

# 結晶学および計算科学による Si と Na の反応機構の解明

Interaction of sodium atoms with defects in silicon solar cells

studied by crystallographic analysis assisted by theoretical calculations

<sup>1</sup> 東北大金研, <sup>2</sup> 名大工 <sup>○</sup>大野 裕<sup>1</sup>, 森戸 春彦<sup>1</sup>, 横井達也<sup>2</sup>

<sup>1</sup>IMR, Tohoku Univ., <sup>2</sup>GSE, Nagoya Univ. <sup>○</sup>Yutaka Ohno<sup>1</sup>, Haruhiko Morito<sup>1</sup>, Tatsuya Yokoi<sup>2</sup>

E-mail: yutakohno@imr.tohoku.ac.jp

【はじめに】大規模太陽光発電施設において、太陽電池モジュールの接地されたフレームとセルとの間の高電位差に起因する発電効率の低下（電圧誘起劣化；PID）の問題が顕在化している。PIDの挙動はセルの材料や構造によって異なるが、その起源の一つにモジュール表面のカバーガラスなどに存在する Na 不純物がある。p 型電池では、運用初期に SiN<sub>x</sub>/Si 界面に蓄積された Na 不純物がやがてセルに侵入して積層欠陥に析出し p/n 接合層を局所的に貫く導電経路となるため効率が低下すると考えられている[1]。一方 n 型電池では、Na 不純物は積層欠陥に析出せず p/n 接合部に広範囲に集積して欠陥準位を形成し、さらに集積が進むと Na の集合体を形成して SiN<sub>x</sub> 膜と p/n 接合部を破壊するため効率が低下すると考えられている[2]。劣化は部分的に可逆的で、無電圧や逆電圧の印加状態でモジュールを放置または加熱すると回復し、劣化・回復ともにその度合いは光照射により変化することが産総研などから報告された。これらの結果は、Na 原子の移動・集積過程が Si の極性やフェルミ準位、少数キャリア密度などに依存することを示唆する。本稿では、結晶学と計算科学の観点から Na の本質的な移動・集積機構、ひいては PID との相関を考察する。

【Na 移動のドーピングレベル依存性】 PID モジュール中の Na 分布はモジュール構造（ガラス、封止材）、セル構造（基板、極性、キャリア濃度）、環境（雰囲気、電圧、光照射の条件）などに依存するため、セル化・モジュール化していない Si 結晶（積層欠陥や転位を含む）に Na を直接添加してその移動・集積過程を評価した。反応性の高い劇毒物である Na は Si 結晶育成中の添加や通常の蒸着・熱処理による添加が困難であるため、Na フラックス結晶育成法[3]を応用して Si 結晶に直接添加した。TEM 解析より積層欠陥への Na 集積が示唆された。集積によるエネルギー利得はドーピングレベルに依存し、p 型 Si で 10mJ/m<sup>2</sup>、n 型 Si でほぼ 0 mJ/m<sup>2</sup> と見積もられた[4]。この依存性は、純粋な Si 結晶および積層欠陥を含む Si 結晶における Na と Si の結合エネルギーの第一原理計算で説明された[4]。当日は、Na 添加した Si 表面の観察による Si 欠陥と Na の反応性に関するデータも踏まえて、PID の極性依存性を議論したい。

【謝辞】本研究は JSPS/科研費（No. 18K05009）および JST/CREST（No. JPMJCR17J1）の支援による。また、本研究にご協力頂いた大平圭介先生（北陸先端大）に感謝致します。

【参考文献】 [1] V. Naumann et al., Sol. Energy Mater. Sol. Cells **120** (2014) 383., [2] K. Ohdaira et al., Appl. Phys. Express **12** (2019) 064004, [3] H. Morito et al., J. Cryst. Growth **355** (2012) 109, [4] Y. Ohno et al., Appl. Phys. Express **11** (2018) 061303.