

氏名	Deng Tianguo		
学位の種類	博士（工学）		
学位記番号	博甲第 8958 号		
学位授与年月日	平成 31年 3月 25日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	数理物質科学研究科		
学位論文題目	Carrier transport properties in BaSi <sub>2</sub> and structure design of BaSi <sub>2</sub> solar cells (BaSi <sub>2</sub> 中のキャリア輸送と BaSi <sub>2</sub> 太陽電池の構造設計)		
主査	筑波大学教授	博士(工学)	末益 崇
副査	筑波大学教授	Ph.D.	佐野 伸行
副査	筑波大学教授	理学博士	関口 隆史
副査	筑波大学准教授	博士(理学)	櫻井 岳暁
副査	物質・材料研究機構	理学博士	今井 基晴

## 論 文 の 要 旨

審査対象論文は、新規薄膜太陽電池材料として期待される BaSi<sub>2</sub> について、これまで研究が行われていなかった Si(001)基板上にエピタキシャル成長した BaSi<sub>2</sub> 膜の電子およびホールの輸送特性を調べ、さらに、Si(001)基板上に p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si ヘテロ接合型太陽電池を作製し、従来から研究が行われてきた Si(111)基板上の太陽電池特性と比較することで、BaSi<sub>2</sub> 太陽電池の Si(001)基板上への適用可能性を明確にすることを目的とするものである。第 1 章では、本論文の背景として太陽電池の現状と課題が述べられ、太陽電池用新材料としての BaSi<sub>2</sub> の位置づけがなされ、本論文の目的が示されている。現在、太陽電池市場の 90%が結晶 Si 系太陽電池で占められているが、結晶 Si は、光吸収係数が小さく、また、禁制帯幅が最適な値からズレていることから、低コスト化と高効率化を同時に達成することが難しく、エネルギーのコストパフォーマンスが良くないことが問題となっていると説明があった。また、これらの問題を解決するために、化合物太陽電池材料(CIGS, CdTe 等)に関する様々な研究がなされていることが述べられている。これらの材料は、光吸収係数が大きいため、結晶 Si 太陽電池の光吸収層と比べて数 10 分の 1 から 100 分の 1 程度の膜厚に抑えることが可能であるが、希少金属や毒性のある元素を使用しているため、大量生産が難しいことが課題でもある。このような背景の中、太陽電池に適した禁制帯幅をもち、資源が豊富に存在する Si と Ba を用いた BaSi<sub>2</sub> というシリサイド半導体に着目したことが述べられている。

第 2 章では、Si(111)および Si(001)基板上にエピタキシャル成長した n-BaSi<sub>2</sub> および p-BaSi<sub>2</sub> 膜について、キャリア移動度の温度特性を 50K から 300K の温度範囲で測定し、キャリアの散乱機構について議

論している。

第3章では、n-Si(001)基板に異方性エッチングを施すことで、Si{111}面からなるテクスチャ構造を作製し、そのような基板の上に p-BaSi<sub>2</sub> 膜を成長して p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si ヘテロ接合型太陽電池を作製したことが述べられている。テクスチャ構造を採用することで、短波長から長波長の広い波長領域において、10%以下の反射率を達成したことが、本構造の長所として挙げられている。一方、エッチング時に生じた Si{111}面上の原子ステップが、ヘテロ界面における欠陥の起源となり、エネルギー変換効率は 5%程度と予想を下回った。今後、平坦な Si{111}面を得ることが課題であると説明されている。

第4章では、平坦な n-Si(001)基板の上に p-BaSi<sub>2</sub> 膜を成長して p-BaSi<sub>2</sub>/n-Si ヘテロ接合型太陽電池を作製したことが述べられている。エネルギー変換効率は 10%に達し、n-Si(111)基板の上のヘテロ接合型太陽電池と遜色ない特性が得られたことが述べられている。

第5章では、タンデム型太陽電池への適用可能性を調べるため、高濃度に不純物をドーピングした p<sup>+</sup>-BaSi<sub>2</sub>/p<sup>+</sup>-Si トンネル接合上への BaSi<sub>2</sub> 膜の成長について述べられている。一般に、高濃度に不純物をドーピングした膜は、結晶の配向性が乱れているため、その上への高品位膜の結晶成長は容易ではない。本論文では、p<sup>+</sup>-BaSi<sub>2</sub> 膜の膜厚を 10nm 程度に制限することで、その上に形成した BaSi<sub>2</sub> 光吸収層の高品位成長に成功し、高い分光感度の実証もなされている。

第6章では、BaSi<sub>2</sub> ホモ接合型太陽電池および結晶 Si 太陽電池とのタンデム型太陽電池について、太陽電池特性をデバイスシミュレータで計算した結果が述べられている。BaSi<sub>2</sub> ホモ接合型太陽電池では、光吸収層の厚さが 2μm で、エネルギー変換効率が 23%に達すること、また、タンデム型太陽電池においては、禁制帯幅を 1.6eV に拡大することで、エネルギー変換効率が 30%を超えることが示されている。

以上より、BaSi<sub>2</sub> 太陽電池が、工業生産量の多い Si(001)基板にも適用できることが明確になり、また、他の材料では到達できない高いエネルギー変換効率を達成できると示されたことで、BaSi<sub>2</sub> が新規薄膜太陽電池材料として高い可能性をもつことが示されたと結論付けられている。

## 審 査 の 要 旨

[批評]

BaSi<sub>2</sub> 膜との格子不整合率が 10%近くある Si(001)基板上で、Si(111)基板上とほぼ同程度のエネルギー変換効率が達成されたことは、高く評価できる。Si(001)基板と Si(111)基板上の BaSi<sub>2</sub> 膜の違いは、結晶粒のサイズであり、前者は 2-7μm 程度であるのに対し、後者は 0.2μm と小さい。このため、Si(001)基板上の BaSi<sub>2</sub> 膜では、キャリアの移動度が大きく、これが、格子不整合率が大きいマイナス点を補っていると考えられる。また、デバイスシミュレータを用いて、実験で得られた小数キャリア拡散長等の物性値を入力して、デバイス層構造の膜厚、キャリア密度等のパラメータにより、BaSi<sub>2</sub> 太陽電池のエネルギー変換効率がどのように影響を受けるか議論できた点も高く評価できる。

BaSi<sub>2</sub> 膜中のキャリアの散乱機構については、n-BaSi<sub>2</sub> および p-BaSi<sub>2</sub> について、キャリア移動度の温度特性を、さまざまな散乱機構を取り入れて説明がなされた。その中で、非極性光学フォノン散乱の影響が、Si(001)と Si(111)基板上の BaSi<sub>2</sub> では異なるとの説明があったが、非極性光学フォノン散乱は等方的な散乱機構であるので、結晶の方位でその影響が変わるのは疑問であるとの指摘があった。この指摘に対して、BaSi<sub>2</sub> のエネルギーバンド構造等の物性に関わるデータを示しながら的確な回答がなされた。

〔最終試験結果〕

平成31年2月8日、数理物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によって、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。