有限差分シミュレーションを用いた粒界傾斜のキャリア分布への影響評価

Evaluation of influence of inclination angle of grain boundaries on carrier distribution using finite difference simulation

°(M2)三田村　和樹 [1], 沓掛　健太朗 [2], 小島　拓人 [3], 宇佐美　徳隆 [1]
(1.名大院工, 2.理研 AIP, 3 名大院情報)
°Kazuki Mitamura[1], Kentaro Kutsukake[2], Takuto Kojima[3], Noritaka Usami[1]
([1]Grad. Sch. Eng., Nagoya Univ., [2]RIKEN AIP, [3]Grad. Sch. Inf., Nagoya Univ.)
E-mail: mitamura.kazuki@k.mbox.nagoya-u.ac.jp

【緒言】多結晶 Si 基板中の粒界でのキャリア再結合は、太陽電池高効率化への障壁の一つである。粒界の悪影響を低減する手法の開発のためには、粒界の電気的特性の正確な測定が重要である。フォトルミネッセンス（PL）イメージングは有力な電気的特性評価法であるが、先行研究では粒界がウェーハ表面に対して垂直であると仮定され、再結合速度（v_{GB}）が計算されてきた[1]。しかし、一般的な多結晶 Si 中の粒界は、Si ウェーハ表面に対して様々な傾斜角度を持つ。そこで我々は、PL イメージング時のキャリアの挙動を考慮した有限差分キャリアシミュレーションを用いて、傾斜角度がキャリア分布、及び PL プロファイルに与える影響を調査した。

【研究方法】有限差分キャリアシミュレーションでは、PL イメージング時の粒界周囲のキャリアの状態を考慮し、拡散方程式と境界条件を設定し、それらを差分化することで定常状態での過剰少数キャリア密度を計算した。そしてウェーハの深さ方向に過剰少数キャリアを積分することで PL プロファイルを求めた。Fig.1 は、側面方向から見たシリコンウェーハの模式図を示している。図中の θ を傾斜角度とした。

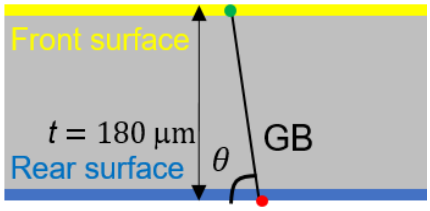

Fig.1 Schematic diagram of silicon wafer viewed side wise.

【結果と考察】v_{GB}を(a) 1.0×10^{3}cm/s, (b) 1.0×10^{5}cm/s 、拡散長を 300 μm、傾斜角度を 90°、70°、50°と設定して、シミュレーションを行った。シミュレーション結果から得られた標準化後の PL プロファイルを Fig.2 に示す。緑線、赤線、赤の破線は、表面の粒界位置、70°と 50°での裏面の粒界位置をそれぞれ示している。(90°の場合表面、裏面の粒界は同じ位置となる。) これらのプロファイルについて極小値とくぼみ幅の観点から考察する。Fig. 2(a)で、v_{GB}が1.0×10^{3}cm/sの場合、傾斜角度 θ の減少に伴い、PL 強度の極小値が減少する。これは粒界の傾斜角度の減少により、ウェーハ中に占める粒界の面積が増加するため、再結合の総量が増加し、過剰少数キャリア密度が減少したためであると考えられる。一方 Fig. 2(b)で、v_{GB}が1.0×10^{5}cm/s の場合、傾斜角度 θ の減少による PL 強度の極小値の変化量は小さく、やや増加する傾向にある。これは、v_{GB}の増加により極小位置での局所的な再結合の効果が大きくなったためであると考えられる。また Fig. 2(a)と(b)で、傾斜角度が 90°から 50°と小さくなるにつれてプロファイルのくぼみが丸みを帯びて幅が広がる。この原因は、傾斜角度が小さくなると、ウェーハ表面への粒界の投影面積が大きくなるためだと考えられる。以上 2 点から、v_{GB}をより正確に求めるには、粒界の傾斜角度を考慮することが必要であるといえる。

【謝辞】本研究は、JST CREST (JP MJCR17J1)と科研費(16H03856)の支援を受けたものです。

【参考文献】[1] H. C. Sio *et al.*, *J. Appl. Phys.* **116**, 244905(2014)

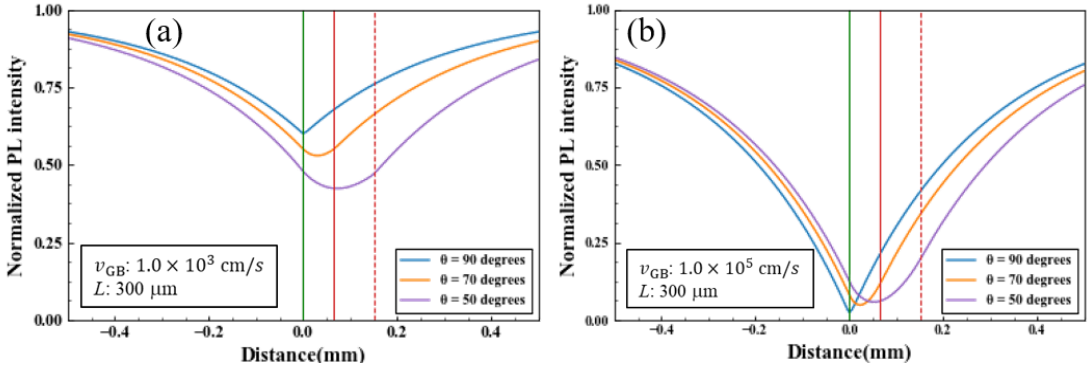

Fig. 2 Simulated PL profiles with v_{GB} of (a) 1.0×10^{3}cm/s (b) 1.0×10^{5}cm/s.