

申請者	学科名	情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治
調査研究課題	添加元素の存在位置を予測する計算手法の開発と太陽電池用 IV 族混晶薄膜への適用					
調査研究組織	氏名		所属・職	専門分野	役割分担	
	代表	末岡 浩治	情報工学部情報通信工学科・教授	応用物理学	研究全般・第一原理計算	
	分担者	中村 浩三	地域共同研究機構・客員教授	材料工学	計算結果の議論	
		中塚 理	名古屋大学大学院工学研究科・准教授	半導体工学	薄膜成長と電気特性評価	
		泉妻 宏治	グローバルウェアズ・ジャパン社・部長	材料工学	電子顕微鏡等による結晶評価	
		豊崎 兼人	情報系工学研究科 M2	情報通信工学	第一原理計算を分担	
山岡 俊太		情報系工学研究科 M2	情報通信工学	第一原理計算を分担		
小林 弘治	情報系工学研究科 M2	情報通信工学	第一原理計算を分担			
調査研究実績の概要	<p>1. 研究背景と目的</p> <p>申請者は、シリコン (Si) およびゲルマニウム (Ge) 系半導体を中心に据えた IV 族多元系半導体混晶による超高変換効率太陽電池多層セル構造の創出を目指し、平成 24 年度から 28 年度まで名古屋大学、グローバルウェアズ・ジャパン社と共同で JST-ALCA 受託研究として本研究を行ってきた。本研究をさらに発展させ、超高変換効率太陽電池を実現するためには、「Si や Ge 薄膜に%オーダーで C や Sn を添加した際に、これらの添加元素が格子間位置と置換位置にどの程度存在するかを予測する計算手法の開発」が急務となっている。これまでの研究は図 1 (左) に示すような置換位置のみを考慮しており、それに起因してバンドギャップの計算精度が不十分であった。図 1 (右) に示すようないくつかの格子間位置も扱うこのような計算手法は前例がなく、任意の組成におけるバンドギャップの高精度予測が可能になる。</p> <p>本研究では次のような計算手法の開発を目指す。まず、格子間位置と置換位置を網羅した独立な原子配置と各配置における等価な配置数を算出し、独立な各配置の形成エネルギーを第一原理計算により得る。次に、独立な原子配置群をカノニカル集団として扱い、統計力学における分配関数を求めることで、各原子配置の実現確率やバンドギャップ等の期待値を求める。本手法は独自のものであり、原理的に太陽電池用材料のみならず、あらゆる材料に適用可能である。</p>					

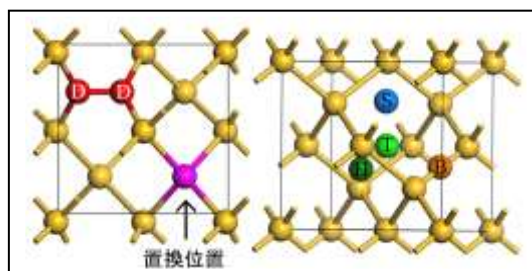


図1 (左) 置換位置, (右) 格子間位置

調査研究実績  
の概要

2. 研究成果の概要

開発した計算手法を用いた計算例を述べる. Si 64原子の立方体モデルを用い, Si結晶にC原子を3.12%の濃度で添加した場合の, 可能な原子配置と等価な配置数 (Weight) を図2に示す. 可能な原子配置は9通りに規約化され, Weightの合計は ${}_{64}C_2 = 2016$ である.

