

# ドレスト光子による表面形状の統計的特性

## 1. 研究内容

香取研究室 高橋 幹

ドレスト光子(以下DP)の応用例として、光起電力デバイスの加工がある。基盤に電圧をかけつつ一定の波長の光を照射させると、DPの作用により基板上Ag薄膜の突起部が正に帯電する。吹き付けられるAg+はその部分から反発を受けるため、突起部を避けて別の場所に堆積する。

以上より、DPの影響から表面形状は独特なものとなる。この自律的加工によって作成されたデバイスは、加工時に使用したものと同波長の光を照射したときに最も効率良く電子・正孔対を発生させる波長選択性を持つと期待される。この特性は材料に依存しないため、既存材料を使用したまま、より精度の高い光検出器や光電変換効率の高い太陽電池を作成できる。

この表面形状の形成過程をモデル化し、法則性を調べるのが研究内容である。

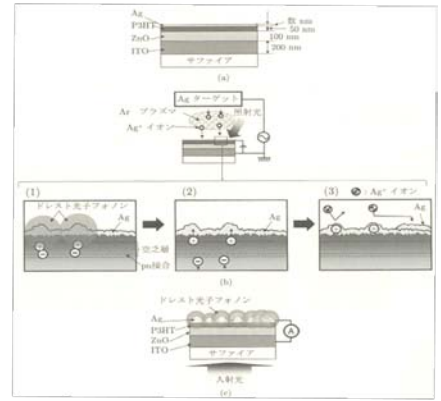


図1. 光起電力デバイスの自律的な加工法

## 2. 堆積のモデル化

堆積のメカニズムを簡易化し、以下のルールに従うモデルを考える。

- 領域を  $N \times N$  のセルから成る正方形構造とする。
- 微粒子をランダムに落下させた  $P$  番目のセル  $(p_x, p_y)$  について、既に堆積しているならば  $P(p_x, p_y) = 1$ , まだ堆積していなければ  $P(p_x, p_y) = 0$
- 局所部による反発の影響として、疑似足紋  $Q_p$  を以下のように定義する。  

$$Q_p = \sum_{i \in \{-1,0,1\}, j \in \{-1,0,1\}} S_p(i, j) \cdots S_p(i, j) = \text{「} P(p_x, p_y) \text{ に存在するクラスターのサイズ」}$$
(ただし、 $i=j=0$  の場合を除く)
- 閾値  $Z$  について、ランダムに決定した微粒子の落下地点  $P$  において、  
 $Q_p > Z$  のとき、 $P(p_x, p_y) = 0$  だとしても堆積されない。  
 $Q_p \leq Z$  のとき、 $P(p_x, p_y) = 0$  ならば堆積する。
- 落下地点  $P$  について  $P(p_x, p_y) = 1$ , または  $Q_p > Z$  のとき、粒子はランダムに上下左右のいずれかのセルに移動し、再び堆積するか判定する。
- 以上のランダムな微粒子の落下を反復回数  $T$  だけ行う。

