

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 First principles analysis on stability of IV element dopant in Ge crystal for solar cells

岡山県立大院情報工¹, [○]松谷 亮¹, 末岡 浩治¹, 神山 栄治¹Graduate School of Okayama Pref. Univ.¹, [○]Ryo Matsutani¹, Koji Sueoka¹, Eiji Kamiyama¹

E-mail: straight_up_1216@yahoo.co.jp

【研究背景】現在，多結晶Siが太陽電池用の主要材料となっている．さらなる高効率化を実現するためには，波長感度帯域の拡大が必要であり，バンドギャップの異なる材料を多層積層したIII-V族多接合型太陽電池が検討されている¹⁾．ところが，III-V族には環境に悪影響を与えるものも多く，かつSi材料との親和性にも問題がある．以上の技術背景から，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に注目している．IV族混晶系のバンドギャップを制御するため，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．そこで本研究では，Ge母相中に添加したC, Si, Snが結合長などに与える影響を明らかにした上で，これらの安定な原子配置を理論計算により求めることを目的とした．

【計算方法】Ge原子64個からなる立方体の計算セルにC, Si, Sn原子のいずれか1個を導入したモデルと2種類を1個ずつ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，原子間の結合長や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】Ge 64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原子を添加原子であるC, Si, Sn原子のいずれかと置換して導入し，構造最適化の前後で添加原子周囲の結合長の変化を調べた．結合長は10種類に分類できるが，CあるいはSiと置換した場合，図1の黒色結合の結合長が増加し，それ以外の結合長は減少した．またSnと置換した場合，黒色結合の結合長が減少し，それ以外の結合長は増加した．この結果は，Ge原子と比較した添加原子の原子半径の大小で説明できる．黒色結合は{110}面内に含まれるジグザグ結合であり，その延長上に添加原子を含んでいる．すなわち，添加原子がGe原子より小さければジグザグ結合上の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原子を外側に押す．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ことになる．図2にGe64原子モデルにSiとSn原子を1個ずつ導入するのに要する形成エネルギーを示す．縦軸の基準は，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，SiとSn原子はジグザグ結合上で互いに最も離れる場合(図2中の横軸No.8)が最安定であることがわかる．さらに，Ge結晶の添加元素がCとSi，CとSnの場合には，互いに隣接する場合が最安定であった．これらの計算結果は単に原子半径のみでは説明できず，電子状態が安定配置に寄与していることを示している．

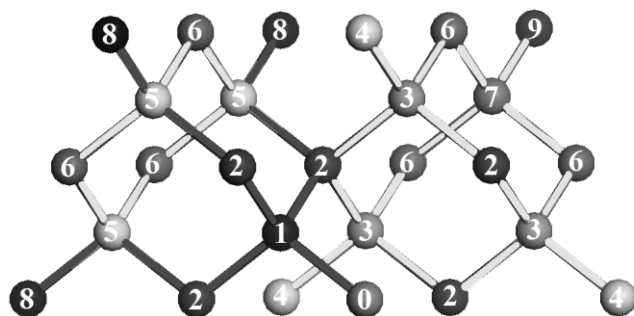


Fig.1 Classification of atoms in 64atoms cell.

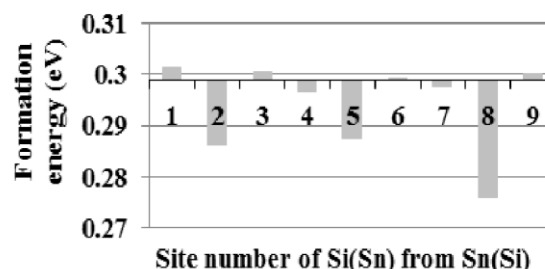


Fig.2 Formation energy of Si and Sn.

参考文献

- 1) 山口真史, 高効率太陽電池 2012, NTS, p.3-8.