BaSi₂におけるイオン化不純物の安定性と拡散の第一原理計算による検討 First-principles study on stability and diffusion of ionized impurity atom in BaSi₂ 千葉大理¹ ⁰長澤 晶斗¹,中山 隆史¹,大須賀 祐喜¹

Chiba Univ.¹, ^o Akito Nagasawa¹, Takashi Nakayama¹, Yuki Oosuga¹

E-mail: aaha1988@chiba-u.jp

斜方晶 BaSi₂は、バンドギャップ 1.3.eV の間接遷移半導体だが、1.5eV での光吸収係数は 3×10⁴ cm⁻¹と結晶 Si の約 30 倍なため、高効率薄膜太陽電池への応用が期待されている。この BaSi₂にIII 族(B, Al)やV族(Sb, As)原子をドープした時、Boron(B)原子の拡散障壁が異常に大きい(約 4.6eV。他のドーパントは 1.0eV 以下)ことが知られている[1, 2]。我々はこれまで、中性状態の B 原子の拡散を考え、B 原子は凝集エネルギーが約 6.67eV と大きいためにクラスタ化して動きにくくなることがその原因であると報告してきた[3]。しかし、拡散時の不純物原子は常に中性状態とは限らない。そこで今回は密度汎関数理論に基づく第一原理計算を用いて、イオン化されたドーパント(B, Al, Sb, As)の安定性と拡散に関して議論する。

Fig.1 に、ドープした B 原子の安定形態とそ の荷電状態の相図を、Si 及び電子の化学ポテ ンシャルの関数として示す。Si 基板と接した 通常の状態(µ_{Si}~0eV)では、中性状態の場合 と同様に[4]、B 原子は Si サイトを置換するよ り格子間サイトにいた方が安定で、電子が自由 に供給されれば-1 価の荷電状態になっている ことが分かる。また Si 供給が少し減ると(µ_{Si} ~-0.1eV) Si サイトを置換して電子を捕獲して -1 価になる。Si がさらに減った状況では複雑 な形態が安定となる。

Fig.2 に b 軸方向への格子間拡散における断 熱ポテンシャルと B 原子の価数 (Bader charge) を示す。障壁は B と Si 原子の結合が切れるこ とで発生するが、ポテンシャルや価数は荷電状 態にはあまり依存していない。これは B 原子 が周辺の原子と強く結合しているためである。 講演では、これら詳細を説明すると共に、他の ドーパントに関しても議論する。

[1]K. Nakamura et al. J. Cryst. Growth. 378 (2013)189. [2]N.Zhang et al. Jpn. J. Appl. Phys. 53 (2014)



Fig.1 Phase diagram of stable configuration (int etc.) and iconicity (-1 etc) of doped Boron atom in BaSi₂.



Fig.2 Calculated adoabatic potentials and Bader charges for B-atom diffusion with q=+1, 0, and -1 charged states.

04ER02. [3] 大須賀 他,第 76 回応用物理学会秋季 学術講演会 14a-A25-7. [4]大須賀 他,第 75 回応用 物理学会秋季学術講演会 19p-A27-9