(例)Si62C2

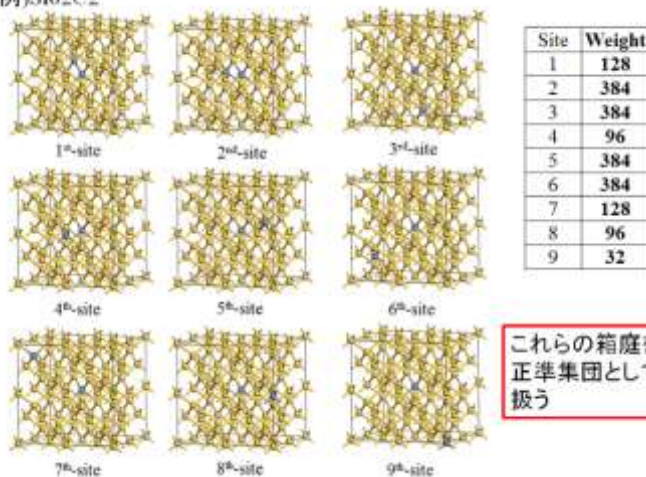


図2 Si<sub>62</sub>C<sub>2</sub>の組成における可能な原子配置とWeight

図2に示す9通りのモデルについて, エネルギーバンドギャップ (Eg) を計算した結果を図3に示す. 図において, sX-LDAで示す方が実験と比較しうる結果である. これより, Egは原子配置によって異なり, 安定な配置ほどEgは大きくなっている.

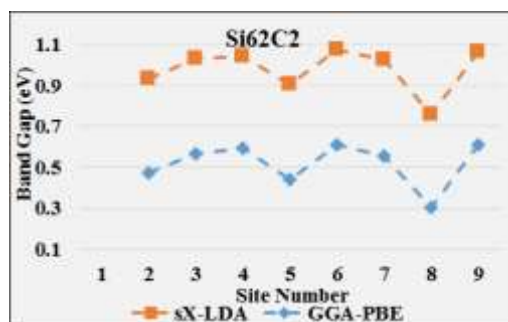


図3 Egの原子配置依存性

図4にEgの計算結果をまとめて示す. この計算結果は, Si結晶にC, Ge, Snを添加した際のEgを予測するものとなっている. とくに, CやSnを添加した場合には従来法のベガード則と大きく異なる結果を与えていることがわかる. 最近, 本計算結果を支持する実験結果が報告されている. なお, 本手法を“箱庭法”と命名し, 独自の計算手法として国内, 国際学会でPRを行っている.

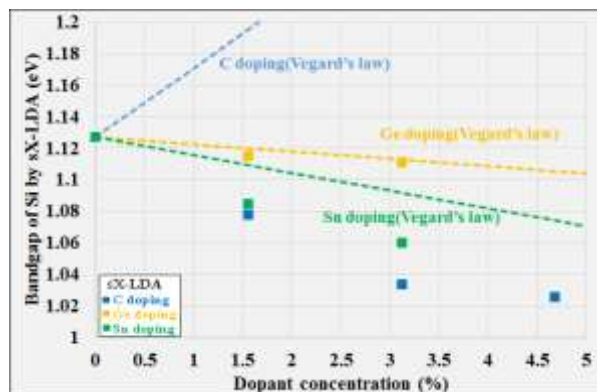


図4 Si結晶のEgのC, Ge, Sn濃度依存性

3. 研究成果および外部資金の取得状況

本研究成果について, 2016年10月に米国ホノルルで開催された半導体関連の国際会議で招待講演を行った. また, 本研究は科研費基盤研究に追加採択され, 2019年3月まで助成を受けることが決まっている.

4. 今後の計画

次年度は, 本計算手法をさらに高精度化し, とくにパワーデバイス用のSi, SiC, GaN半導体の欠陥制御に適用することで, これらの高品位化に貢献する.

成果資料目録

- 1) K. Sueoka, E. Kamiyama, P. Spiewak, and J. Vanhellefont, "Review - Properties of Intrinsic Point Defects in Si and Ge Assessed by Density Functional Theory", *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **5** (2016) P3176-P3195.
- 2) K. Kobayashi, S. Yamaoka, and K. Sueoka, "Theoretical Study of Impact of Internal and External Stresses on Thermal Equilibrium Concentrations of Intrinsic Point Defects in Doped Si Crystals", *ECS Journal of Solid State Science and Technology* **6** (2016) P78-P99.