

# 薄膜太陽電池材料 $\text{BaSi}_2$ の光・電子物性に迫る

## ——高光吸収・低トラップ電子構造への期待

今井基晴 (物質・材料研究機構 IMAI.Motoharu@nims.go.jp)

梅澤直人† (物質・材料研究機構 umezawa.naoto@gmail.com)

地球温暖化の影響から、枯渇する化石燃料を使用しない持続可能な再生可能エネルギーの重要性が再認識されている。太陽エネルギーを有効利用し発電する太陽電池は将来を期待されている再生可能エネルギー源の一つである。現在使用されている太陽電池の大部分を結晶 Si 太陽電池が占めているが、結晶 Si 太陽電池には二つの制限がある。一つは、Si のバンドギャップ (1.1 eV) が、単接合太陽電池が理論的最大変換効率 (33.16%) を示す理想的なバンドギャップ (1.34 eV) より少し小さいことである。もう一つは、Si の光吸収係数  $\alpha$  が小さいために光吸収層として 150–250  $\mu\text{m}$  程度の厚さが必要となるため、Si の消費量が多くなることである。これらの制限を克服するために、様々な物質を用いた薄膜太陽電池の作成が検討されてきた。薄膜太陽電池は、厚さが結晶 Si 電池の 1/100 程度であることから、省資源、大面積なものが容易に作成可、薄いためにフレキシブルになり用途が広がる、という利点を持つ。近年、高効率薄膜太陽電池材料としてバリウム・ダイシリサイド  $\text{BaSi}_2$  が注目されている。 $\text{BaSi}_2$  は、(1) 地殻埋蔵量の豊富な元素からなる (Si: 地殻存在率第 2 位, Ba: 14 位)、(2) 1.1–1.3 eV のバンドギャップを持つ、(3) バンドギャップ以上で  $\alpha$  が急激に増加する、(4) 少数キャリアの拡散長が長い、(5) 不純物ドーピングにより n 型、p 型試料が作製できる、等の薄膜太陽電池材料として有望な性質を持っている。 $\text{BaSi}_2$  ホモ接合太陽電池のシミュレーションでは約 25% の変換効率が得られている。結晶 Si 太陽電池、薄膜太陽電池 ( $\text{Cu(In, Ga)Se}_2$ ,  $\text{CdTe}$ ,  $\text{Cu}_2\text{ZnSn(S, Se)}_4$ ) の変換効率はそれぞれ 26.7, 21.7, 21.5, 12.6% であることから、 $\text{BaSi}_2$  太陽電池はこれらと同等またはそれ以上の変換効率を示すと期待できる。

現在、p- $\text{BaSi}_2$ /n-Si ヘテロ接合太陽電池が作製され約 10% の変換効率を示しているが、今後ホモ接合太陽電池の作製により更なる変換効率の向上が期待されている。

最近、我々は  $\text{BaSi}_2$  が上記のような太陽電池材料として有望な性質を示す理由について第一原理計算を用いた考察を行った。この  $\text{BaSi}_2$  は 4 個の Si 原子が四面体を作るという特徴的な結晶構造を持つ。無機化学では  $\text{BaSi}_2$  はジントル (Zintl) 相として知られており、その結晶構造はジントル-クレム (Zintl-Klemm) 則によって説明されている。それによると、Ba 原子の二個の価電子が Ba 原子から二つの Si 原子にそれぞれ 1 個ずつ供給され、その結果、5 個の価電子を持った Si 原子がオクテット則に従って三つの Si 原子と結合していることによって、この結晶構造は実現されていると考えられている。我々は、Ba から Si への電荷移動、Si 原子間共有結合の存在を確かめ、Zintl-Klemm 則が成立していることを確かめた。また、 $\text{BaSi}_2$  の電子状態は  $\text{Si}_4$  四面体と Ba 原子の電子状態の重ね合わせで概ね理解できることを明らかにし、 $\text{BaSi}_2$  の分子軌道ダイアグラムを構築した。 $\text{BaSi}_2$  の光吸収係数が間接遷移型半導体にも関わらず大きい理由は、間接遷移の 0.1–0.3 eV 上に複数の直接遷移が存在していることを明らかにした。更に、 $\text{BaSi}_2$  の主要な点欠陥である Si 空孔はバンドギャップ内に深い準位を作るがキャリアをトラップしにくいこと、固有欠陥がキャリアの生成には寄与せず pn 接合の形成に必要な不可欠な両極性ドーピングが可能であることを示した。

このように本研究では  $\text{BaSi}_2$  が持つ幾つかの太陽電池材料として有望な物性の起源について明らかにした。今後、本研究の成果が、太陽電池の変換効率の向上の一助となること期待する。

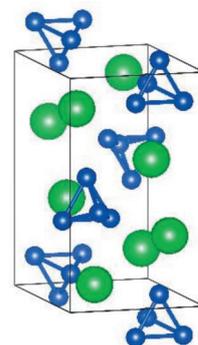
### —Keywords—

#### ジントル相:

アルカリ金属、アルカリ土類金属等の電氣的陽性の強い元素と Si のように比較的弱い電氣的陰性の元素との化合物で、以下のようなジントル-クレム (Zintl-Klemm) 則を満たす結晶構造をつくる化合物群。Zintl-Klemm 則とは、電氣的に陽性な原子から陰性の原子に電子が供給され、それぞれ陽イオン原子と陰イオン原子となり、陰イオン原子はオクテット則を満たすように共有結合によって分子グループや網目状ネットワークを形成し、その空隙に陽イオンが配置すること。

#### オクテット則:

原子が結合を作る際、その原子の価電子数が 8 個になるように配位数を決めること。この場合、原子の価電子数を  $N$  とすると配位数は  $(8-N)$  になる。そのため  $(8-N)$  則とも呼ばれる。14 族元素、15 族元素、16 族元素の場合、価電子数は 4, 5, 6 なので、配位数はそれぞれ、4, 3, 2 になる。



† 現所属: サムスン電子