

Self-consistent-charge density-functional tight-binding 法 を用いたアモルファス SiC の CVD 成長機構の検討

Study of CVD Growth Mechanism of Amorphous SiC using

Self-Consistent-Charge Density-Functional Tight-Binding Method

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

ワイドバンドギャップ半導体であるアモルファスシリコンカーバイド(a-SiC)は, 高い光吸収係数を持つことから薄膜太陽電池の窓層材料として期待されている. ここで, a-SiC の光学特性は, C 原子の含有率及び結合形態によって大きく変わる[1]. そこで, 高品質化に向けて, CVD プロセスにおける原子レベルの構造制御が重要である. しかし, Si 原子は sp^3 配位のみであるのに対し, C 原子は sp^2 配位炭素(sp^2 -C)と sp^3 配位炭素(sp^3 -C)の両方が存在することから, a-SiC[2]に比べ a-SiC の成長機構は複雑である. そのため, a-SiC の成長機構は明らかにされていない. そこで, a-SiC の CVD 成長機構を解明することを目的として, self-consistent-charge density-functional tight-binding 法[3]を用いた CVD シミュレーションを行った.

CVD シミュレーションを行うために, SiH_3 及び CH_3 ラジカルを一定割合で Si(001)基板に 2.0 ps の間隔で照射した. Fig. 1 に $CH_3/(CH_3+SiH_3) = 0.19$ 及び 0.85 における 80 ラジカル照射後のスナップショットを示す. CH_3 濃度が 0.19 のとき, C 原子より Si 原子が多く表面に吸着した(Fig. 1a). このとき, C 原子は周囲に多く存在する Si 原子と結合するため, Si-C 結合が多く形成した. 一方, CH_3 濃度が 0.85 のとき, 吸着 Si 原子数に対する吸着 C 原子の割合が増えた(Fig. 1b). すると, その周囲には Si 原子が不足し, 代わりに C 原子が存在するようになるため, C-C 結合が多く形成された. 次に, Fig. 2 に CH_3 濃度と吸着 C 原子の sp^3 -C 原子数に対する sp^2 -C 原子の割合の相関を示す. Fig. 2 より, CH_3 濃度が 0.5 までの領域では, sp^2 -C がほぼ生成していないことがわかる. しかし, CH_3 濃度が 0.5 を超えると, sp^2 -C の割合が急激に増加している. ここで, CH_3 濃度が 0.5 のとき, C 原子の含有率は約 50%であった. 以上より, C 原子の増加自体が問題ではなく, 局所的に Si 原子が枯渇した領域において sp^2 -C の生成が促進されるために, Si の枯渇が起こりやすい高 CH_3 濃度下において sp^2 -C の割合が急激に増加すると考えられる. 結果の詳細は当日発表する.

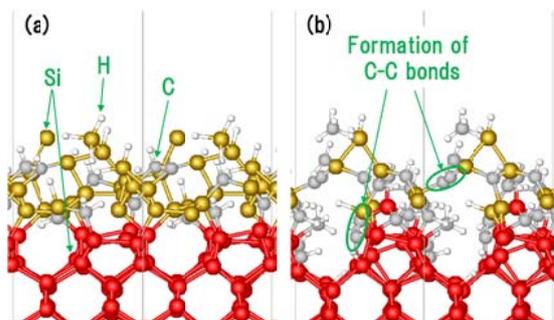


Fig. 1 Snapshots of a-SiC growth simulations with $CH_3/(CH_3+SiH_3)$ ratios of (a) 0.19 and (b) 0.85.

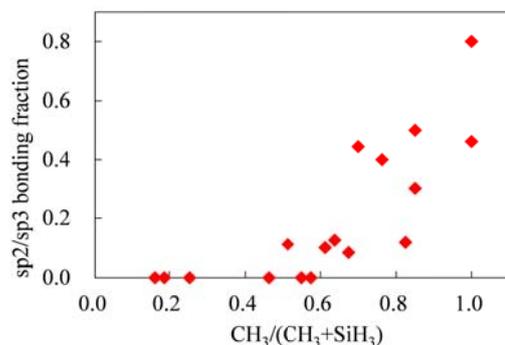


Fig. 2 sp^2/sp^3 bonding fraction in a-SiC.

【参考文献】 [1] S. W. Rynders *et al.*, J. Appl. Phys. **69**, 2951 (1991). [2] T. Kuwahara *et al.*, J. Phys. Chem. C **117**, (2013) 15602. [3] M. Elstner *et al.*, Phys. Rev. B **58**, (1998) 7260.