



Title	First principles study on the bonding states and diffusion of CN molecule in crystalline silicon
Author(s)	光田, 直樹
Citation	大阪大学, 2006, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/47313
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏 名	みつ だ なお き 光 田 直 樹
博士の専攻分野の名称	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	第 2 0 6 2 6 号
学 位 授 与 年 月 日	平成 18 年 7 月 20 日
学 位 授 与 の 要 件	学位規則第 4 条第 1 項該当 基礎工学研究科物理系専攻
学 位 論 文 名	First principles study on the bonding states and diffusion of CN molecule in crystalline silicon (結晶シリコンにおける CN 分子の結合状態と拡散についての第一原理的研究)
論 文 審 査 委 員	(主査) 教 授 吉 田 博 (副査) 教 授 鈴 木 義 茂 教 授 冨 田 博 一 助教授 森 川 良 忠

論 文 内 容 の 要 旨

現在、我々の社会が抱えるエネルギー・環境問題の解決には、環境負荷のないクリーンエネルギーが必要不可欠である。太陽光発電は、太陽光のエネルギーを直接、電気エネルギーに変換可能で大きな期待が寄せられており、さらなる普及には高効率・低コスト化が必要である。

低コストで作製可能な水素化アモルファス Si (a-Si : H)・微結晶 Si (μ c-Si) 太陽電池、そしてこれらを組み合わせたタンデム型太陽電池に期待が寄せられている。しかし、a-Si : H 太陽電池は光劣化現象を、 μ c-Si 太陽電池は結晶粒界における電気特注の低下の問題を抱えており、解決が必須である。

解決策として KCN 溶液を用いた半導体洗浄技術であるシアン処理が提案されている。CN 分子は、結合力が強く、光照射・高温処理に対して高い耐性を持つ。処理方法は溶液に浸し（バイアスを印加することで）CN 分子を試料中に侵入させるものである。これにより光劣化現象抑制、界面欠陥の終端が可能で電気特性向上効果があると報告されている。しかし、十分な再現性は得られず、微視的な仕組みも不明である。

本研究の目的は、CN 分子の拡散・欠陥終端の仕組みを理論的に解明し、より効率的に欠陥を終端する方法の設計指針を与えることである。

研究の結果、CN 分子の拡散経路は、六員環の中心から四面体中心という経路でなく、Si-Si 結合間を Si-C-Si、(Si-N-Si) 結合状態を形成しながら拡散することを突き止めた。結晶内でのポテンシャル障壁は低く、その障壁の高さはフェルミ準位に依存し、結晶内部と表面からの侵入では依存傾向が逆となることが判明した。シアン処理により、膜内に CN 分子を効率よく侵入させるためには、この依存傾向を利用してバイアスを印加することが有効であると考えられる。また、CN 分子は結晶内において選択的に欠陥を終端することが可能であり、結晶内部で CN 分子が欠陥を終端すると複数の Si 原子と結合しネットワークを形成することで安定な構造となることが判明した。

論文審査の結果の要旨

現在、我々の社会が抱えるエネルギー・環境問題の解決には、環境負荷のないクリーンエネルギーが必要不可欠である。太陽光発電は、太陽光のエネルギーを直接、電気エネルギーに変換可能で大きな期待が寄せられており、さらなる普及には高効率・低コスト化が必要である。低コストで作製可能な水素化アモルファス Si (a-Si:H)・微結晶 Si (μ c-Si) 太陽電池、そしてこれらを組み合わせたタンデム型太陽電池に期待が寄せられている。しかし、a-Si:H 太陽電池には光劣化現象が存在し、 μ c-Si 太陽電池は結晶粒界における電気特性の低下の問題を抱えており、これらの解決が高効率で安定な太陽電池の実現のためには必須である。これらの解決策として、KCN 溶液を用いた半導体洗浄技術であるシアン処理が提案されている。CN 分子は、結合力が強く、光照射・高温処理に対して高い耐性を持つ。処理方法は溶液に浸し（バイアスを印加することで）CN 分子を試料中に侵入させるものである。これにより光劣化現象抑制、界面欠陥の終端が可能で電気特性向上効果があると報告されている。しかし、十分な再現性は得られず、微視的な仕組みも不明であった。本研究では、物質の原子レベルやナノスケールレベルでの微視的世界における基本法則である量子力学（第一原理）に基づいた計算により、CN 分子の特異な拡散機構を解明した。さらには、CN 分子による欠陥（ダングリングボンド）終端の仕組みを理論的に解明し、より効率的に欠陥を終端する方法の設計指針を与えている。第一原理計算に基づいて解析した結果、CN 分子の拡散経路は、六員環の中心から四面体中心という経路でなく、Si-Si 結合間を Si-C-Si、(Si-N-Si) 結合状態を形成しながら、CN が対を作って交互に相手のまわりに回転し、常に Si との結合を維持しながら拡散障壁を低くし、その中を拡散する独創的な拡散機構を明らかにした。また、その時の結晶内での拡散のポテンシャル障壁は 0.6 eV-1 eV と低く、その障壁の高さはフェルミ準位に大きく依存することを発見している。さらには、CN 分子は結晶内において選択的に欠陥を終端することが可能であり、結晶内部で CN 分子が欠陥を終端すると複数の Si 原子と結合しネットワークを形成することで安定な構造となることを明らかにしている。本研究は、太陽電池材料の欠陥低減のためのシアン処理の微視的機構や拡散機構を解明し、これらに基づいて効率的なシアン化のための設計指針を提供している。以上の理由により、本論文は博士（理学）の学位論文として価値のあるものと認める。