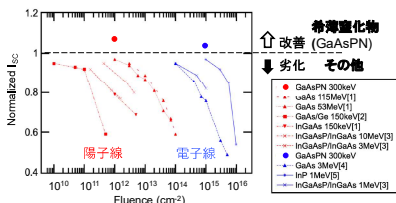


### 放射線照射した際の影響

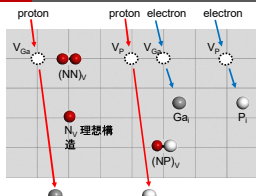
#### 放射線照射した際の太陽電池の短絡電流



- 通常は放射線照射を行うとIscは大幅に劣化
- GaAsPNでは放射線照射+熱処理を行うことでIscが改善

太陽電池の特性が改善するという特異な現象の発見

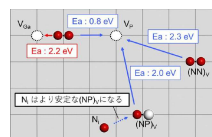
#### GaPN混晶 放射線照射時モデル図



- 陽子線によってははじき出された原子は基板へP/Ga空孔を生成
- 電子線によってははじき出された原子は結晶内へP/Ga空孔 格子間P/Gaを生成

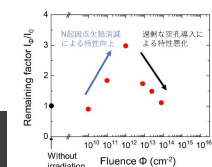
#### 陽子線照射が結晶に与える影響(理論解析)[6]

- N起因点欠陥がP空孔が離れていても比較的低いエネルギーで点欠陥を消滅可能
- N起因点欠陥はP空孔を介して効率的に消滅させることが可能



#### PL特性の陽子線照射量依存性(実験的検証)[7]

- P空孔導入によりPL特性向上
- 空孔が過剰に導入されると特性悪化



#### 研究目的

放射線照射時の結晶内ふるまいの解明に向けたGaPNにおける各種点欠陥の特性解析

### 第一原理計算による解析

#### 計算条件

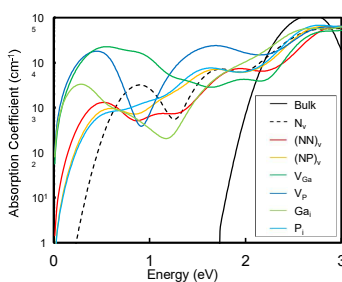
DFT Code : CASTEP  
Functional : GGA-PBE  
PWPP : OTFG Ultrasoft  
MP k-points : 3×3×3  
Cutoff energy : 517.0 eV  
Model : 64-atom GaP

#### 特性の評価

- 電気・光学特性
- バンド構造・光吸収係数
- 消滅過程解析
- LST/QST法による遷移状態解析

### GaPNにおける各種点欠陥の特性評価

#### 各点欠陥の光吸収係数



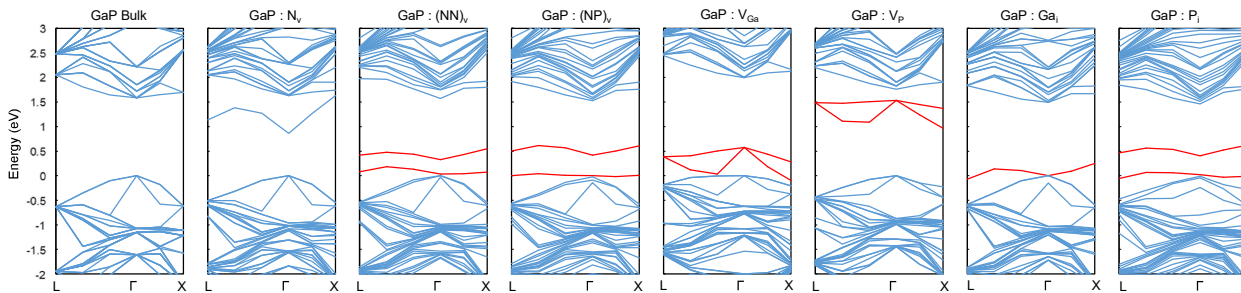
- 理想構造であるNVを含む結晶のバンド構造はバンドギャップボウイングの効果がみられる

- GaPN混晶で特性悪化の問題とされているN起因点欠陥((NN)<sub>v</sub>), ((NP)<sub>v</sub>)はより低エネルギー域で光吸収
- バンドギャップ中に不純物準位を形成

