

箱庭法を用いた太陽電池用IV族混晶半導体の 原子配置とバンドギャップの評価

Evaluation of atomic configurations and bandgap of IV group compound semiconductors for solar cell

by using the Hakoniwa method

岡山県大院情報系工¹ 岡山県大情報工²

○豊崎 兼人¹ 末岡 浩治²

Graduate School of Okayama Prefectural University¹, Okayama Prefectural University²

Kento Toyosaki¹ and Koji Sueoka²

現在、多結晶 Si が太陽電池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、我々は Si や Ge 結晶を母相として C, Si, Ge, Sn を %オーダーで添加した IV 族混晶系の多接合型太陽電池に注目している[1, 2]。本研究では、Si 結晶中に添加した C, Ge, Sn 原子の安定配置とバンドギャップについて、神山らが提案した箱庭法を用いた評価を行った[3]。

Si 結晶の慣用単位格子を $2 \times 2 \times 2$ 倍した 64 原子モデルを用意した。このモデルにおいて Si を C, Ge, Sn と 1～数個置換することで、%オーダーの Si 混晶系をモデル化した。次に、与えた組成において取りうる独立な原子配置数とそれぞれの重みを算出し、第一原理計算ソフトウェア CASTEP を用いて構造最適化後の形成エネルギーを求めて、各配置の実現確率を算出した[3]。なお、本計算ではバンドギャップの計算精度が高い汎関数 sX-LDA[4]を用いて第一原理計算を行い、箱庭法によりバンドギャップの平均値を求めた。

表 1 に、箱庭法で求めたバンドギャップの平均値を示す。これより、C を 4.68 %, Ge と Sn を 3.12 % の濃度まで添加すると、バンドギャップは添加濃度とともに低下することがわかる。また、C : Sn (C : Ge, Ge : Sn) = 1 : 1 の比率でそれぞれを 1.56 % 濃度で添加しても、単独添加と同じく Si のバンドギャップは低下する。

図 1 に C, Ge, Sn 原子を添加したときのバンドギャップの平均値とベガード則との比較を示す。これより、C > Sn > Ge の順でバンドギャップが低下するとともに、C と Sn はベガード則から大きくずれ、とくに C はベガード則と逆傾向となることがわかる。これらの結果より、本計算で行った濃度範囲では Si のバンドギャップは増加しないことが分かった。

Table 1 Calculated average Si bandgap.

Contents of Si compound	Average bandgap of Si, (eV)
Si ₆₄	1.127
Si ₆₃ C ₁	1.078
Si ₆₂ C ₂	1.034
Si ₆₁ C ₃	1.026
Si ₆₃ Ge ₁	1.115
Si ₆₂ Ge ₂	1.111
Si ₆₁ Ge ₃	-
Si ₆₃ Sn ₁	1.085
Si ₆₂ Sn ₂	1.060
Si ₆₁ Sn ₃	-
Si ₆₂ C ₁ Ge ₁	1.067
Si ₆₂ C ₁ Sn ₁	1.079
Si ₆₂ Ge ₁ Sn ₁	1.082

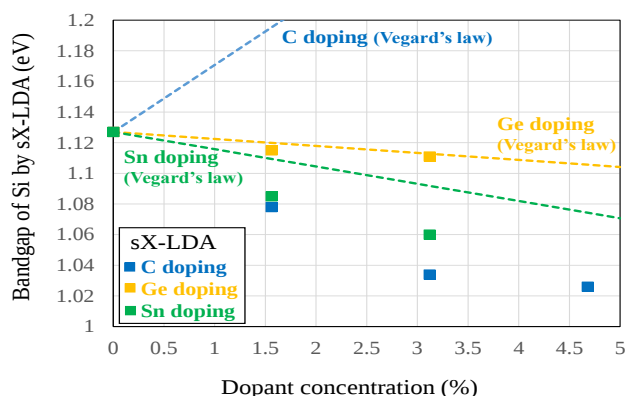


Fig.1 Calculated Eg by sX-LDA and by Vegard's law.

References

1. O. Nakatsuka, N. Taoka, T. Asano, T. Yamaha, M. Kurosawa, M. Sakashita, and S. Zaima, ECS Trans. 58 (2013) 149.
2. R. Matsutani K. Sueoka, and E. Kamiyama, Physica Status Solidi C 11 (2014) 1718.
3. E. Kamiyama, R. Matsutani, R. Suwa, J. Vanhellemont, and K. Sueoka, Mater. Sci. Semicond. Process. 43 (2016) 209.
4. C. Stampfl, W. Mannstadt, R. Asahi, and A. Freeman, Phys. Rev. B 63 (2001) 155106.