

BaSi₂ 太陽電池への応用に向けた HTL/BaSi₂ 構造の作製と評価Evaluation of HTL/BaSi₂ structure fabrication for application to BaSi₂ solar cells筑波大¹, °深谷 友香¹, Nurfauzi Abdillah¹, 都甲 薫¹, 末益 崇¹Univ. Tsukuba¹, °Yuka Fukaya¹, Nurfauzi Abdillah¹, Kaoru Toko¹, Takashi Suemasu¹

E-mail: s2420317@u.tsukuba.ac.jp

【背景】 BaSi₂ は太陽電池に適する諸特性を有する¹⁾。近年、BaSi₂ 膜の光学特性が飛躍的に向上したこと、さらに、n 型不純物の拡散係数が大きいことから、高品質なアンドープ BaSi₂ 膜を光吸収層に用い、電子輸送層 (ETL) とホール輸送層 (HTL) により、光生成した電子とホールを分離するデバイス構造が考えられる。先行研究では MoO_x を HTL として n-BaSi₂ 膜とのヘテロ接合により太陽電池動作を実証したが、高効率動作には至っていない²⁾。BaSi₂ は酸素と反応しやすいため MoO_x の酸素組成が減少し、界面付近の BaSi₂ が酸化する可能性もある。さらに、MoO_x 膜の仕事関数も低下すると予想される³⁾。また、MoO_x の仕事関数が減少すると BaSi₂ との内蔵電位が減少し、太陽電池特性の劣化に直結する。本研究では HTL 材料である MoO_x 膜の酸素組成を維持するため、MoO_x / BaSi₂ 界面に a-Si:H 層の挿入を検討した。

【実験手法】 Si(111) 基板上に MBE 法により BaSi₂ を 500 nm エピタキシャル成長した後、in situ で 3 nm の a-Si を堆積した。その後、RF プラズマを用いて a-Si 層へ原子状水素を照射した。このときの水素供給時間 $t_{a-Si:H}$ を 0 – 30 min の間で変調した。また、RF 投入電力は 70 W、水素供給量は成長チャンバー内の真空度により制御し、 1.0×10^3 Pa に設定した。その後、蒸着法により 1 nm min⁻¹ の成長速度で 10 nm の MoO_x を堆積した。比較として、同条件で MoO_x(10 nm) / a-Si:H(3 nm) / Si(111) 基板の構造を作製した。本研究では、XPS, UPS, 分光エリプソメトリ, 断面 TEM によって試料を評価した。

【結果・考察】 MoO_x 膜の酸素組成 x を $t_{a-Si:H}$ の関数として Fig. 1 (a) に示す。XPS スペクトルを Mo⁶⁺, Mo⁵⁺ のピーク⁴⁾ によりフィッティングを行い、MoO_x 膜の酸素組成 x を算出した。どちらの構造においても、 $t_{a-Si:H}$ が増加するにつれ x が増大した。一方、BaSi₂ 層を挿入すると、 x は低下した。これは、BaSi₂ 膜が酸素と結合しやすいためと考えられる。Fig. (b) に UPS 測定と分光エリプソメトリ結果から算出した MoO_x 膜のバンドギャップと電子親和力を示す。これらは $t_{a-Si:H}$ に大きく依存しないため、フェルミ準位のみが変化すると考えられる。Fig. (c) に水素供給なし、(d) に水素供給ありの試料の断面 TEM 画像を示す。Fig. (e) に深さ方向の酸素濃度変化を示す。水素供給ありの試料の方が BaSi₂ 内の酸素濃度が小さいため、a-Si:H が酸素原子の拡散を防いでいると考えられる。

【参考文献】

- 1) T. Suemasu and D. B. Migas, Phys. Status Solidi A **219**, 2100593 (2022).
- 2) W. Du *et al.*, Appl. Phys. Lett. **106**, 122104 (2015).
- 3) L. Cao *et al.*, Prog. Photovolt. **31**, 1245 (2023).
- 4) T. Zhang *et al.*, AIP Conference Proceedings **1999**, 040027 (2018).

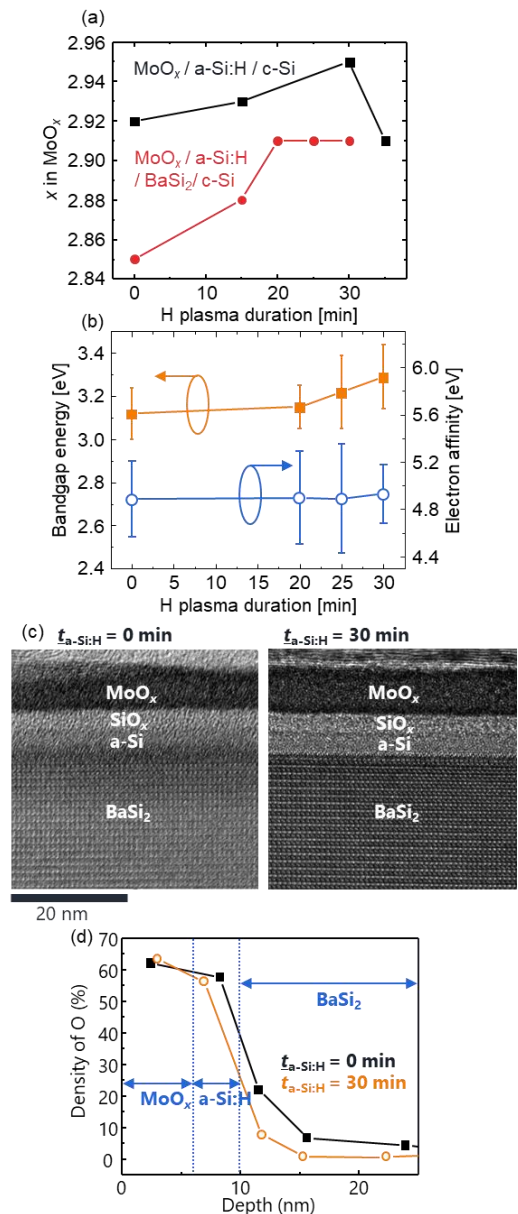


Fig. 1 (a) Oxygen composition x in MoO_x films as a function of H plasma supply duration determined by XPS spectra. (b) Band gap energy and electron affinity of MoO_x films by spectroscopic ellipsometry and UPS spectra. (c) Cross sectional TEM images and (d) depth profiles of oxygen composition around the MoO_x/a-Si/BaSi₂ structure by EDX.