

As-doped n-BaSi₂ 膜の水素パッシベーションによる分光感度向上と第一原理計算によるミクロ構造考察

Photoresponsivity enhancement of H passivated As-doped n-BaSi₂ films and its mechanisms by ab initio studies

筑波大¹, 名古屋大², ベラルーシ大³, °青貫 翔¹, 山下 雄大¹, Z. Xu¹, 後藤 和泰², 都甲 薫¹, 宇佐美 徳隆², D. Migas³, 末益 崇¹

Univ. Tsukuba¹, Nagoya Univ.², Beralusian State Univ. Info. Radio.³, °Sho Aonuki¹, Yudai Yamashita¹, Zhihao Xu¹, Kazuhiro Gotoh², Kaoru Toko¹, Noritaka Usami², Dmitri Migas³, Takashi Suemasu¹

Email: s1920296@s.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

本研究では薄膜太陽電池材料として BaSi₂ に注目している^[1]。BaSi₂ は資源が豊富な元素で構成される半導体であり、太陽電池に適した禁制帯幅 (1.3 eV) を有する。また、大きい光吸収係数 ($3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ @ 1.5 eV) と優れた少数キャリア拡散長 (10 μm) を両立している。近年、BaSi₂ ホモ接合型太陽電池の世界初動作に成功した。しかし、その変換効率は 0.28% と小さい^[2]。太陽電池の基本構造は pn 接合であるため、n-BaSi₂ 光吸収層の光学特性を向上させる必要がある。n 型光吸収層の候補として基板温度による伝導型制御と高分光感度を達成している As-doped n-BaSi₂ に着目した^[3]。先行研究では、MBE 成長後に原子状水素を供給することで undoped BaSi₂ 膜の光学特性が劇的に向上したことが報告されている^[4]。本研究では、As-doped n-BaSi₂ 膜に原子状水素を照射することで更なる分光感度向上を目的とした。

【実験】

MBE 法により Si (111) 基板上に As-doped n-BaSi₂ 膜を 500 nm エピタキシャル成長した。RF プラズマによって生成した原子状水素を照射した。原子状水素供給時間 ($t_{\text{BaSi:H}}$) を 0 – 30 min に変調した。表面には BaSi₂ のパッシベーション膜である a-Si を *in situ* で 3 nm 堆積した。試料の結晶性をラマン分光法、光学特性を分光感度測定、 μ -PCD により評価した。さらに、第一原理計算により水素原子のサイトと欠陥準位の形成を調査した。

【結果・考察】

Fig. 1 に分光感度スペクトルを示す。 $t_{\text{BaSi:H}} = 1 - 10 \text{ min}$ で分光感度は最大となり、 -0.3 V 印加時に 2.9 A/W を達成した。これは原子状水素を供給していない試料の 6 倍の値である。 μ -PCD 測定から、 $t_{\text{BaSi:H}} = 10 - 20 \text{ min}$ でキャリア寿命が最大となり、分光感度向上がキャリア寿命向上で説明できるといえる。Fig. 2 に BaSi₂ 中の As および H 原子のサイトと欠陥準位の関係を示す。第一原理計算の結果から、As-doped BaSi₂ における主要な欠陥は格子間 As であり、再結合中心として働く欠陥準位を生成することが示唆された。ここに、Fig. 2 に示す位置に H 原子を 1 つ付随させると E_F より低エネルギー側に欠陥準位を形成することが明らかとなった。この欠陥準位は電子で満たされており、再結合中心として機能しないため不活性化したといえる。原子状水素照射によるこれらの機構を第一原理計算により解明した。

【参考文献】

- [1] T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. **50**, 023001 (2017).
- [2] K. Kodama *et al.*, Appl. Phys. Express **12**, 041005 (2019).
- [3] S. Aonuki *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **59**, SFFA01 (2020).
- [4] Z. Xu *et al.*, Phys. Rev. Mater. **3**, 065403 (2019).

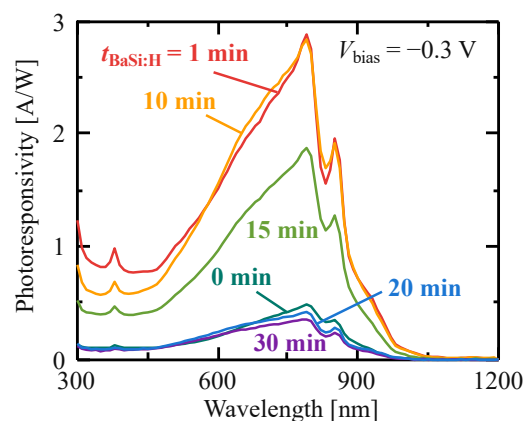


Fig. 1 Photoresponse spectra of As-doped BaSi₂ treated with different $t_{\text{BaSi:H}}$ of 0 – 30 min under a bias voltage of -0.3 V .

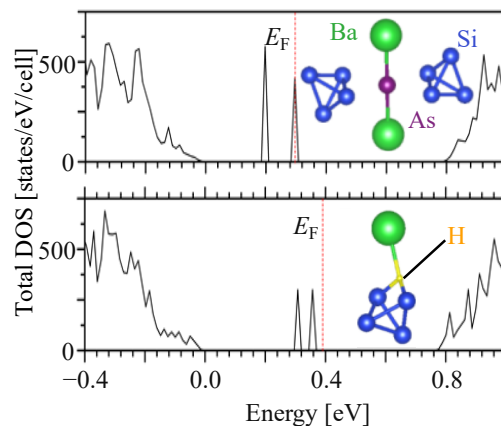


Fig. 2 Total DOS of As-doped BaSi₂ and the incorporation of one H. Zero on the energy scale corresponds to the top of the valence band. The vertical dashed line stands for the Fermi level.