

BaSi₂ 太陽電池に適した電子・正孔輸送層のデータベース駆動型材料探索

Database-driven material search for electron/hole transport layers of BaSi₂ solar cells

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】BaSi₂は太陽電池の光吸収層に適した半導体である。高い光吸収係数や長い小数キャリア拡散長を持つとともに資源豊富な元素から構成されるため、安価で高効率な太陽電池を実現できると期待できる。しかし、BaSi₂に適した太陽電池デバイス構造は分かっておらず、pn ホモ接合だけでなく様々なヘテロ接合が検討されている。中でも、BaSi₂を正孔輸送層(HTL)、電子輸送層(ETL)となる2つのワイドギャップ半導体で挟む構造とすることで、デバイスシミュレーションにより理論限界効率33%が得られている [1]。しかし、HTL/ETLにどの材料を用いれば良いか分かっていない。そこで、本研究では、最適な材料を見つけることを目的として、Materials Project データベースにおいて材料探索を行った。

【方法】(1)BaSi₂との化学反応性、(2)格子整合、(3)伝導帯・価電子帯準位を主な評価基準として材料探索を行った。まず、Materials Project データベースにおいて、バンドギャップが0.5 eV以上で資源豊富な元素から成る二・三元系化合物を洗い出した。そして、Interface Reactions App [2]によりBaSi₂と化学反応しない物質に絞り込んだ。次に、二次元格子面積を用いるZurとMcGillの方法 [3]により格子整合しない物質を除外した。最後に、QUANTUM ESPRESSOを用いた第一原理計算により伝導帯・価電子帯準位を求め、デバイスシミュレーション [1]から高効率が期待できる材料に絞り込んだ。伝導帯・価電子帯準位の計算には、GGA近似によるスラブモデル計算とHSEハイブリッド汎関数によるバンドギャップ計算を利用した。

【結果と考察】化学反応性と格子整合を基準として絞り込むことで、81の二元系物質と75の三元系物質が見つかった。第一原理計算で求めた伝導帯・価電子帯準位により絞り込むことで、最終的にFigure 1に示す5つのHTL候補材料と2つのETL候補材料が見つかった。これらの物質は、これまでBaSi₂とのヘテロ接合に検討されてこなかったものであるが、化学的に安定で格子整合し、高い発電効率を示すヘテロ接合形成が期待できる。

【参考文献】原、応物理学術講演会、11p-Z01-5、2020年9月。[2] W. D. Richards, *et al.*, *Chem. Mater.* **28**, 266 (2015). [3] A. Zur and T. C. McGill, *J. Appl. Phys.* **55**, 378 (1984).

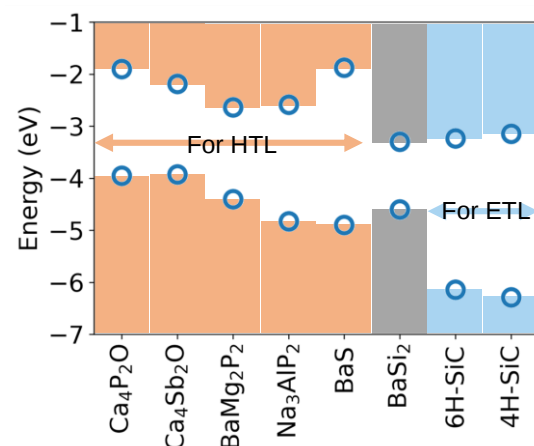


Figure 1 Calculated band alignment of final HTL/ETL candidates together with experimental BaSi₂ data.