

IV 族混晶系半導体中の原子配置に関する第一原理解析

First principles analysis of atomic configurations in IV group compound semiconductors

岡山県大院情報系工¹, 岡山県大情報工² °(M1)小山 広貴¹, 末岡 浩治²

Graduate School of Engineering, Okayama Pref. Univ.¹, Okayama Pref. Univ.²

°Hiroki Koyama¹, Koji Sueoka²

E-mail: t.p.m.ht1241@gmail.com

現在, 低コストである多結晶 Si が太陽電池の主要材料となっている. しかし, Si 系太陽電池の変換効率は限界が近く, 大幅な性能向上は困難とされている. 本研究では, Si (Ge) 母相に C, Ge (Si), Sn を%オーダーで添加した IV 族混晶系半導体による多接合型太陽電池に注目している. 第一原理計算により, 与えられた組成における安定な原子配置を予測することを目的としている. また C, Sn 原子の存在が, 薄膜成長において導入される原子空孔(V)に与える影響についても注目した.

慣用単位格子を $2 \times 2 \times 2$ 倍した, Si 原子 64 個からなる立方体の計算モデル Si_{64} を用意した. このモデルに C, Sn と V を導入し, 第一原理計算法により構造最適化して全エネルギーを求めた. 使用したソフトウェアは CASTEP であり, カットオフエネルギーを 340 eV とした.

計算結果の例として, Si_{64} 中に V と C を 1 個ずつ, または V と Sn を 1 個ずつ導入するのに要する形成エネルギーを図 1 に示す. V を基準とすると, C または Sn は第 1~9 近接までの 9 通りの配置がある. そこで, 横軸に 9 つの近接位置を示す. これより V は C または Sn のいずれの場合も第一近接が最安定になることがわかった. また C を添加すると V は形成されにくく, Sn を添加すると V は形成されやすくなる.

Si_{64} 中に V を 1 個, V と C を各 1 個, V と Sn を各 1 個, V と C と Sn を各 1 個導入した際の,

各最安定配置の形成エネルギーを図 2 に示す. ここで, 横軸は添加元素と個数を示している. これより, C と Sn を同時添加することによって, V は形成されにくくなることが分かった.

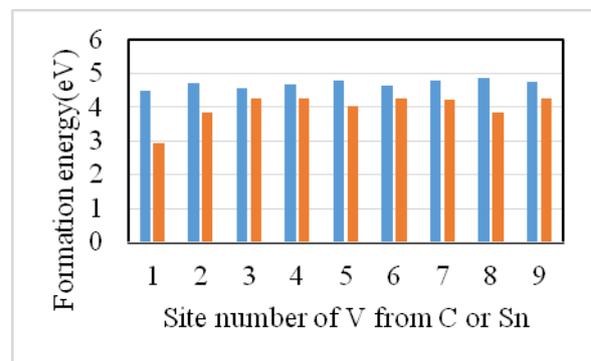


Fig. 1 Formation energy of V and C (blue), and V and Sn (orange) in Si_{64} .

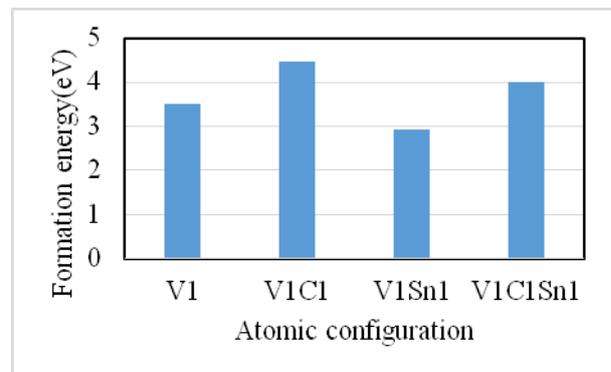


Fig. 2 Formation energy of each configuration.

さらに箱庭法[1]を適用して各原子配置の存在確率を求めた. その計算結果についても, 当日報告する.

参考文献

1. Kamiyama *et al.*, *Mater. Sci. Semicond. Process.* **43** (2016) 209.