

SiSnC, GeSnC 薄膜の表面近傍における C と Sn 原子の 形成エネルギーと熱平衡濃度の算出 Calculation of formation energy and thermal equilibrium concentration of C and Sn atoms in SiSnC, GeSnC 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 系薄膜および GeSnC 系薄膜の表面近傍における C と Sn 原子の形成エネルギーを計算し, その結果を用いて表面から深さ方向における C や Sn 原子の熱平衡濃度を算出することを目的とした.

Si や Ge 単結晶から(001)表面を切り出して, 64 原子からなる薄膜モデルをそれぞれ作成した. 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.

Si (001) 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異なる C 原子の配置を Site-a₁, Site-a₂, 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太実線 (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-a₁ 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 層目より内部に取り込まれた 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.

次に図 1 の結果を用いて, Si 薄膜中の各層における C 原子 1 個の熱平衡濃度を算出した. その結果を図 2 に示す. ここでは, 代表的な成膜温度である 723K (450°C)における C 原子 1 個の熱平衡濃度とバルク中の C 原子 1 個の熱平衡濃度の比を示している. これより C 原子の熱平衡濃度は最表面で最も高くなり, Si バルク中の約 10⁵ 倍の熱平衡濃度であることがわかる. また 5 層目より内部に取り込まれた C 原子の熱平衡濃度はバルク中の値と近くなり, 表面の影響をほとんど受けていないことがわかる.

本研究では, さらに Si (001) 表面近傍における C と Sn の同時導入および, Ge (001) 表面近傍における C や Sn の導入について, 表面から各層における独立な原子配置数を求め, それらの形成エネルギーと熱平衡濃度を算出した. 当日はこれらの結果についても議論する.

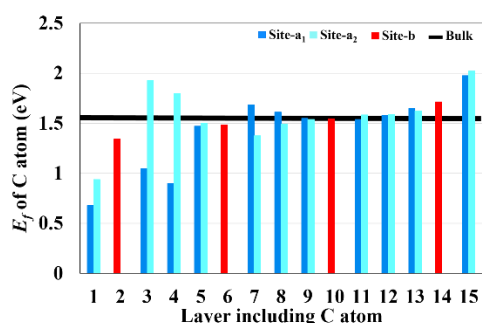


図 1 Si 薄膜中の C1 個の形成エネルギー

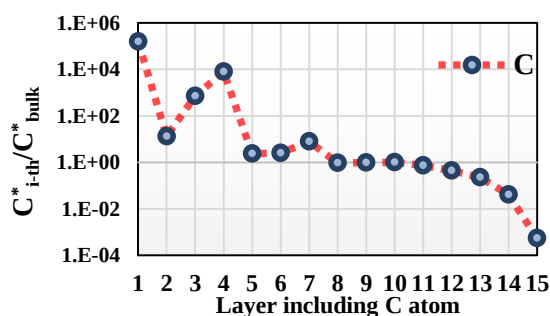


図 2 Si 薄膜中の C1 個の熱平衡濃度

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).