

## 太陽電池用IV族混晶半導体のエネルギーバンド構造に関する基礎検討(2)

Basic study on energy band structure of IV element compound semiconductors for solar cell (2)

岡山県立大院情報工<sup>1</sup>, グローバルウェーハズ・ジャパン株式会社<sup>2</sup>

○須和 亮<sup>1</sup>, 末岡 浩治<sup>1</sup>, 神山 栄治<sup>1,2</sup>

Graduate School of Okayama Pref. Univ.<sup>1</sup>, GlobalWafers Japan Co., Ltd.<sup>2</sup>

○Ryo Suwa<sup>1</sup>, Koji Sueoka<sup>1</sup>, Eiji Kamiyama<sup>1,2</sup>

E-mail: u\_suya\_sin\_70b@yahoo.co.jp

### 1. 研究背景

本研究では, C, Si, Ge, Sn からなる IV 族元素の混晶系による多接合型太陽電池に注目している. IV 族混晶系薄膜の格子定数は基板となる Ge や Si の格子定数と異なるため, エピタキシャル成長させるためには組成をチューニングする必要がある. また, IV 族混晶系の組成に応じて様々な原子配置が実現する. 混晶系薄膜のバンドギャップはこれらの要素が複雑に絡み合って決まる. 前回[1], 基板上薄膜に生じる平面歪み( $L_x = L_y \neq L_z$ )を考慮する前段階として, IV 族単元素半導体と IV 族 1:1 混晶系半導体についてバンドギャップの等方性歪み( $L_x = L_y = L_z$ )依存性について報告した. 今回はバンドギャップの平面歪み依存性を調べ, その結果について等方性歪み依存性と比較しながら考察する.

### 2. 計算方法

本研究では, バンドギャップの平面歪み依存性を第一原理計算法により調べた. 8 原子からなる慣用単位格子モデルの x, y 方向に -30 ~ +30 % の範囲で平面歪みを与え, 膜厚方向の z 方向をフリーにして構造最適化を行い, バンドギャップの変化を調べた. また, 基本単位格子を  $2 \times 2 \times 2$  倍した 16 原子モデルを用い, このモデル中の 1 個 (6.25%) あるいは 2 個 (12.5%) の原子を他の IV 族元素と置換し, バンドギャップを計算した. なお, 計算に用いたソフトウェアは CASTEP であり, バンドギャップの再現性が高い汎関数 sX-LDA を用いた.

### 3. 計算結果と考察

IV 族単元素半導体のバンドギャップについて, 等方性歪み依存性[1]と平面歪み依存性の計算結果を図1に示す. 等方性歪みを与えたC単結晶は他のIV族単元素半導体 (Si, Ge, Sn) と比較して, バンドギャップの歪み依存性が大きく異なる[1]. このCの特異性は, Cの高い電気陰性度が関係していると考えている. 一方, 平面歪みを与えた場合は, Snを除く全てのIV族単元素半導体において歪み = 0のときにバンドギャップは最大となっていることが分かる. 混晶系についての計算結果は当日報告する.

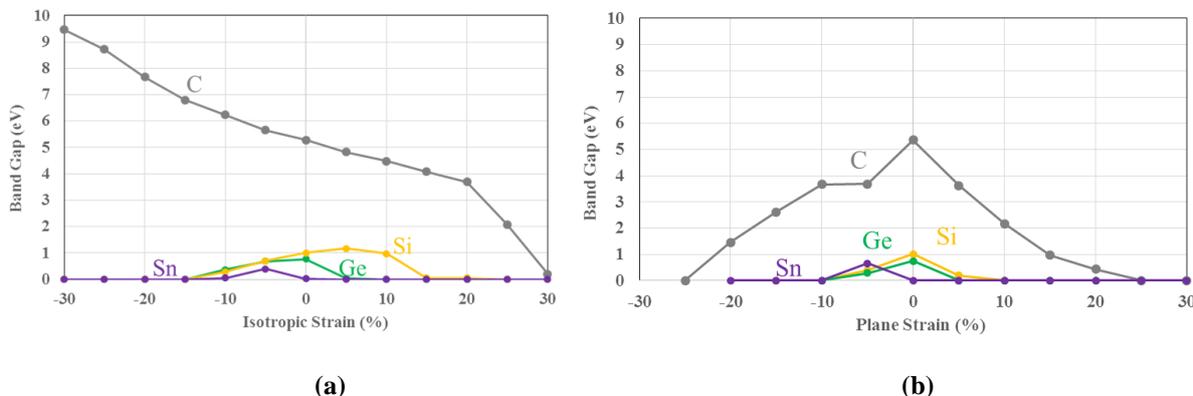


Fig.1 Dependence of IV element bandgap on (a) isotropic strain and (b) plane strain.

<参考文献>

1) 須和亮, 応用物理学会春季学術講演会 2014, 19a-PG5-3.