

BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池に向けたシミュレーションによる HTL 材料の検討Investigation of HTL materials by simulation for BaSi₂ hetero-junction solar cells

筑波大学 ○石黒 雄路, 佐藤 匠, 林 洸希, 都甲 薫, 末益 崇

Univ. Tsukuba, ○Yuji Ishiguro, Takumi Sato, Koki Hayashi, Kaoru Toko, Takashi Suemasu

E-mail: yusen2003@outlook.jp

【背景・目的】本研究では薄膜太陽電池の新規材料として BaSi₂ に注目した¹⁾。BaSi₂ は豊富な元素から構成される半導体でありながら、大きな光吸収係数 ($3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ at 1.5 eV) と優れた少数キャリア拡散長 (10 μm) を有する²⁾。また、バンドギャップ (E_g) が 1.3 eV と太陽電池の理想値に近い²⁾。先行研究では、Ba 及び BaSi₂ ターゲットを用いた同時スパッタ法により、Ba/Si 組成比を制御し、高品質な BaSi₂ 光吸収層の形成を達成した³⁾。また、BaSi₂-pn ホモ接合型太陽電池では、BaSi₂ の大きな光吸収係数により BaSi₂ 表面層での寄生吸収損失が大きく、高品質な BaSi₂ 光吸収層を十分に活用できない⁴⁾。また、p/n 制御に用いる不純物の拡散の問題もある。そこで本研究では、寄生吸収を抑制し光生成キャリアを効率よく取り出すため、undoped BaSi₂ とホール輸送層 (HTL) のヘテロ接合を検討した。HTL には BaSi₂ と比較して大きな E_g 、同程度のイオン化ポテンシャル ($IP \sim 4.5 \text{ eV}$) が求められる。本研究では、様々な HTL 材料に対して太陽電池特性のシミュレーションを行い、バンドアライメントが特性に与える影響を調べた。

【実験】HTL 材料の候補として Cu₂O ($IP = 5.1 \text{ eV}$)、NiO ($IP = 5.0 \text{ eV}$)、HN-D2 ($IP = 4.82 \text{ eV}$) を使い、Automat for simulation of heterostructures (AFORS-HET v2.5) によるシミュレーションを行った⁵⁾。はじめに、接合時のバンドアライメントが明確になるよう、HTL 材料の膜厚を 100 nm、n-BaSi₂ の膜厚を 200 nm に設定して計算した。次に、AM1.5G 照射下の J - V 特性を計算し、太陽電池特性を評価した。実際に作製することを想定して HTL 材料の膜厚を 10 nm、n-BaSi₂ の膜厚を 500 nm に設定した。Cu₂O については、アクセプタ濃度 (N_a) を $10^{18} - 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ で変調し、バンドアライメント、 J - V 特性を導出した。

【結果・考察】Figure 1 に Cu₂O/BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池の J - V 特性を示す。 N_a の上昇とともに短絡電流密度は増加した。これは N_a の上昇とともに、ヘテロ界面での価電子帯バンド不連続にともなうトンネル障壁が薄くなり、ホールの輸送が促進されたからと考えられる。そして、 N_a が最大 (10^{21} cm^{-3}) の時に、最も高い変換効率 (3.5%) が得られた。Figure 2 に NiO や Cu₂O、HN-D2 を HTL として用いた BaSi₂ ヘテロ接合型太陽電池の J - V 特性を示す。各構造の太陽電池における開放電圧はほぼ同じであった。しかし、短絡電流密度の値に顕著な違いが見られ、短絡電流密度が最も大きい HN-D2/BaSi₂ で最も高い変換効率 (15.7%) が得られた。これは HN-D2 と n-BaSi₂ とのイオン化ポテンシャルの差が最も小さく、ホールが輸送されやすいからだと考えられる。以上から、本研究で検討した HTL 材料の中では、HN-D2 が BaSi₂ 太陽電池に最適な HTL 材料と言える。今後は、さらに他の HTL 材料を用いてシミュレーションを行い、最適な HTL 材料の探索を進める。

【参考文献】

- 1) T. Suemasu and D. B. Migas, Phys. Status Solidi A **219**, 2100593 (2022).
- 2) T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 023001 (2017).
- 3) R. Du *et al.*, ACS Appl. Mater. Inter. **16**, 52595 (2024).
- 4) Y. Yamashita *et al.*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **230**, 111181 (2021).
- 5) R. Varache *et al.*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **141**, 14 (2015).

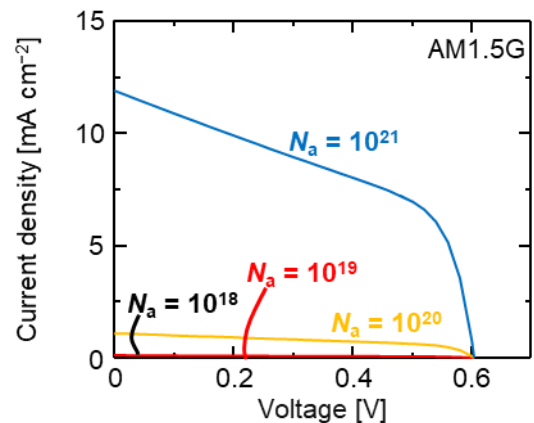


Figure 1 J - V characteristics of the Cu₂O/BaSi₂ hetero-junction solar cell under AM1.5G illumination.

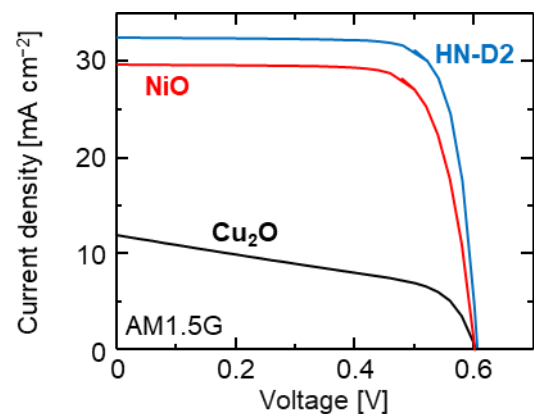


Figure 2 J - V characteristics of HTL/BaSi₂ hetero-junction solar cell with different HTL materials under AM1.5G illumination.