第一原理計算を活用した n 型 $BaSi_2$ との接合ペア材料の探索

Search for junction-pair materials for n-type $BaSi_2$ by first-principles calculations

山梨大クリスタル研　°原 康祐
CCST, Univ. of Yamanashi　°Kosuke O. Hara
E-mail: khara@yamanashi.ac.jp

【はじめに】n 型 $BaSi_2$ は太陽電池の光吸収層に適した半導体であるが、電子親和力が小さいために、pn ヘテロ接合太陽電池の形成に適した p 型半導体が少ない。n-$BaSi_2$ との接合で高効率が期待できる p 型半導体の条件は報告されており、イオン化ポテンシャル(IP)が概ね 4.0 から 5.1 の範囲であれば高効率なヘテロ接合太陽電池となりうることが分かっている [1]。SnS (IP = 4.7 eV)はこの条件を満たす p 型半導体であるため、SnS/$BaSi_2$ 接合を作製したところ、界面反応のため効率の良い太陽電池にならなかった [2]。そこで、$BaSi_2$ と反応を起こさない新たな n-$BaSi_2$ の接合ペア材料が望まれる。本研究では、データベース探索と第一原理計算により接合ペアの新しい候補を見出すことを目的として研究を行った。

【方法】まず、第一原理計算結果のデータベース “Materials Project” [3]において、(1) Ba を含む二、三元系化合物、(2) 毒性の低い Ag 以上の地殻中存在度の元素で構成、(3) 0.7 ≤ バンドギャップ (E_g) ≤ 2.0、(4) 生成エネルギーが負、(5) $BaSi_2$ と反応しない、という 4 つの条件でスクリーニングを行った。次に、絞り込まれた物質に対して、QUANTUM ESPRESSO による第一原理計算を行い、IP を計算し、n-$BaSi_2$ の接合ペア材料として適当か検討を行った。

【結果と考察】まず、Materials Project において Ba を含む二元系でスクリーニングを行ったところ、六方晶 BaH_2 が候補物質として絞り込まれた。しかし、この物質は準安定であり合成は困難である。次に、Ba を含む三元系でスクリーニングを行った。その結果、条件を満たす 10 コの化合物が見つかった: LiBaSb, LiBaP, NaBaP, Ba_3SbI_3, Ba_2PCl, Ba_8P_5Br, $Ba(MgP)_2$, $Ba(MgSb)_2$, $Ba(NaSi_2)_2$, Ba_4SiP_4。このうち、結晶構造が比較的単純な $Ba(MgSb)_2$ について第一原理計算を行った。(11-20)面を表面とする結晶格子 5 層分のスラブモデルについて、GGA により静電ポテンシャル分布を算出し、IP の計算に用いた。HSE06 による E_g は 1.4 eV であり、これを利用して価電子帯端のエネルギー値を補正した。得られた IP は 4.4 eV であり、$BaSi_2$ の接合ペア材料としての基準を満たしている。右図にバンド端エネルギーの比較を示すが、$BaSi_2$ と Type II のヘテロ接合形成が期待できる。以上により、$BaSi_2$ との接合ペアの新たな候補材料 [$Ba(MgSb)_2$]を見出した。

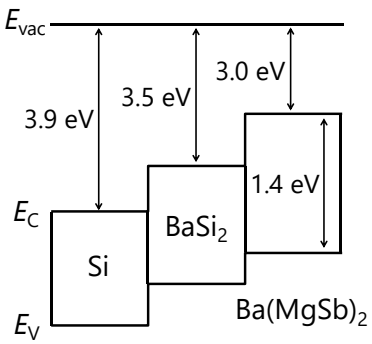

Figure 1 Calculated band edge energies of Si, $BaSi_2$, and $Ba(MgSb)_2$.

【参考文献】[1] K. Takahashi, et al., JJAP **56**, 05DB04 (2017). [2] K. O. Hara, et al., ICMAT2019, Singapore, (2019). [3] A. Jain, et al., APL Mater. **1**, 011002 (2013).