

BaSi₂ における不純物原子拡散の理論検討

Theoretical study of impurity atom diffusion in BaSi₂

千葉大理 大須賀祐喜、中山隆史

Chiba Univ., Yuki Osuga, Takashi Nakayama

E-mail: desz502vvv@chiba-u.jp

斜方晶 BaSi₂ は、禁制帯幅が 1.3.eV の間接遷移半導体であり、1.5eV での光吸収係数は $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ と結晶 Si の約 30 倍の値を持つため、高効率薄膜太陽電池への応用が期待されている。太陽電池作製において急勾配の pn 接合を形成するためには、拡散係数の小さい不純物原子をドーピングする必要がある。これまで III 族ドーパント (B, Al) や V 族ドーパント (Sb, As) を対象に、その拡散係数や活性化エネルギーが調べられ、B (Boron) が他のドーパントよりも拡散係数が小さく、活性化エネルギーが 4.6eV (他のドーパントは 1.0eV 以下) と異常に大きいことが明らかになった[1]。しかし、その原因は未だ明らかでない。そこで本研究では、BaSi₂ 結晶中の不純物原子の安定構造と拡散機構を、密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて明らかにし、Boron の大きな活性化エネルギーの原因について検討した。

まず、Boron をドーピングした時の生成エネルギーを計算し、どの構造が最も安定かを調べた。図 1 に結果を示す。Si の供給量が多い (μ_{Si} が -0.2 ~ 0eV) 領域では Boron は格子間サイトに位置するが、Si の量が減ると Boron が pair をつくった構造が安定になることがわかる。調べた範囲内では、図 2 に示す pair II の構造が最安定となった。一方、Al に対して同様の計算を行うと、Si と置換した構造が安定となり、この pair 構造は Boron 独自のものであることがわかる。

最安定となる pair II の構造から Boron が拡散していくためには、B-B 結合を切らなくてはならない。そのときに必要なエネルギーは約 3.5eV と大きい(図 3)。一方、Al や Sb は小さな活性化エネルギーで拡散できる事が確認できた。以上から、Boron は B-B pair を形成するために、他の不純物原子よりも遅い拡散になっていると考えられる。

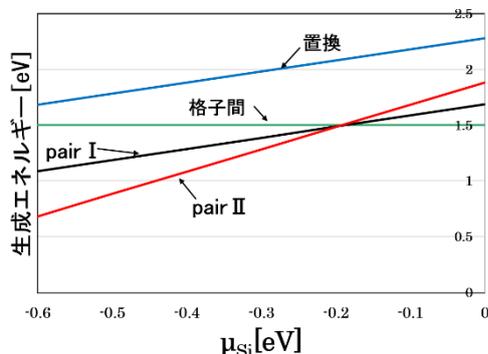
[1] N.Zhang, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. 53, 04ER02 (2014)

図 1. B を dope した様々な構造における生成エネルギー。横軸 μ_{Si} の原点はバルク Si の値。置換は Si と B が置換した構造、Pair I は Si が 1 つ、pair II は Si が 2 つバルク時より少なくなると B が pair をつくっている構造。

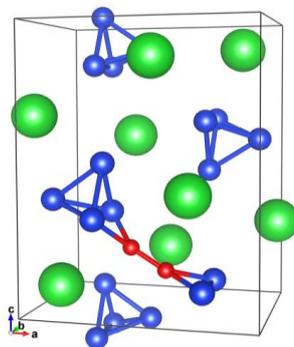


図 2. 最安定な pair II の Boron dope 構造。赤球は Boron、青球は Si、緑球は Ba である。

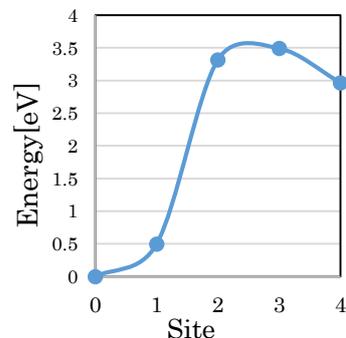


図 3. Boron 原子の拡散バリア。原点は pair II の構造で、そこから Boron を 1 つ動かした場合の拡散断熱ポテンシャル。