

太陽電池用IV族混晶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 semiconductor for solar cell.

岡山県大院情報系工¹ ○(M1)小山 広貴¹, 末岡 浩治¹

Graduate School of Okayama Pref. Univ.¹, °Hiroki Koyama¹, Koji Sueoka¹

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。与えられた組成における安定な原子配置を第一原理計算により予測することを目的としているが、特に Si または Ge 母相中で C が格子間位置に存在する可能性も考慮して計算を行った。以下、置換位置の C を C_s、格子間位置の C を C_i と示す。

計算結果の例として、64 個の Si または Ge からなるモデル中に 2 個の C 原子が存在する場合の、1 個の C 原子の形成エネルギーを図 1 に示す。ここで、横軸の C_s と C_i は、C_s 原子と C_i 原子がそれぞれ別の C_s 原子の近傍に存在する場合の結果を示す。これより、(1) C_s 原子の形成エネルギーは Si 中の方が Ge 中よりも低いこと、(2) Ge 中では C_s 原子の近傍で C_i と C_s 原子の形成エネルギーが近い値になることがわかる。

2 個の C_s の最安定配置を図 2 の左図に示し、C_s と C_i を含む最安定配置を図 2 の右図に示す。格子間 C 原子は単独では存在せず、C_s 原子と [100] ダンベル構造を取って形成する可能性が高いことがわかった。

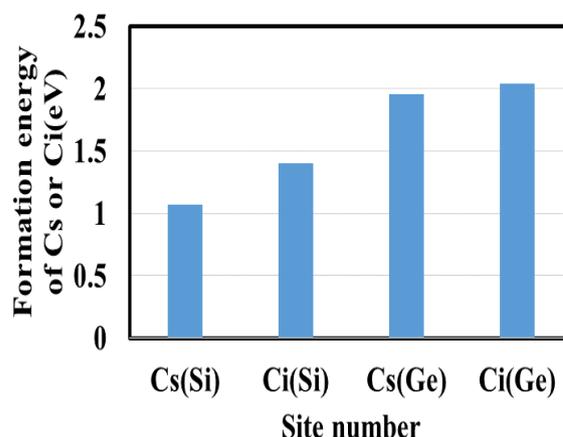


Fig. 1 Formation energy of C_s or C_i around the other C_s atom in Si or Ge.

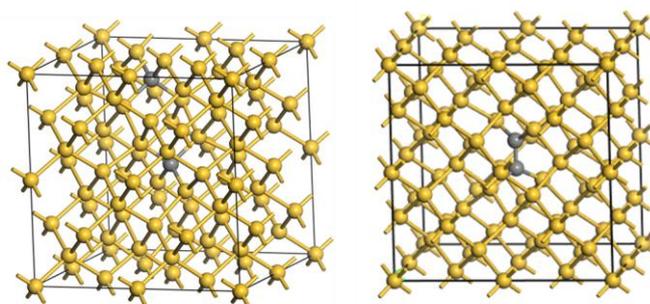


Fig. 2 Most stable model of (left) Cs-Cs and (right) Cs-Ci.

箱庭法[1]を適用して各原子配置の存在確率を求めたが、それらの計算結果については、当日のポスターで報告する。

参考文献

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