

宇宙用太陽電池に向けた III 族窒化物半導体の点欠陥生成エネルギーの評価

Evaluation on point defect formation energies of group III nitride semiconductors for space-use solar cells

工学院大 ○(B) 鈴木 涼馬, 屋山 巴, 本田 徹
Kogakuin univ., Ryoma suzuki, Tomoe Yayama, Toru Honda

E-mail: s416027@ns.kogakuin.ac.jp, yayama.tomoe@cc.kogakuin.ac.jp

1 背景と目的

2019年2月, はやぶさ2が小惑星リュウグウからサンプルの採取に成功するなど我が国の宇宙研究の発展は目覚ましい。このようなミッションの達成には探査機の電力供給源となる太陽電池の高性能化が重要である。高い変換効率のもとより, 宇宙放射線が降り注ぐ環境では耐放射線性が要求される。従来のSi材料の場合, 変換効率は最大で30%が限界である[1]。そこでIII族窒化物材料の優位性に着目した。同種の材料系で広範囲な波長域のバンドギャップエネルギーを持つ混晶を製作することが可能であるため, 多接合太陽電池に適した材料であると考えられる。本研究では, これらIII族窒化物の耐放射線耐性に関する評価を行う。耐放射線性の評価には実際には電子, 陽子線を加速し太陽電池に衝突させて劣化の影響を評価する実験が行われているが, 放射線曝露による材料の劣化に関する微視的な描像は明らかでない。そこで本研究では材料の内部の点欠陥生成エネルギーの計算を行い, 宇宙用太陽電池材料の耐放射線性の評価を行った。

2 計算方法及び点欠陥生成エネルギーの計算モデルの構築

計算には密度汎関数理論に基づく第一原理計算プログラムVASP[2]を用いた。交換相関汎関数には一般化勾配近似によるPerdew-Burke-Ernzerhof(PBE)ポテンシャルを用いた。各材料についてカットオフエネルギー及び, k 点数の取束を調べ, 十分な精度の下で計算を行った。カットオフエネルギーとは波動関数を展開する平面波基底の数を決めるパラメータであり, k 点数とは考慮するブリルアンゾーン内の波数の数である。

宇宙放射線は半導体材料を構成する原子を散乱し, 欠陥を生じさせる。欠陥が生成される第一ステップとして点欠陥(原子空孔)が挙げられる。したがって点欠陥生成に必要なエネルギーが高いほど, 放射線環境での劣化が少ないと考えられる。本研究ではGaN, AlN, Siについて点欠陥生成エネルギーを計算し, 比較を行った。図1にGaNを例とした構造モデルを示す。完全結晶の内部の原子は放射線粒子との衝突により, 原子間の結合が断ち切れ, 宇宙空間へ弾き飛ばされると仮定した。このときに必要なエネルギーを点欠陥生成エネルギー E_{form} として式(1)で定義した[3]。各項はそれぞれ完全結晶 E_{per} , 欠陥を含む結晶 E_{def} と孤立原子系 E_{iso} における電子の全エネルギーである。

$$E_{form} = (E_{def} + E_{iso}) - E_{per} \quad (1)$$

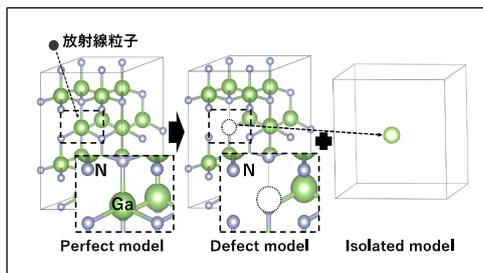


図1 孤立原子の計算モデル

3 計算結果

初めに計算結果の信頼性を確認するために文献[3]の条件下でGaNの点欠陥生成エネルギーを計算した。このモデルは抜けたGa原子が α -Gaの結晶を形成し, N原子が N_2 の分子を形成したときの点欠陥生成エネルギーである。点欠陥生成エネルギーはGa原子が α -Gaを形成する場合には7.4 eV, (文献値7.3 eV)であった。N原子が N_2 を形成する場合には3.6 eV, (文献値2.6 eV)であった。計算条件の違いにより1 eV程度の差は見られたが比較的近い値を示し, モデルの妥当性が確認された。次に孤立原子モデルの計算結果を図2に示す。

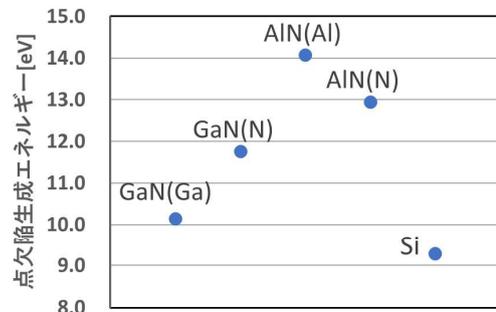


図2 点欠陥生成エネルギーの計算結果

図2より窒化物材料はSiに比べて点欠陥生成エネルギーが大きかった。またIII族窒化物材料の中ではAlNにおいてAl空孔が生成する場合(図2中AlN(Al))が点欠陥生成エネルギーが最も大きいことが分かった。欠陥生成エネルギーは化学結合を断ち切るエネルギーとの強い相関を有することが予想されるため, 融点を参考に大小関係を予測した。Siの融点は常圧下で1412 Kであるのに対し, 窒化物は高圧下での報告ではあるが2000 K以上あり, 強い結合エネルギーが示唆される[4]。予想通り窒化物材料はSiに比べて生成エネルギーが大きい傾向を示した。一方で結晶全体の化学結合を断ち切るモデル(融解)と1つの原子を抜き去る場合との比較には限界があると考えられる。今後極性の違いなども考慮に入れ, さらなる考察を行う。

4 結論

本研究ではIII族窒化物材料及びSiの点欠陥生成エネルギーの計算を行い, 比較や検討を行った。III族窒化物材料は点欠陥を生成し難く, その耐放射線性は従来の太陽電池材料のSiに比べて高いことが期待される。

参考文献

- [1] W. Shockley and H. J. Queisser, J. Appl. Phys. **32**, 510, (1961).
- [2] G. Kresse and J. Futhmuller, Comp. Mater. Sci. **6**, 15, (1996).
- [3] John L. Lyons and Chris G. van de Walle, Npj. Comput. Mater. **3**, 4, (2017).
- [4] 長谷川文夫, 吉川明彦編著, ワイドギャップ半導体光・電子デバイス, 森北出版株式会社, 301, (2006).