

BaSi₂ への HTL 応用に向けた HN-D2 の基礎物性評価 Evaluation of fundamental properties of HN-D2 for HTL application to BaSi₂

筑波大院¹, NIMS², 東ソー株式会社³

◦平井瑞紀¹, 深谷友香¹, 安田剛², 幸田陽一朗³, 召田雅実³, 都甲薫¹, 末益崇¹

Univ. of Tsukuba¹, NIMS², Tosoh Corporation³

◦M. Hirai, Y. Fukaya¹, T. Yasuda², Y. Koda³, M. Mesuda³, K. Toko¹, and T. Suemasu¹

E-mail: s2111897@u.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】 薄膜太陽電池新規材料として注目される BaSi₂ について、我々は As ドープ等の手法によって高品質化・分光感度特性の向上を達成してきた^[1,2]。近年では、その n-BaSi₂ の光吸収層応用に向けてホール輸送層 (HTL) の探索が進んでおり、比較的大きな仕事関数を持つ材料として金属酸化物が注目されてきた (Fig. 1)。しかし、MoO_x を HTL として用いた先行研究では、MoO_x 中の酸素によって BaSi₂ の酸化を促進する結果が示唆されている^[11,12]。そこで我々は、HTL に適したバンド構造を有することが理論計算によって示唆されており、共有結合性で酸素が脱離しづらい有機材料である HN-D2^[5] に着目し、その半導体基礎物性の調査を行った。

【実験手法】 Si(111)基板上に真空蒸着法を用いて HN-D2 を室温で 15 nm 成膜した (ベース真空度: 1.1×10^{-7} Pa)。続いて、作製した HN-D2 膜について、UPS 測定によりイオン化ポテンシャルを、分光エリプソメトリによって光学吸収端を測定した。

【結果・考察】 Fig. 2 に、He I 線 (21.22 eV) を用いて取得した UPS スペクトルを示す。ピークの立ち上がりやテール終端位置を参照することで、光電子の運動エネルギーの最小値 ($E_{k,min}$) は 6.7 eV、最大値 ($E_{k,max}$) は -9.5 eV であり、HN-D2 のイオン化ポテンシャルは 5.0 eV であることが判った。Fig. 3 に作製した試料の分光エリプソメトリを示す。吸収スペクトルの立ち上がりから、HN-D2 の光学吸収端が 2.7 eV と算出された。これらの結果は予測された HN-D2 のバンドアライメント^[5] と非常に良く整合しており、実験的にも n-BaSi₂ の HTL 層として好適な材料であることが示唆された。当日の発表では、n-BaSi₂ に成膜した HN-D2 膜の諸特性やその光学特性についても議論をする。

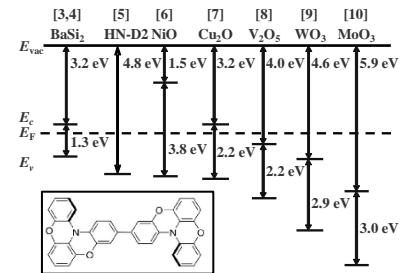


Fig. 1 Band alignment of HTL candidate materials for BaSi₂. The inset shows molecular structure of HN-D2^[5].

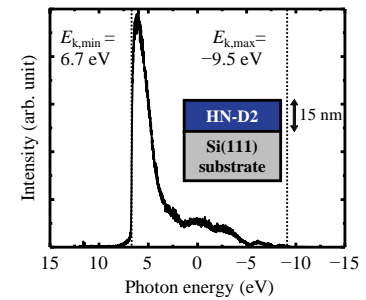


Fig. 2 UPS spectrum of the HN-D2 films.

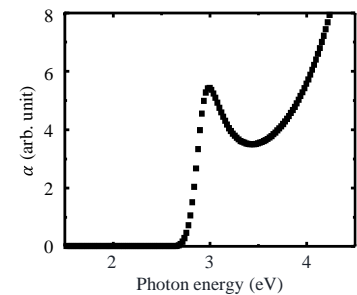


Fig. 3 Absorption spectrum of the HN-D2 films measured at room temperature.

[1] T. Suemasu and D. B. Migas, Phys. Status Solidi A **219**, 2100593 (2022).

[2] S. Aonuki *et al.*, Appl. Phys. Express **13**, 051001 (2020).

[3] T. Suemasu *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **45**, L519 (2006).

[4] K. Toh *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **50**, 068001 (2011).

[5] A. Wakamiya *et al.*, Angew. Chem. Int. Ed. **53**, 5800 (2014).

[6] H. Takenaka *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **62**, SD1011 (2023).

[7] M. I. Hossain and F. H. Alharbi, Mater. Technol. **28**, 88 (2013).

[8] A. Kuddus *et al.*, Superlattices Microstruct. **132**, 106168 (2019).

[9] M. K. Otoufi *et al.*, Sol. Energy **208**, 697 (2020).

[10] L. Cao *et al.*, Prog. Photovoltaics Res. Appl. **31**, 1245 (2022).

[11] W. Du *et al.*, Appl. Phys. Lett. **106**, 122104 (2015).

[12] 深谷 友香 他, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 17p-B1-5, (2024).