

第一原理計算によるBaSi₂太陽電池の接合パートナー探索

原 康祐

山梨大学クリスタル科学研究センター

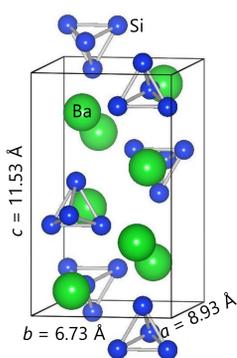
E-mail khara@yamanashi.ac.jp, Tel 055-220-8614, Fax 055-220-8270



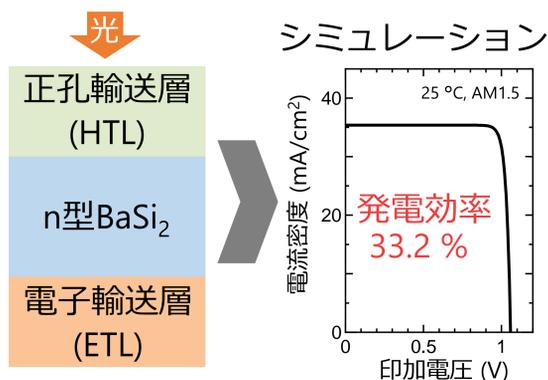
はじめに

BaSi₂の特長

- ☐ 太陽電池に適したバンドギャップ (1.3 eV)
- ☐ 高い光吸収係数 ($> 10^4 \text{ cm}^{-1}$ for $h\nu > E_g$)
K.Toh, et al., Jpn. J. Appl. Phys. 50, 068001 (2011).
- ☐ 地殻中に豊富な元素 (Ba: 第14位, Si: 第2位)



理想的な太陽電池構造



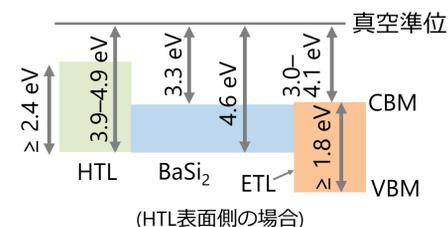
K. O. Hara, PVSEC-30, OP-T6-699, Jeju, Korea, 2020.

研究目的

HTL/ETLに最適な材料を見つけ出すこと

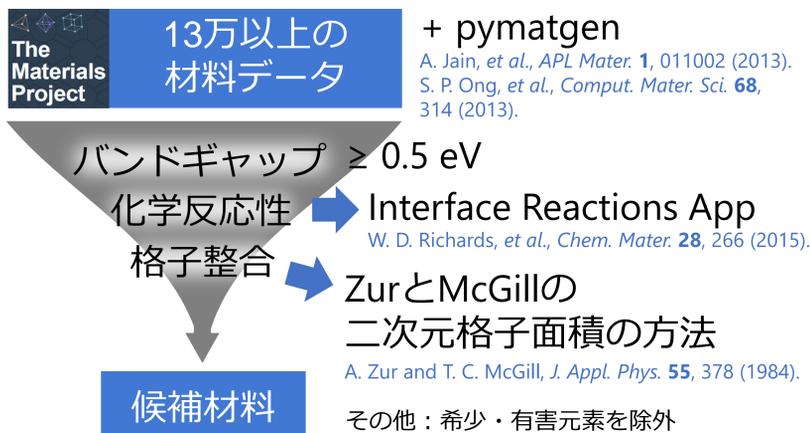
<探索条件>

- ① バンドアライメント
- ② 化学反応性
BaSi₂との界面が安定
- ③ 格子整合
BaSi₂との界面に欠陥が少ない



材料探索フロー

① Materials Project



② 文献調査

- ☐ 空気中で不安定な物質を除外
- ☐ 合成困難な準安定物質を除外
- ☐ CBM、VBM準位が探索条件を満たすか判定

4H、6H-SiCがETL候補

③ 第一原理計算@京大スパコンシステムB

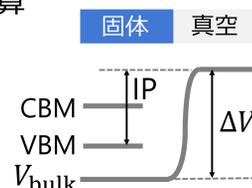
QUANTUM ESPRESSOコード
P. Giannozzi, et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009).

ノルム保存擬ポテンシャル、GGA PBEsol汎関数
J. P. Perdew, et al., Phys. Rev. Lett. 100, 136406 (2008).
→ バルク構造最適化・バンドギャップ (E_g^{GGA}) 計算
→ スラブモデル構築・静電ポテンシャル変化 (ΔV) 計算

HSE汎関数 → バンドギャップ (E_g^{HSE}) 計算
J. Heyd, et al., J. Chem. Phys. 118, 8207 (2003).

