

Si (001) 薄膜表面近傍における C と Sn の形成エネルギー計算と 熱平衡濃度の算出

First principles calculation of formation energy of C and Sn atoms, and evaluation of their thermal equilibrium concentrations in Si (001) thin film

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² ○(M1)只野 快¹, 末岡 浩治²
Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²
○Kai Tadano¹ and Koji Sueoka²
E-mail: dtn0067@yahoo.co.jp

現在, IV 族混晶系多接合型太陽電池において, Si, Ge 中に C や Sn を導入することで, それらのバンドギャップを制御する可能性が検討されている[1-3]. 本研究では, SiSnC 系薄膜の表面近傍の原子配置について形成エネルギーを計算し, 表面から深さ方向における C や Sn の熱平衡濃度を算出することを目的とした.

Si 単結晶から(001)表面を切り出して, 64 原子からなる Si (001)薄膜モデルを作成した. このモデルの置換位置に C または Sn 原子を導入し, 第一原理計算法により構造最適化することで全エネルギーを求め, 形成エネルギーを算出した. モデルには 3 次元周期境界条件を課した.

この薄膜モデルの各層に, C 原子を 1 個導入する際の形成エネルギーを図 1 に示す. 横軸は C 原子が存在する層を示し, 表面ダイマーの形成に起因して 2 つの異なる C 原子の配置を Site a, Site b で示してある. また, Si バルク中の C 原子 1 個の形成エネルギーを Bulk で示している. これより C 原子の最安定位置は 1 層目の Site a であり, Si バルク中の値より約 0.8 eV 低いことがわかる. また, 5 層目より内部に組み込まれた C 原子の形成エネルギーは Si バルク中の値と近づいており, 表面の影響をほとんど受けていないことが分かる.

C と Sn を同時添加することを考え, 薄膜中にすでに 1 個の Sn 原子が存在する場合の, 最表面の C 原子の形成エネルギーを図 2 に示す. 横軸は Sn 原子が存在する層を示しており, その Sn 原子が Site a, Site b, Site c, Site d に存在するときの, 最表面に新たに到達した C 原子の形成エネルギーを, 図 1 の Site a の形成エネルギーとの差で示している. これより, 表面から 5 層目以下に存在する Sn 原子は, 最表面に到達した C 原子の形成エネルギーに影響を与えないことがわかる. また Sn 原子が 1~4 層目に存在する場合, その配置に応じて, 最表面に到達した C 原子の形成エネルギーは異なる影響を受けることもわかる. C あるいは Sn 原子の単独導入についても同様の結果が得られた.

本研究では, さらに表面から各層における独立な原子配置数を求め, それと形成エネルギーの計算結果から, Si(001)薄膜表面近傍の各層における C, Sn の熱平衡濃度も算出した. 当日はこの結果についても議論する.

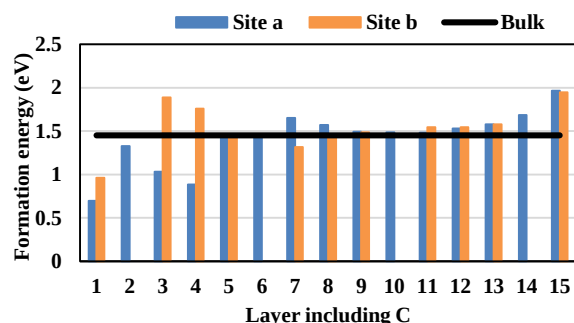


図 1 C1 個の形成エネルギー

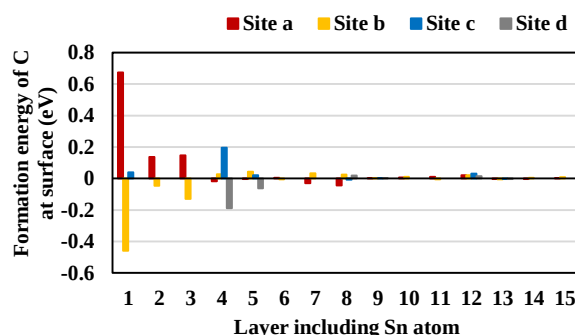


図 2 Sn 影響下の表面 C の形成エネルギー

参考文献

1. O. Nakatsuka *et al.*, *ECS Trans.* **58**, 149 (2013).
2. R. Matsutani *et al.*, *Physica Status Solidi C* **11**, 1718 (2014).
3. R. Suwa *et al.*, *Physica Status Solidi B* **251**, 2221 (2014).