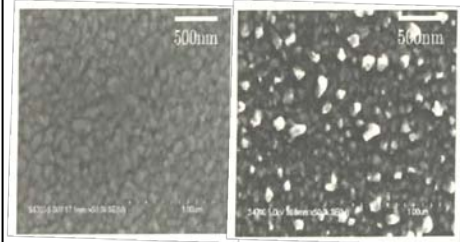


図2. 作成された薄膜表面の走査型電子顕微鏡像

(a). 光照射・電圧を加えない場合 (b). 光照射・電圧を加えた場合

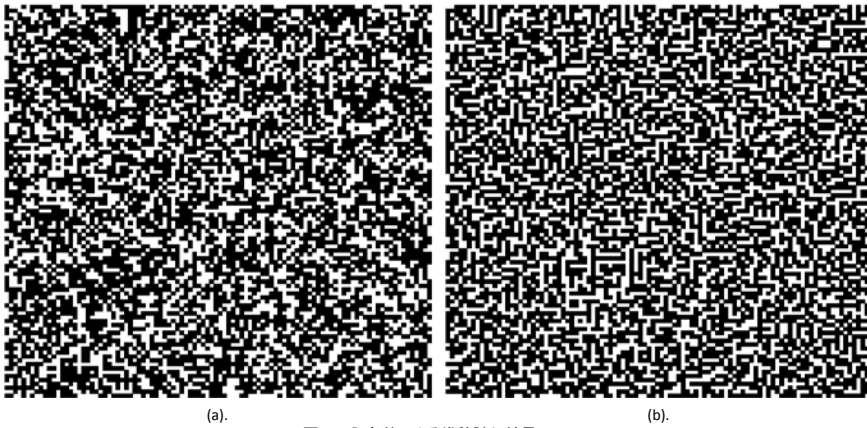


図3. 下記条件による堆積試行結果

(a). ランダムな堆積結果(ランダム堆積) (b). モデルによる堆積結果(モデル堆積)

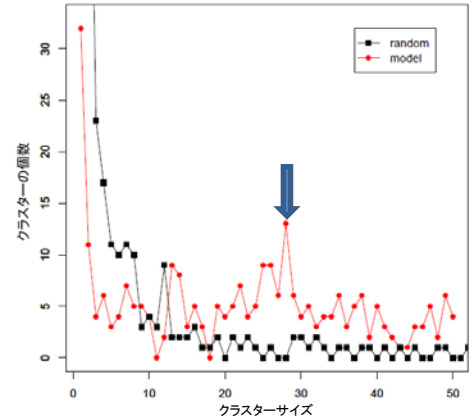


図4. 各堆積結果ごとのクラスター分布

黒: ランダム堆積 赤: モデル堆積

## 3. 結果と考察

領域  $100 \times 100$ 、閾値  $Z=50$ 、反復回数  $T=20,000$  で上述のモデルを動かした結果、表面形状は図3(b). となった。ただし、堆積しているセルを黒、堆積していないセルを白とする。領域の堆積密度は  $5,577/10,000$  であった。

比較として、同じ堆積密度で反発を考慮せずランダムに堆積させた場合の表面形状を図3(a). として載せる。それぞれについてクラスターサイズごとの個数をグラフにしたものが図4. である。モデル堆積での最大値を上限として縦・横軸を取った。

モデル堆積においてグラフ中央付近に顕著な極大値が2つある。そのうち右側のサイズ=28のもの(矢印)はモデル堆積にしか見られず、ランダム堆積では顕れていない。これがDPによる特徴的な形状、すなわち図2(b). において見られる大きなクラスターに対応していると考えられる。

## 4. 今後の課題

図2(b). の実際の表面形状においてのクラスターは主に円形・楕円形をとっている。しかし図3(b). の結果を見ると線状やU字状、あるいはより複雑な形状のクラスターが多く、まだ実物を忠実に再現するには程遠い。これはモデルの設定を簡略化しすぎたためであり、ここからより現実に近い条件を加えていく必要がある。

例えば、モデルでは疑似足紋  $Q_p$  を周囲8セルについて同じ重みで計算したが、この反発は正電荷同士のクーロン反発であり、そのポテンシャルは距離に反比例する。そこで、セル間の距離を  $r$  としたとき、 $S_p(i, j)$  に  $1/r$  を掛けると良いだろう。また、その計算を直近のセルだけでなくある程度離れたセルの分まで加えるのも改善点となるだろう。他にも、今のモデルでは堆積の有無しか考えていないので、既存有クラスターでも条件によって堆積させる「積み上がり」も考慮したい。

また、表面形状だけでなく、個数が極大となるクラスターサイズがどのように決まるのか、反発によりこれ以上どこにも堆積できない状態(定常状態)に至るまでの反復回数  $T$  や堆積密度の  $Z$  依存性など、いまだ課題は多い。