の成膜過程を明らかにするため、化学反応を考慮しながら電子・原子の挙動をシミュレーションできる量子分子動力学法を用いることにより、Si(001):H 表面での結晶成長の様子を電子・原子レベルで解析した。

2. 方法

シミュレーションには、Tight-Binding 近似に基づく量子分子動力学法プログラム colors を用いた。また、系の全エネルギーは下式で計算している。

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{k=1}^{occ} \epsilon_k + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N E_{rep}(R_{ij})$$

$$E_{rep}(R_{ij}) = b_{ij} \exp\left(\frac{a_{ij} - R_{ij}}{b_{ij}}\right)$$

m_i ; 原子の質量, v_i ; 原子の速度, e ; 電荷素量,

R_{ij} ; 原子核間距離, a_{ij}, b_{ij} ; パラメータ。

3. 結果及び検討

Si 薄膜の結晶成長プロセスを解析するために、Si(001):H の成膜シミュレーションを行った。Fig 1 では Si(001):H 表面に SiH₃ を入射させたときの、表面近傍での反応の様子を示す。

0.0 ps は初期状態である。0.2 ps において表面に達した 1 個目の SiH₃ は、終端 H を引き抜き、SiH₄ になって気相中へ蒸発した。そして、表面にはダングリングボンドができた。続いて、0.8 ps に 2 個目の SiH₃ が表面に達すると、1 個目と同様の反応が違うサイトで起こった。次に、3 個目の SiH₃ が表面近傍に近づく、0.2 ps で表面にできたダングリングボンドの方向に引き込まれるように移動していき吸着した。その後、SiH₃ と表面での化学反応が繰り返され Si が積層した。

Fig 2. では、結合の生成・解離の様子を Atomic bond population の時間変化のグラフを用いて示す。Fig 2. から、0.2 ps 付近で表面 Si と水素の結合が切れ、SiH₃ の Si と H の結合が生成し、SiH₄ が生成されたことが分かる。また、1.5 ps 付近で表

面 Si と 3 個目の SiH₃ の間に結合が生成され、表面に SiH₃ が吸着したことが分かる。

以上より、Si が積層していき水素を含む Si 膜が成長する過程を再現し、表面にできたダングリングボンドが結晶成長において重要であることが分かった。詳細については当日発表する予定である。

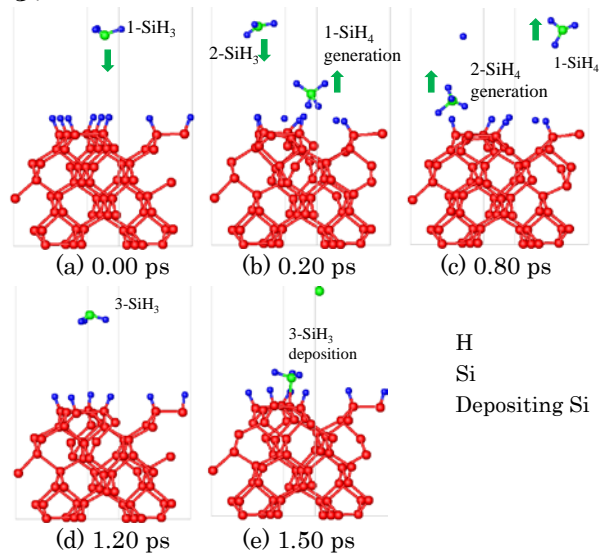


Fig.1 Snapshot of chemical reaction on Si(001):H

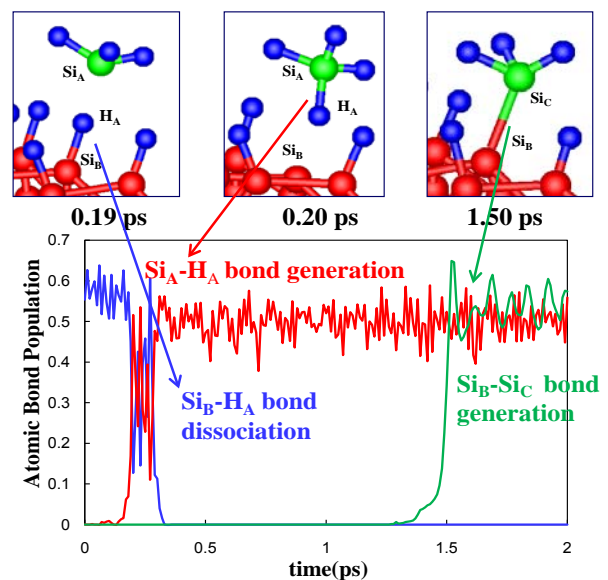


Fig 2. Time evolution of atomic bond population

4. 文献

1) A. Matsuda, Jpn. J. Appl. Phys., 43, 7909 (2004).