- 放射線照射によって生成される空孔や格子間原子を含む結晶についても低エネルギー域で光吸収 特に空孔に関しては大きなピークが見られる
- バンドギャップ中に不純物準位を形成
- GaP中のVGa, VPについては過去のデータと同様な結果が得られた[1]

空孔および格子間原子は導入量が増加することでN起因点欠陥と同様に特性悪化を引き起こす要因となる

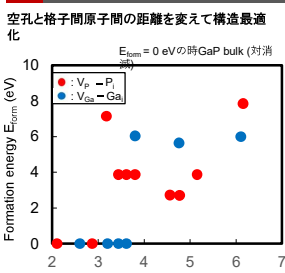
#### 各点欠陥のバンド構造



[1] R.K.Rehberg et al, Semiconductor Science and Technology, 8(2), 290-297, (1993).

### 放射線照射時のGaPNの結晶内ふるまいに関する解析

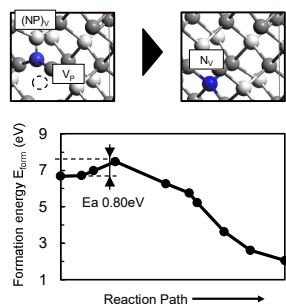
#### 空孔-格子間原子の対消滅



- ガリウムの空孔-格子間原子の方が距離が離れていても対消滅しやすい
- 電子線照射の場合陽子線照射に比べてGa空孔の数を減らせる可能性があるしかし格子間Pは残ってしまう

#### P空孔-(NP)<sub>v</sub>の反応過程

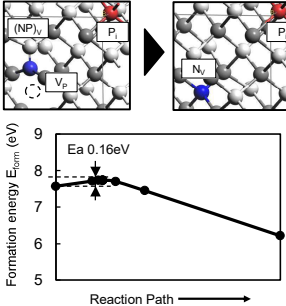
##### 陽子線照射の際のモデル



- 熱処理を加えることで活性化エネルギーを超えて(NP)<sub>v</sub>を理想構造であるNVへ遷移可能

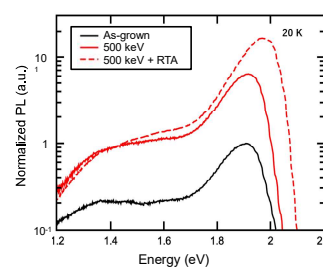
#### 格子間P-P空孔-(NP)<sub>v</sub>の反応過程

##### 電子線照射の際のモデル



- 格子間Pがあることにより非常に小さな活性化エネルギーで(NP)<sub>v</sub>を理想構造であるNVへ遷移可能

#### 電子線照射による影響 PL測定[1]



- 陽子線照射とは異なり電子線照射の場合照射のみでAs-grownに対して5倍の発光強度を得ることができた
- 格子間Pの存在が陽子線照射のみでみられなかった特性改善の要因の一つであると考えられる

[1] K.Hirai et al, JSP Autumn 83, 20p-A307-6 (2002)

### 総括

GaP系希薄窒化物は放射線照射した後熱処理を行うことで太陽電池の特性が向上するという特異な現象を発見した。我々は、放射線照射時の結晶内ふるまいの解明に向けてGaPNにおける放射線照射時に生成される空孔型欠陥および格子間原子の特性解析を第一原理計算を用いて行った。光吸収係数およびバンド構造の解析結果から空孔および格子間原子はN起因点欠陥と同様に低エネルギー域で光吸収が起き、バンドギャップ中に不純物準位を形成することから特性悪化を引き起こす要因となることが確認できた。またこれらの点欠陥の反応過程を解析することで、格子間Pが(NN)<sub>v</sub>の消滅反応を促進することを確認した。

結論：空孔型欠陥、格子間原子の物性およびN起因点欠陥との反応過程から放射線照射が結晶に与える影響に関する知見を得た

謝辞：本研究は、日東学術振興財団、立松財団、村田学術振興財団の助成を受けて行われた。本研究で用いたデバイスはEIIIRIS,VBLクリーンルームにて作製された。