

太陽電池用 GeSnC 混晶系の原子配置に関する第一原理解析 First principles analysis on atomic configuration in GeSnC for solar cells

岡山県大院情報系工¹, グローバルウェーハズジャパン², 名大院工³

○松谷 亮¹, 末岡 浩治¹, 神山 栄治^{1,2}, 泉妻宏治², 鹿島一日児², 中塚理³

Graduate School of Okayama Pref. Univ.¹, GlobalWafers Japan.², Nagoya Univ.³

○Ryo Matsutani¹, Koji Sueoka¹, Eiji Kamiyama^{1,2}, K. Izunome², K. Kashima², O. Nakatsuka³

E-mail: straight_up_1216@yahoo.co.jp

【研究背景】本研究では、環境負荷が低いIV族元素混晶系による多接合型太陽電池に注目している。これまで、GeあるいはSi母相中に添加した置換IV族元素について、最近接原子配置は元素の組み合わせで決まり、最近接配置より離れると局所歪みを相殺するように原子配置が決まることを第一原理計算で示した[1,2]。一方、実験側ではバンドギャップと格子定数を制御することを目的として、GeSnC系やSiSnC系などが検討されている[3]。今回は、現実により近い組成のGeSnC系における安定原子配置について、SnとCが格子間位置に存在する可能性も考慮した計算を行った。

【計算概要】Ge原子16, 32, 64, 216個からなる立方体の計算セルに、添加元素(C, Sn)を1~6個導入したモデルを用意した。これらのモデルを構造最適化し、形成エネルギーを第一原理計算により求めた。なお、本計算では独立な原子配置と各配置の重み(Weight)を算出するプログラムも作成し、統計力学的手法を用いて各配置の出現確率やエネルギーの期待値などを求めた[4]。

【結果と考察】まず、SnのみあるいはCのみを添加した場合に、450°Cの熱平衡状態でこれらがGe中の置換位置に存在する割合の計算結果を示す。これより、Snは格子間位置に存在する可能性が極めて低く、ほとんどが置換位置に存在すると推定できる。一方、Cは0.9%程度の添加量において約88%が置換位置に存在し、3.0%以上では約50%が置換位置に存在すると推定できる。すなわち、Ge中のCはSnと異なり格子間と置換位置に混在すると考えられる。図2にGe64原子モデルにおいて1個のC原子を置換位置に置き、さらにSn原子を0個から5個導入する際の形成エネルギー E_f の期待値を示す。図中の点線は置換Cおよび置換Sn原子がGe結晶中で互いに無限に離れている場合の、各原子の形成エネルギーの和である。すなわち、この点線との差が同時添加することによるSnとCの形成エネルギーの低下量を表している。同時添加によりCとSnの形成エネルギーが低下することから、両者の導入効率が上昇すると考えられる。また、Sn原子はC原子の最近接置換位置を占めることで、互いの局所歪みを補償する。当日は実験結果[3]との比較も行う。

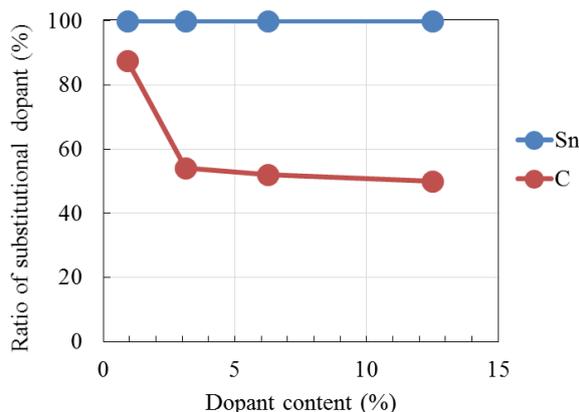


図1 Ge中の置換Sn, Cの割合

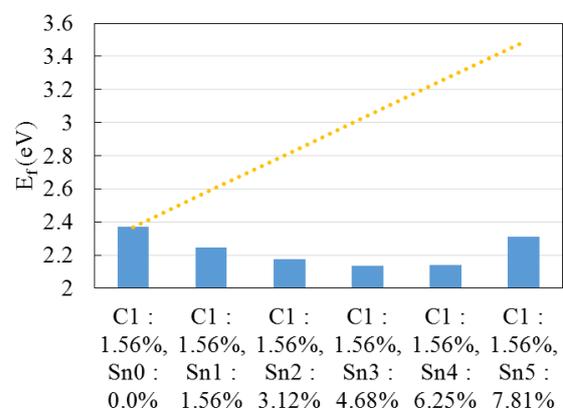


図2 Ge中のSnCの形成エネルギー

【参考文献】

- 1) 松谷亮他, 応物学会春季学術講演会2014, 18p-F6-9.
- 2) 松谷亮他, 応物学会秋季学術講演会2014, 19p-A16-1.
- 3) Terasawa *et al.*, ISTDM2014, (2014).
- 4) 末岡他, 本講演会.