

InP 系化合物半導体中の
はじき出し閾値エネルギーの材料依存性



Dependence of displacement threshold energy on materials in compound-
semiconductor of InP-type

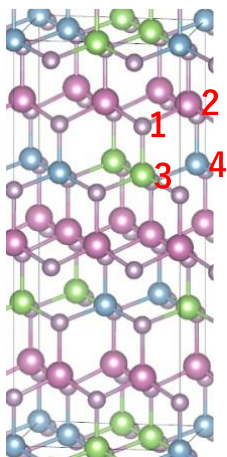
原子力機構¹, 宇宙機構² ^{○(PC)}奥野泰希¹, 都留智仁¹, 今泉充³

JAEA¹, JAXA² ^{○(PC)}Yasuki Okuno¹, Tomohito Tsuru¹, Mitsuru Imaizumi³

E-mail: okuno.yasuki@jaea.go.jp

放射線と物質相互作用において、欠陥生成による材料特性の変化が長年研究されてきた。照射損傷の理論では、放射線と原子の相互作用により原子に付与されたエネルギー(E_T)が、はじき出し閾値エネルギー(E_d)より大きい場合、一次はじき出し原子(PKA)が生成すると考えられている。 E_d は、材料依存性を考慮せず、慣例的に元素によって決定していたが、宇宙用太陽電池である InGaP 太陽電池および AlInGaP 太陽電池の先行研究において、それぞれの P の E_d が従来劣化予測に使用されてきた 9 eV ではなく、4 および 3.5 eV であることが実験結果より示された[1, 2]。また、A. Sibille らの報告で、InP 中の P の E_d が、7.7 eV と算出されており[3]、InP 系化合物半導体における E_d の材料依存性が示唆されてきた。そのため、本研究では、照射損傷の理論を改善するため、 E_d の変化した要因を解明することを目的とする。

放射線損傷の理論において、 E_d を決定する要因は、結晶の結合エネルギー(E_B)およびジャンプエネルギー(E_J)の和であると考えられている。 E_J は、結合が切れた後に、原子が安定な格子間原子になる数格子先までジャンプするためのエネルギーであり、照射損傷理論特有の現象であるため計算する手法はほとんどない。しかし、 E_B は、密度汎関数理論に基づく第一原理計算により相対的に評価することが可能である。図 1 に示す計算体系で、Open MX を用いて局所エネルギーを評価することにより [4]、凝集エネルギーとして P の E_B を算出した。計算結果より、InP、InGaP および、AlInGaP のリンの E_B は、3 、3 および、5 eV であった。値を相対的に比較すると、AlInGaP が 1.8 倍ほど他に比べて E_B が高いことが明らかである。しかし、AlInGaP の E_d が最も低いため、



	InP	InGaP	AlInGaP
1	P	P	P
2	In	In	In
3	In	Ga	Ga
4	In	Ga	Al

E_B の変化が E_d へ与える影響は、この結果より小さいと考えられる。そのため、この InP 系で発見された E_d の材料依存性として、 E_J の影響が重要であると示唆される。

[1] Y. Okuno, et al., J. Appl. Phys., **122**, 114901 (2017).
[2] Y. Okuno, et al., in Proceedings of the 45th IEEE Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), Wikoala, HI, USA, 10 June–15 June 2018, in Press.
[3] A. Sibille, et al. Physical Review B, **30**, 4(1984).
[4] T. Ozaki, Phys. Rev. B, **67**, 155108 (2003).

図 1 InP 系化合物の計算体系