

太陽電池用 GeSiSn 混晶系のバンドギャップに関する第一原理解析

First principles analysis on the bandgap in GeSiSn for solar cells

岡山県立大院情報系工¹, グローバルウェーハズジャパン², 名大院工³

○須和 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

○R. Suwa¹, K. Sueoka¹, E. Kamiyama^{1,2}, K. Izunome², K. Kashima², O. Nakatsuka³

E-mail: u_suya_sin_70b@yahoo.co.jp

1. 研究背景

本研究では C, Si, Ge, Sn からなる太陽電池用 IV 族混晶系において、与えられた組成におけるバンドギャップを予測する計算技術の開発を目指している。前回までは基礎研究の位置づけで、2種類の元素が互いに隣接する 1:1 組成の混晶系におけるバンドギャップの格子歪み依存性を調べた[1]。これに対し、現実には Ge あるいは Si 母相に%オーダーで他元素を添加するが、この場合には様々な原子配置が実現する[2, 3]。今回は、現実により近い組成の GeSiSn 系において実現する原子配置を推測したのちにバンドギャップを計算した。

2. 計算方法

2個の原子を含む Ge 基本単位格子を $2 \times 2 \times 2$ 倍した 16 原子モデルを準備した。次に、本計算において作成した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[4]を用い、このモデルの置換位置に Si と Sn を 1~5 個導入した。さらに各モデルについて汎関数 GGA-PBE を用いて構造最適化を行い、全エネルギー値を用いて統計力学的手法により各配置の出現確率を求めた。最後に、出現確率の高い原子配置モデルを選択し、バンドギャップの再現性が高い汎関数 sX-LDA を用いてバンドギャップの期待値を求めた。

3. 計算結果と考察

Ge₁₃Si₂Sn₁系において、上記の手順により選択した出現確率が高い3つのモデルを図1に示す。図中には各々の出現確率も示している。さらに、この組成におけるバンドギャップの期待値を図2に示す。なお、この図中には Ge, Si, Ge₁₄Si₁Sn₁系のバンドギャップの計算結果も示している。これより Ge 母相に Si と Sn を各々 6.3% 程度添加する (Ge₁₄Si₁Sn₁) とバンドギャップは 0.1 eV 程度低下すること、Si の添加量を 12.5% 程度に増加させる (Ge₁₃Si₂Sn₁) とバンドギャップが少し増加することがわかる。さらに Si の添加量を増やした Ge₁₂Si₃Sn₁ と Ge₁₁Si₄Sn₁ 系についても計算を進めている。当日はその結果も紹介するとともに、実験結果との比較も行う。

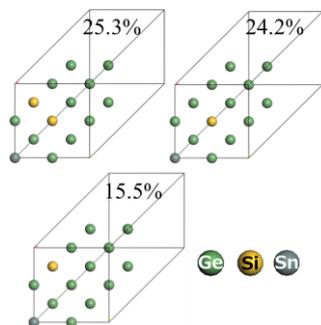


Fig.1 High Ge₁₃Si₂Sn₁ model of an appearance probability.

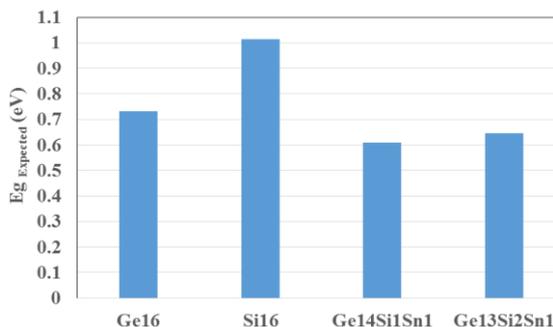


Fig.2 Expected value of bandgap.

<参考文献>

- 1) 須和亮他, 応用物理学会秋季学術講演会 2014, 19p-A16-2.
- 2) 松谷亮他, 応物学会秋季学術講演会 2014, 19p-A16-1.
- 3) 松谷亮他, 本講演会.
- 4) 末岡他, 本講演会.