

シリコン粒界における不純物の偏析駆動力の第一原理解析

A first-principles study on driving force for grain boundary segregation of impurities in silicon

名大工¹横井達矢¹, 野田祐輔¹, 中村篤智¹, 松永克志¹¹Department of Materials Physics, Nagoya Univ.Tatsuya Yokoi¹, Yusuke Noda¹, Atsutomo Nakamura¹, Katsuyuki Matsunaga¹

E-mail: yokoi@mp.pse.nagoya-u.ac.jp

【緒言】多結晶シリコン (Si) 型太陽電池モジュールは量産性が高く製造が安価であるが、単結晶 Si 型モジュールに比べて変換効率は劣る。その一因は、結晶粒界に偏析した不純物や析出物によるキャリア再結合中心の形成と考えられている。よって多結晶 Si で高変換効率を実現するため、偏析駆動力の特定そして不純物偏析の制御が求められている。先行研究より、偏析量は粒界性格さらには粒界構造に依存し、また同じ粒界であっても不純物種で偏析量が異なることが示唆されている。しかし、粒界構造や不純物種に依存して偏析量が異なる原因、そして偏析駆動力を決定づける因子については未だ不明な点が多い。よって本研究では偏析駆動力の理解に向けて、第一原理計算により種々の不純物における偏析エネルギー (ΔE^{seg}) を評価し、偏析量を決定づける因子について解析した。不純物として置換型炭素および侵入型遷移金属 (Fe, Cu, Ni) を対象とした。

【方法】計算には VASP コード[1]を用いた。交換相関汎関数は GGA-PBEsol [2]を用いて、エネルギーカットオフは 500 eV とした。k 点メッシュはユニットセルにおいて $6 \times 6 \times 6$ に設定した。まず純粋粒界の原子構造を得るため、剛体変位の程度が異なる複数の初期モデルを作製し、エネルギー的に安定な粒界構造を決定した。そのモデルに上述の不純物原子を導入し、粒界面からの距離と ΔE^{seg} との関係の評価した。そして純粋粒界および不純物導入後の原子配置を基に、 ΔE^{seg} と Si どちらの結合長の変化や不純物原子の変位、電子状態との関係を解析した。

【結果】図 1 に $\Sigma 5(310)$ における ΔE^{seg} を示す。本結果より、不純物種によって ΔE^{seg} は異なる傾向を示すことが明らかとなった。置換型炭素では粒界から 8 Å 程度離れた位置でも ΔE^{seg} はゼロにはならないが、侵入型 Fe では粒界から 5 Å 程度離れると ΔE^{seg} はほぼゼロであることが分かる。結合長変化の解析より、置換型 C の周囲の Si は、侵入型 Fe が存在する場合に比べて、より大きく変位することが示唆された。このような不純物種に依存した結合長変化の違いが、 ΔE^{seg} に影響すると考えられる。当日は、他の粒界および不純物の結果も含めて議論を行う。

【謝辞】本研究の一部は JST-CREST(グラント番号 JPMJCR17J1)の支援により行った。

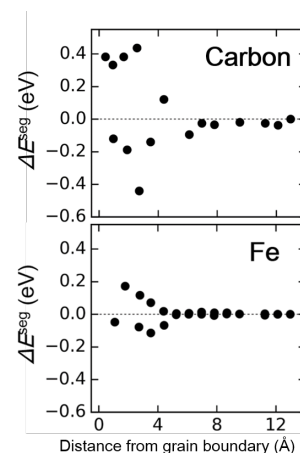


図 1 $\Sigma 5(310)/[001]$ における炭素および Fe の偏析エネルギー

[1] G. Kresse, J. Hafner, Phys. Rev. B, 49 (1994) 14251. [2] J. P. Perdew et al., Phys. Rev. Lett., 100 (2008) 136406.