3D 光学・電気シミュレーションによる n^+-AZO/p-$BaSi_2$ ヘテロ接合太陽電池のデバイス設計および動作実証

Modeling and demonstration of n^+-AZO/p-$BaSi_2$ heterojunction solar cells by 3D-opt&electrical simulations

筑波大 [1], デルフト工科大 [2], °山下 雄大 [1], Carlos M. Ruiz Tobon[2], Rudi Santbergen[2], Olindo Isabella[2], 都甲 薫 [1], 末益 崇 [1]

Univ. Tsukuba [1], TU Delft [2], °Yudai Yamashita [1], Carlos M. Ruiz Tobon[2], Rudi Santbergen[2], Olindo Isabella[2], Kaoru Toko [1], Takashi Suemasu [1]

E-mail: bk201311068@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】 新規薄膜太陽電池材料として $BaSi_2$ に注目している。$BaSi_2$ は地殻中に豊富に存在する元素で構成される半導体でありながら、光吸収係数（3×10^4 cm^{-1}@1.5 eV）と少数キャリア拡散長（10 μm）がどちらも大きいユニークな材料であり、禁制帯幅（1.3 eV）も太陽電池に適している [1]。これまでに、界面欠陥や膜内欠陥 [2,3] を低減させることで光吸収層の高品質化 [4-6] を行い、$BaSi_2$-pn ホモ接合太陽電池の動作を実証した [7]。しかしホモ接合太陽電池は、表面の n 型高濃度層である n^+-$BaSi_2$ による寄生吸収が大きいため、下層の光吸収層から得られる光電流が著しく制限される [8]。光吸収係数の大きい $BaSi_2$ を表面層に用いる限り、この寄生吸収は避けられない。そこで本研究では、表面材料を Al-doped ZnO（AZO）に変えた、n^+-AZO/p-$BaSi_2$ ヘテロ接合太陽電池（HJSCs）についてシミュレーションをベースに設計した。さらに、その構造による太陽電池動作を初めて実証した。

【計算・実験手法】 本研究では、GenPro4 および ASA-7 を用いた 3D 光学・電気シミュレーション [9,10] により、n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs を設計した。試料構造の概略図を Fig. 1 に示す。まず、実験的に測定した各層の *n-k* データを用い、光吸収スペクトルを計算した。反射率を低減させる目的で、3D テクスチャ構造を Si 基板の表面に導入した場合も検討した。次に種々の電気特性を用いて太陽電池特性を計算した。最後に、実験的に同構造の太陽電池を作製した。MBE 装置を用いて p^+-Si（111）基板上に B-doped p^+-$BaSi_2$ を 20 nm、B-doped p-$BaSi_2$ を 450 nm エピタキシャル成長した後、*in-situ* で a-Si を堆積した。さらに表面に窓層として AZO、ZnO を、裏面に電極として Al をスパッタ堆積した。太陽電池特性は、AM1.5G 条件下で直径 1 mm のマスクを用いて測定した。

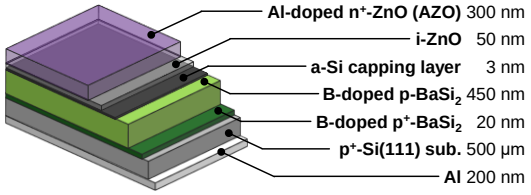

Fig. 1 Schematic image of n^+-AZO/p-$BaSi_2$ heterojunction solar cells.

【結果・考察】 Fig. 2（a-c）に、光吸収スペクトルを示す。p-$BaSi_2$ 光吸収層内での光吸収はホモ接合時と比べて光電流が約 10 mA/cm^2 増加し、表面テクスチャ構造を用いると最大で 30.23 mA/cm^2 に達した。短絡電流 J_{SC} はこの効果で著しく増加し、変換効率 η は最大で 18.1%と計算された（Fig. 2（d））。これらは禁制帯幅が大きい ZnO を用いたことで 375 nm 以上の長波長光がすべて表面層を透過した為と考えられる（Fig. 2（e））。また、中間に i-ZnO バッファ層を挿入することで ZnO/$BaSi_2$ 界面における再結合が抑制され、十分な開放電圧 V_{OC} が得られた。以上より本構造は、$BaSi_2$ の光吸収層としての特性を十分に発揮できる構造であるといえる。また、必要な $BaSi_2$ の伝導型が 1 種類で済み、他の成膜法への応用や産業応用が容易である。

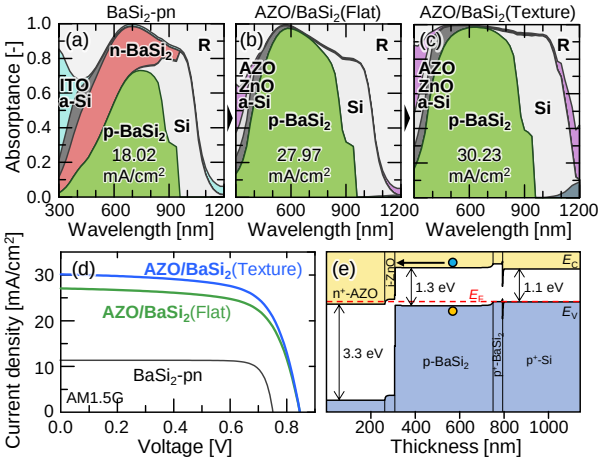

Fig. 2 Absorption spectra of (a) $BaSi_2$-pn SCs, (b) n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs, and (c) n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs with texture surface. (d) *J-V* characteristics and (e) band alignment of n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs simulated by ASA-7.

Fig. 3 に作製した試料の太陽電池特性を示す。AM1.5G 照射時において、J_{SC} = 3.7 mA/cm^2, V_{OC} = 0.05 V、η = 0.04%が得られた。*IQE* は $BaSi_2$ の吸収端から立ち上がり、最大で約 30%を達成した。以上より、n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs の動作を初めて実証した。実験値と計算値の差は a-Si 層へのスパッタダメージに起因すると考えられ、水素照射による改善を現在検討している。

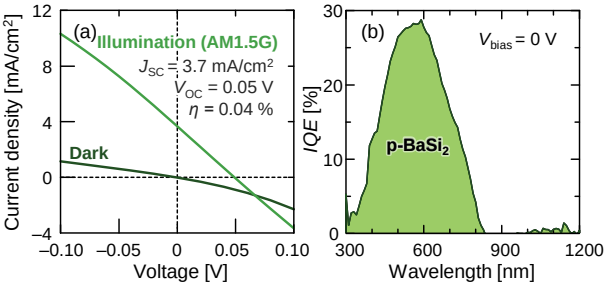

Fig. 3 (a) *J-V* characteristics and (b) *IQE* spectrum of n^+-AZO/p-$BaSi_2$ HJSCs. The solar cell operation was demonstrated for the first time.

1) T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 023001 (2017).
2) Y. Yamashita *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 025501 (2018).
3) Y. Yamashita *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **57**, 075801 (2018).
4) Y. Yamashita *et al.*, Appl. Phys. Express **12**, 055506 (2019).
5) Y. Yamashita *et al.*, J. Appl. Phys. **126**, 215301 (2019).
6) Y. Yamashita *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, SFFA09 (2020).
7) K. Kodama *et al.*, Appl. Phys. Express **12**, 041005 (2019).
8) Y. Yamashita *et al.*, JSAP Spring Meeting (2020).
9) R. Santbergen *et al.*, IEEE J. Photovolt. **7**, 919 (2017).
10) M. Zeman *et al.*, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **119**, 94 (2013).

© 2020年 応用物理学会