

**量子分子動力学シミュレーションによる
薄膜シリコン太陽電池の結晶成長機構に関する研究**
**Crystal Growth Mechanism Study for Thin-Film Silicon Solar Cells
by Quantum Chemical Molecular Dynamics Simulations**

東北大院工, °桑原 卓哉, 伊藤 寿, 樋口 祐次, 尾澤 伸樹, 久保 百司

Tohoku Univ., °Takuya Kuwahara, Hiroshi Ito, Yuji Higuchi, Nobuki Ozawa, Momoji Kubo

E-mail: takuya.kuwahara@rift.mech.tohoku.ac.jp

薄膜 Si 太陽電池の成膜法としては, プラズマ CVD 法が広く用いられる. プラズマ CVD 法を用いた薄膜 Si の成膜では, 原子レベルで平坦な表面が形成可能である. しかし, 表面の平坦化がどのような表面反応及び成長機構によって実現されているかについては, プロセスの複雑さ故に現在まで解明されていない. そこで, 本研究では, 薄膜 Si の CVD プロセスにおける layer-by-layer 成長機構の解明を目的として, Tight-Binding 量子分子動力学[1]シミュレーションを行った.

本研究では, Si(001):H 基板に 2 ps の間隔で 80 個の SiH_3 ラジカルを照射する CVD シミュレーションを行った. シミュレーションにより, SiH_3 は水素被覆サイトにおいて水素引き抜き反応を起こすことで表面にダングリングボンド(DB)を生成し, その後 DB サイトに異なる SiH_3 ラジカルが到達すると化学吸着することが分かった. さらに, 表面吸着した Si-H_3 サイトにおいて水素の拡散が観察された. Fig. 1 に, 表面吸着した Si-H_3 サイトにおける拡散に関するスナップショットを示す. まず, 表面吸着した Si-H_3 サイトにおいて, 次に表面に到達した SiH_3 ラジカルによる水素引き抜き反応が起こると, DB が生成する(Fig. 1a). この反応により, DB を有する Si-H_2 サイトが生成する. 次に, 1 原子層分下の隣接する Si-H サイトから Si-H_2 サイトに水素が引き抜かれる(Fig. 1b). この反応により, Si-H_3 サイトが還元さ

れ,代わりに DB を有する Si サイトが生成した. その後,水素の拡散により生成した Si サイトに,次に表面に到達した SiH_3 ラジカルが吸着した(Fig. 1c, d). Fig. 2 に,上記の結果より明らかになった layer-by-layer 成長機構を示す. Fig. 2a の構造に比べ, Fig. 2b の構造が安定であるため水素が上の層に拡散する. この水素の拡散により,上の層に生成した DB が下の層に移動するため,次に表面に到達した SiH_3 ラジカルは下の層に吸着する(Fig. 2c).このメカニズムにより, layer-by-layer 成長が起こることが明らかになった.

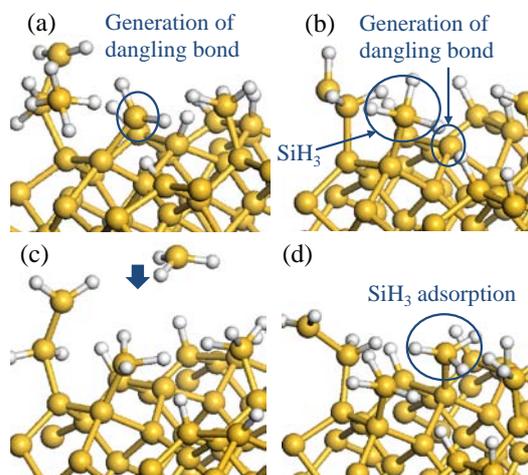


Fig. 1 Snapshots of (a), (b) diffusion of H atom and (c), (d) adsorption of a SiH_3 radical during silicon CVD growth.

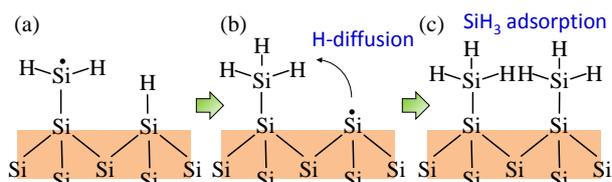


Fig. 2 Surface smoothing mechanism during silicon CVD growth.

【参考文献】 [1] T. Kuwahara *et al.*, *J. Phys. Chem. C* **116**, 12525 (2012).