

第一原理計算による (Sr,Ba)(Si,Ge)₂ 薄膜太陽電池の研究

First-principles studies on (Sr,Ba)(Si,Ge)₂ for thin-film solar cell applications

物材機構¹, Mukesh Kumar¹, [○]梅澤 直人¹, 今井 基晴¹
NIMS¹, Mukesh Kumar¹, [○]Naoto Umezawa¹, Motoharu Imai¹
E-mail: umezawa.naoto@nims.go.jp

太陽電池の効率向上に向けて、光吸収係数の大きい材料の開発が課題となっている。本研究では、太陽電池材料として期待されている BaSi₂ に加え、関連の SrSi₂, BaGe₂, SiGe₂ の密度汎関数法計算を実施することで、バンド構造と光吸収係数の関係を調べた。ハイブリッド交換相関汎関数を用いた計算から得られた格子定数やバンドギャップの値は実験値と良く一致し、間接ギャップをもつ半導体であることが確認された。価電子帯は Si(Ge)の *p* 軌道、伝導帯は Ba(Sr)の *d* 軌道で形成されており、この *d* 軌道の影響で伝導帯の分散が小さくなることが理解された。更に、平坦なバンドが形成されることで直接遷移が促進されるために、光吸収係数が大きくなることが明らかとなった[1]。発表では(Sr,Ba)(Si,Ge)₂ と他の太陽電池材料の光吸収係数も比較する。

[1] Mukesh Kumar, Naoto Umezawa, and Motoharu Imai, *J. Appl. Phys.* **115**, 203718 (2014).