$IP = \Delta V - (E_{VBM} - V_{bulk})$

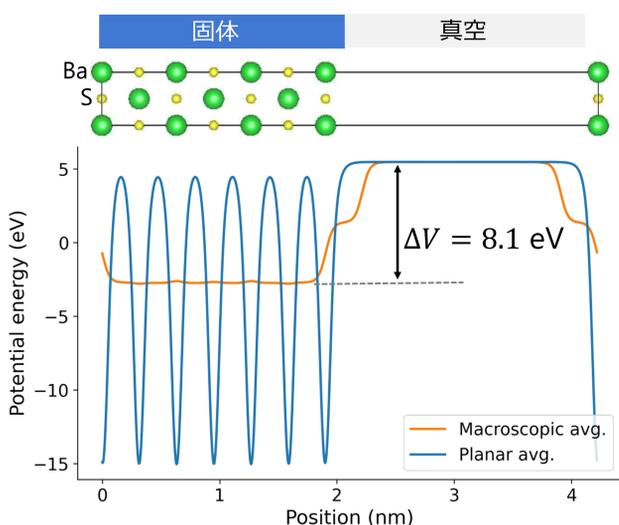
$E_{VBM} = E_{VBM}^{GGA} + \frac{1}{2} E_g^{GGA} - \frac{1}{2} E_g^{HSE}$



結果と考察

スラブ計算結果

BaS(岩塩構造)の例



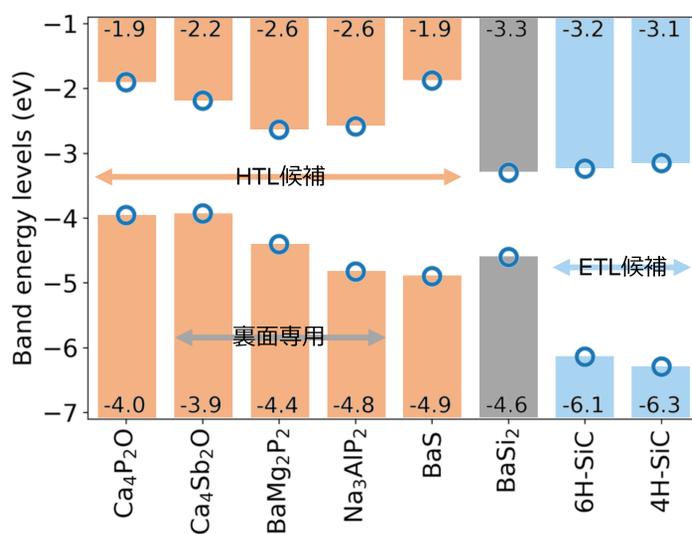
$$E_{VBM} = E_{VBM}^{GGA} + \frac{1}{2} E_g^{GGA} - \frac{1}{2} E_g^{HSE}$$

$$= 6.0 + \frac{1}{2} \cdot 2.0 - \frac{1}{2} \cdot 3.0 = 5.5 \text{ eV}$$

$$IP = \Delta V - (E_{VBM} - V_{bulk})$$

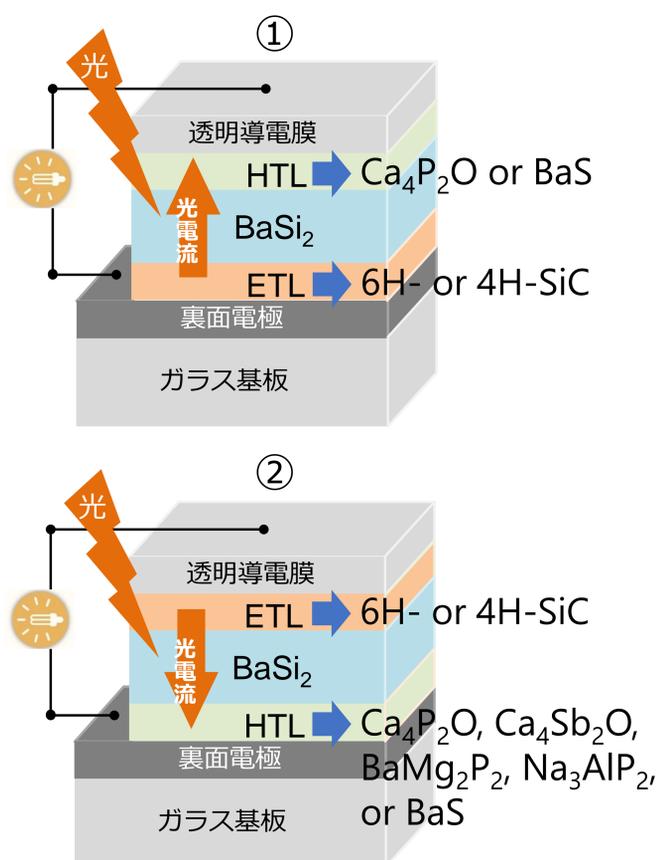
$$= 8.1 - (5.5 - 2.3) = 4.9 \text{ eV}$$

HTL/ETL候補材料



接合	格子不整合度 (%)
Ca ₄ P ₂ O(001)//BaSi ₂ (001)	0.18
Ca ₄ Sb ₂ O(001)//BaSi ₂ (100)	1.4
BaMg ₂ P ₂ (10-10)//BaSi ₂ (100)	0.72
Na ₃ AlP ₂ (101)//BaSi ₂ (101)	0.92
BaS(100)//BaSi ₂ (001)	0.81
6H-SiC(0001)//BaSi ₂ (100)	0.68
4H-SiC(0001)//BaSi ₂ (100)	0.68

設計デバイス



まとめ

データベース探索と第一原理計算により、BaSi₂太陽電池に最適な電子・正孔輸送層の材料を見出すことに成功した。

謝辞：本研究の一部は京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータを利用して実施した。