安定化アモルファス Se 膜におけるドープ機構

Doping Mechanism in Stabilized Amorphous Se Films

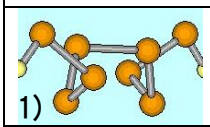
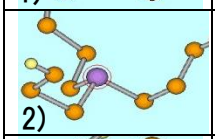
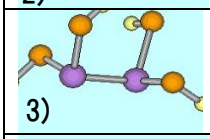
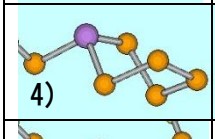
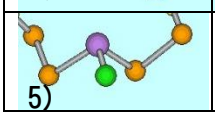
北大工，田中啓司

Hokkaido Univ., Keiji TANAKA

E-mail: keiji@eng.hokudai.ac.jp

超高感度ビジコンや x 線撮像素子への a-Se 膜の応用が進展しているが [1]，それらに用いられている安定化 a-Se 膜のドープ機構（おおよそ 0.2% As と 20ppm Cl を含有）は未解決である．従来の推論は，未結合種の密度がドーパントによって変化する [2,3] というものであるが，a-Se に荷電欠陥モデルを適用することには問題がありそうだし，0.2% : 20ppm の比（~1/100 の Cl）の意味も説明できていない [3]．ここでは，いくつかの Se クラスターの HOMO-LUMO エネルギーなどを第一原理計算することにより，ドープ機構に関する新モデルを提案する．

用いた計算ソフトは Winmostar 上で動作させた GAMESS [4]で．これまでの結果 [5]を参考にして，（適当な計算時間で尤もらしい結果が得られると期待される）6-31+G*基底関数を用い，B3LYP 汎関数で DFT 計算した．

	HOMO	LUMO	Unstable ΔE
 1)	−6.5 eV	−3.0	
 2)	−6.5	−3.0	±0
 3)	−6.5	−3.0	≥ 0.1eV
 4)	**−6.0**	−3.0	≥ 0.1
 5)	−6.5	**−2.5**	

関連するクラスターについての計算結果概略を表にまとめる．1) **Se らせん鎖**は HOMO-LUMO エネルギーの基準とし得るが，2) **架橋 As** や 3) **As 等極性結合**を含むクラスターはこれらとほぼ同じ値をしめす．一方，4) **As を含むリング構造**は浅い HOMO 準位を作ることから，これが正孔寿命を短くする[2,3]トラップとして振舞うことが想像される．またこの構造は 2) 架橋 As より 0.1eV 程度不安定で，60°C（蒸着時の基板温度）での熱平衡化を想定すれば，存在確率は全 As 原子の ~1%となる．したがって，As-Cl 結合が強いことを考え合わせると，「20ppm の Cl 添加により 5)のような**-Se-(As-Cl)-Se-構造**が現れて，As リング構造などは生じず，したがって正孔トラップは発生しない．一方では，LUMO ≈ −2.5 eV より Se 鎖の反結合軌道の広がりは当該構造で抑えられ，電子飛程が短くなる」と考えられ，実験結果 [2,3] を尤もらしく説明できる．

[1] K. Tanaka & K. Shimakawa, Amorphous Chalcogenide Semiconductors and Related Materials (Springer, 2011). [2] D.M. Pai, J. Imaging Sci. Technol. **41** (1997) 135. [3] S. Kasap et al., Semiconductors **37** (2003) 789. [4] M.W. Schmidt et al. J. Comput. Chem. **14** (1993) 1347. [5] K. Tanaka, J. Opt. Adv. Mater. **17** (2015) 1716.

© 2016年 応用物理学会