

太陽電池用 Ge 結晶における IV 族添加元素の安定性に関する第一原理解析 (2) First principles analysis on stability of IV element dopant in Ge crystal for solar cells (2)

岡山県立大院情報工¹, グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社²

○松谷 亮¹, 末岡 浩治¹, 神山 栄治^{1,2}

Graduate School of Okayama Pref. Univ.¹, GlobalWafers Japan Co., Ltd.²

○Ryo Matsutani¹, Koji Sueoka¹, Eiji Kamiyama^{1,2}

E-mail: straight_up_1216@yahoo.co.jp

【研究背景】本研究では、環境負荷が低いC, Si, Ge, SnからなるIV族元素混晶系による多接合型太陽電池に注目している。この系のバンドギャップを制御するためには、組成に応じて実現する原子配置を計算予測する手法の開発が有益である。そこで前回[1], Ge母相中に添加したC, Si, Sn原子が結合長などに与える影響を明らかにした上で、2種類の添加元素の安定な原子配置を理論計算により求めた。その結果、最近接原子配置の安定性は元素の組み合わせで決まり、最近接配置より離れると局所歪みを相殺するように原子配置が決まることを見出した。今回は、Ge母相中における同種元素間の安定な原子配置を計算により求めた。さらに、前回の結果と合わせて、安定原子配置が決まるメカニズムを考察した。

【計算方法】Ge原子64個からなる立方体の計算セルに、同種のIV族元素 (C, Si, Sn) 2個を導入したモデルを用意した。これらのモデルを構造最適化し、形成エネルギーを第一原理計算により求めた。使用したソフトウェアはCASTEPである。

【結果と考察】Ge64原子モデルにおいて中心原子を基準0とし、モデル内の全原子を基準からの距離で分類してつけた番号を図1に示す。これより、64原子モデル内には第9近接原子までが含まれることがわかる。中心Ge原子を添加原子に置換すると、添加原子がGe原子より小さければジグザグ結合（黒色結合）上のGe原子を内側に引っ張り、大きければジグザグ結合上のGe原子を外側に圧縮する。また、それ以外の結合はジグザグ結合をつなぐ役割をするため、ジグザグ結合と逆の歪みが生じる[1]。図2にGe64原子モデルにSn原子を2個導入するのに要する形成エネルギーの計算結果を示す。図中の太実線は、この2原子がGe結晶中で無限に離れている場合の、各原子の形成エネルギーの和である。これより、Ge結晶中において、Sn原子2個はジグザグ結合以外(図1および図2中のNo.3, 4, 6, 7, 9)が安定であることがわかる。また、C原子2個を導入した場合も同様にジグザグ結合以外の位置で安定となった。これらに対し、Si原子2個の場合には、最近接位置(図1および図2中のNo.1)が最安定であった。これらの計算結果は、最近接の安定性は元素の組み合わせで決まり、最近接配置より離れると局所歪みを相殺するように原子配置が決まることを示している。

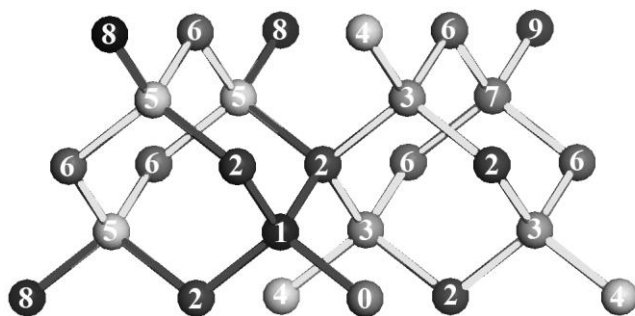


Fig.1 Classification of atoms in 64atoms cell.

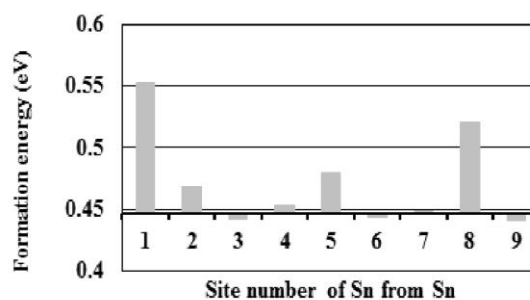


Fig.2 Formation energy of two Sn atoms in Ge.

参考文献

- 1) 松谷亮, 応用物理学会春季学術講演会 2014, 18p-F6-9.