

第一原理計算を用いた GaPN 混晶中の窒素起因点欠陥の消滅過程に関する考察

First-Principles Calculation of Annihilation Process of Nitrogen-Related Point Defect in dilute GaPN

牧 唯人¹、山根 啓輔¹、関口 寛人¹、岡田 浩¹、若原 昭浩¹

(1. 豊橋技科大)

Y. Maki¹, K. Yamane¹, H. Sekiguchi¹, H. Okada¹, A. Wakahara¹

(1. Toyohashi Tech.)

E-mail: maki-y@int.ee.tut.ac.jp, wakahara@ee.tut.ac.jp

III-V-N混晶であるGaPNは、バンドギャップおよび格子整合の観点からSi基板上多接合型太陽電池の材料として期待されている。しかしながら、窒素に起因する点欠陥により光学的・電気的特性が悪化することも知られている。III-V-N混晶中の代表的な点欠陥としては、V族サイトに2つの窒素原子が置換したN-N対が存在することが第一原理計算により示唆されている。これまでに我々は、N-N対がGaPN成長層の格子定数に与える影響を検討し、その存在を支持する実験結果を示した[1]。本研究では、効果的な結晶性改善方法の開発に向け、第一原理計算を用いてN-N対の消滅過程を調査することを目的とした。

プログラムコードにはCASTEPおよびDMol³を使用し、交換相関汎関数にはGGA-PBEを用いた。また、擬ポテンシャルにはOTFG ultra-softを、遷移状態の解析にはLST/QST法を用いた。

準安定構造であるN-N対の解離後に生じる構造としては、エネルギー状態および原子配列の観点から、同じく準安定構造のN-P対や最安定構造のV族サイト置換N (N_V) が考えられる。図1は、GaPN混晶中のN-N対が解離して N_V +N-P対へ遷移する際のエネルギーおよび構造の変化を示している。この反応における活性化エネルギーは2 eVと見積もられた。この値はよく知られているSi結晶中の置換型不純物の活性化エネルギー[2]と比較しても小さく、このような遷移が成長後の熱処理などによって生じる可能性を示唆している。図2は、最近接位置にP空孔(V_P)を導入したGaPN混晶中での $N-N$ 対+ $V_P \rightarrow 2N_V$ の遷移過程である。解析結果から、P空孔が存在する場合には解離したN原子がP空孔に捕らえられるため、最安定構造である N_V への遷移が0.9 eVというより低い活性化エネルギーで達成されることが明らかとなった。これらから、意図的なP空孔の導入により、N-N対を効率的に消滅できると考えられる。

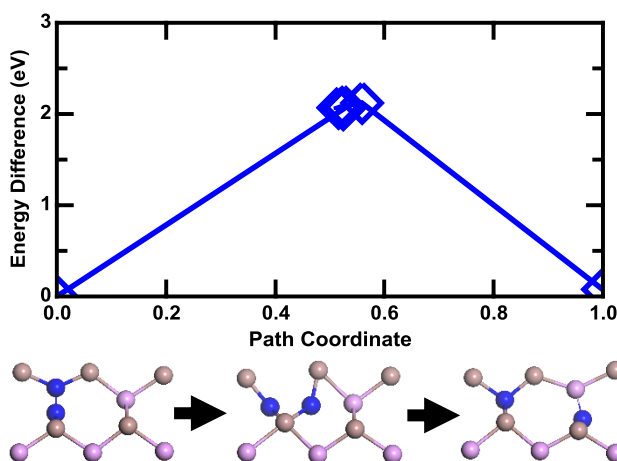


図1 N-N 対から N-P 対への遷移

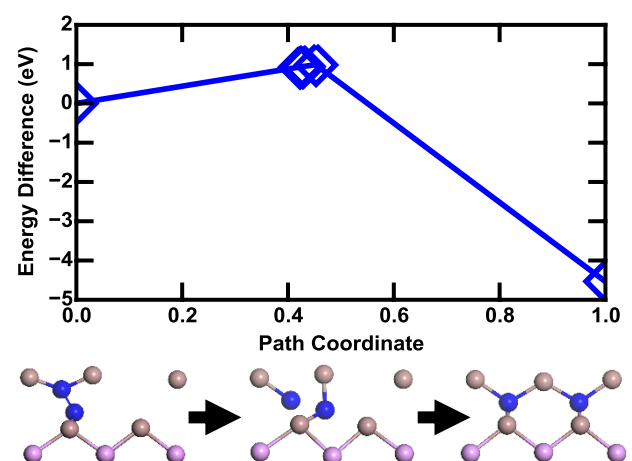


図2 N-N 対から N_V への遷移

[1] Y. Tachihara, K. Yamane, H. Sekiguchi, H. Okada, A. Wakahara, JSAP, 6p-PA7-2, 9.5-9.8 (2017).

[2] A. S. GROVE, Physics and Technology of Semiconductor Devices, p.40 (1967).